

Winmostar チュートリアル
LAMMPS
伸長計算(ポリマー)
V8.000

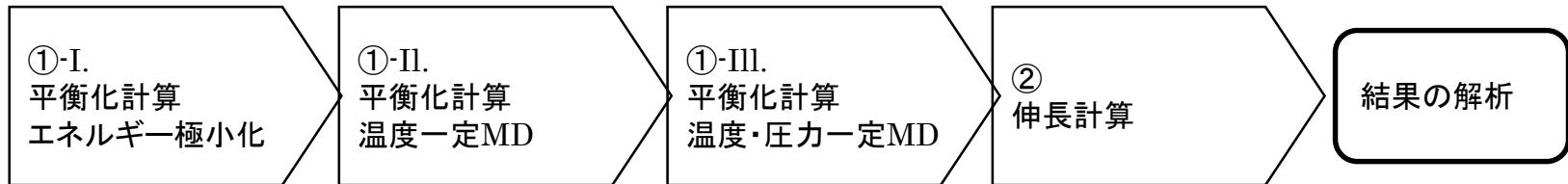
株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2017/10/01

概要

- ポリエチレン溶融体の伸長過程を計算し、ひずみ-応力の取得を行います。処理のフローを以下に示します。温度・圧力一定MDは、平衡化に掛かるステップ数を短縮するために、一旦高圧(200 atm)に制御した後常圧に戻します。



注意点:

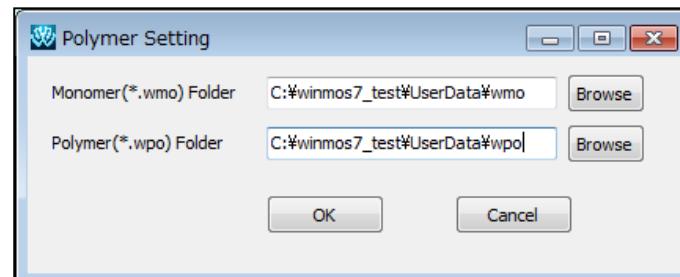
- 分子の種類、初期密度に応じて平衡化に必要なステップ数は変化します。
- 相互作用の計算方法、力場、電荷の算出方法も結果に影響を与えます。
- 重合度(鎖長)、分子数、伸長速度、圧力制御(ポアソン比)も結果に影響を与えます。
- チュートリアルという性質上、ここではポリマー系の平衡化に十分なステップ数の計算を実施しません。

環境設定

- LAMMPS及びCygwinの入手とセットアップ
以下のリンク先の「Windows版LAMMPSのインストール手順」に従い、LAMMPSおよびCygwinをセットアップする。
https://winmostar.com/jp/manual_jp.html



- ポリマーツールの設定
[MD]->[ポリマー]->[設定] (下図)で、必要に応じてモノマーファイル(拡張子.wmo)とポリマーファイル(拡張子.wpo)の格納フォルダを指定する。

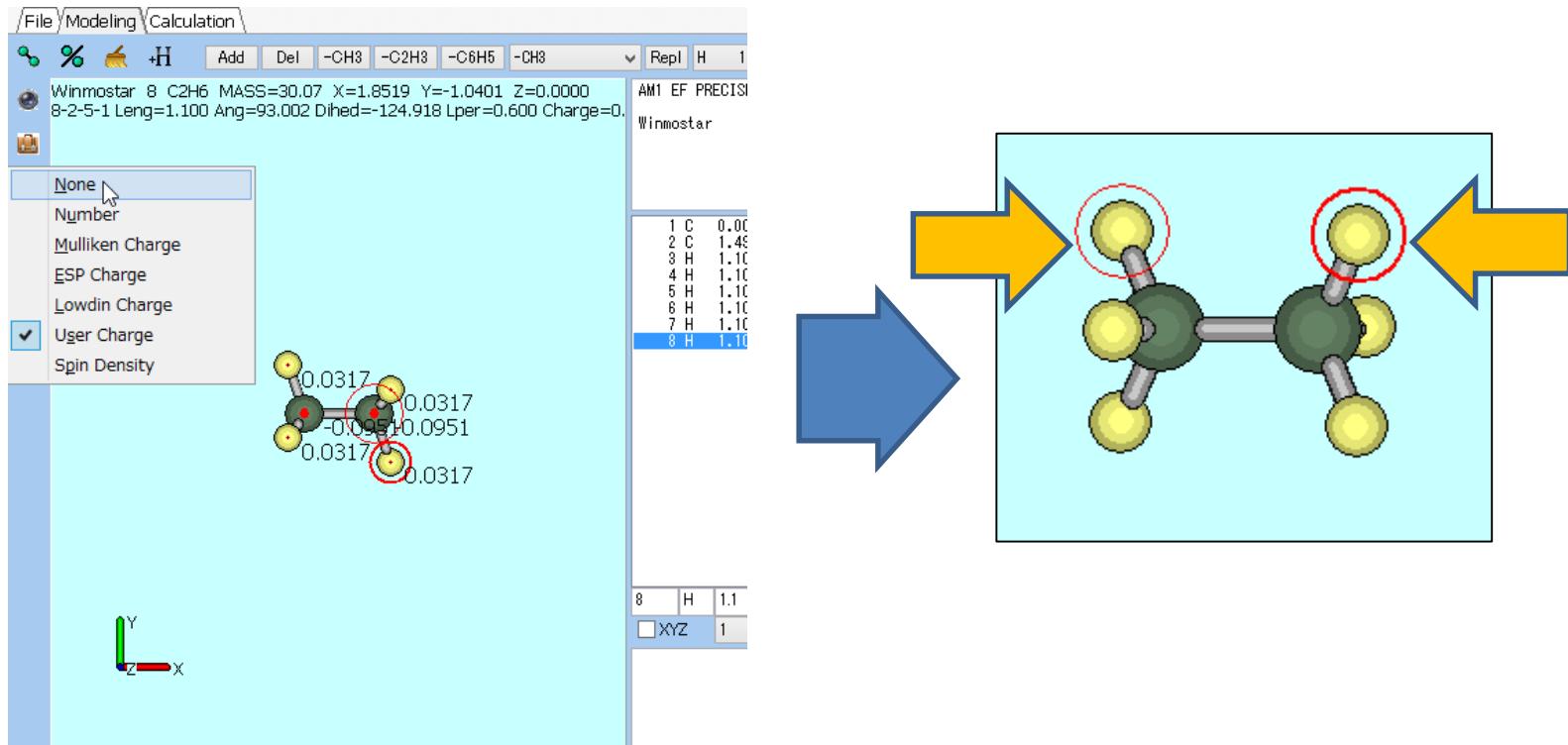


I. モノマーを登録

まず、ポリエチレンの繰り返し構造(エタン、 C_2H_6)をメイン画面上で作成する。

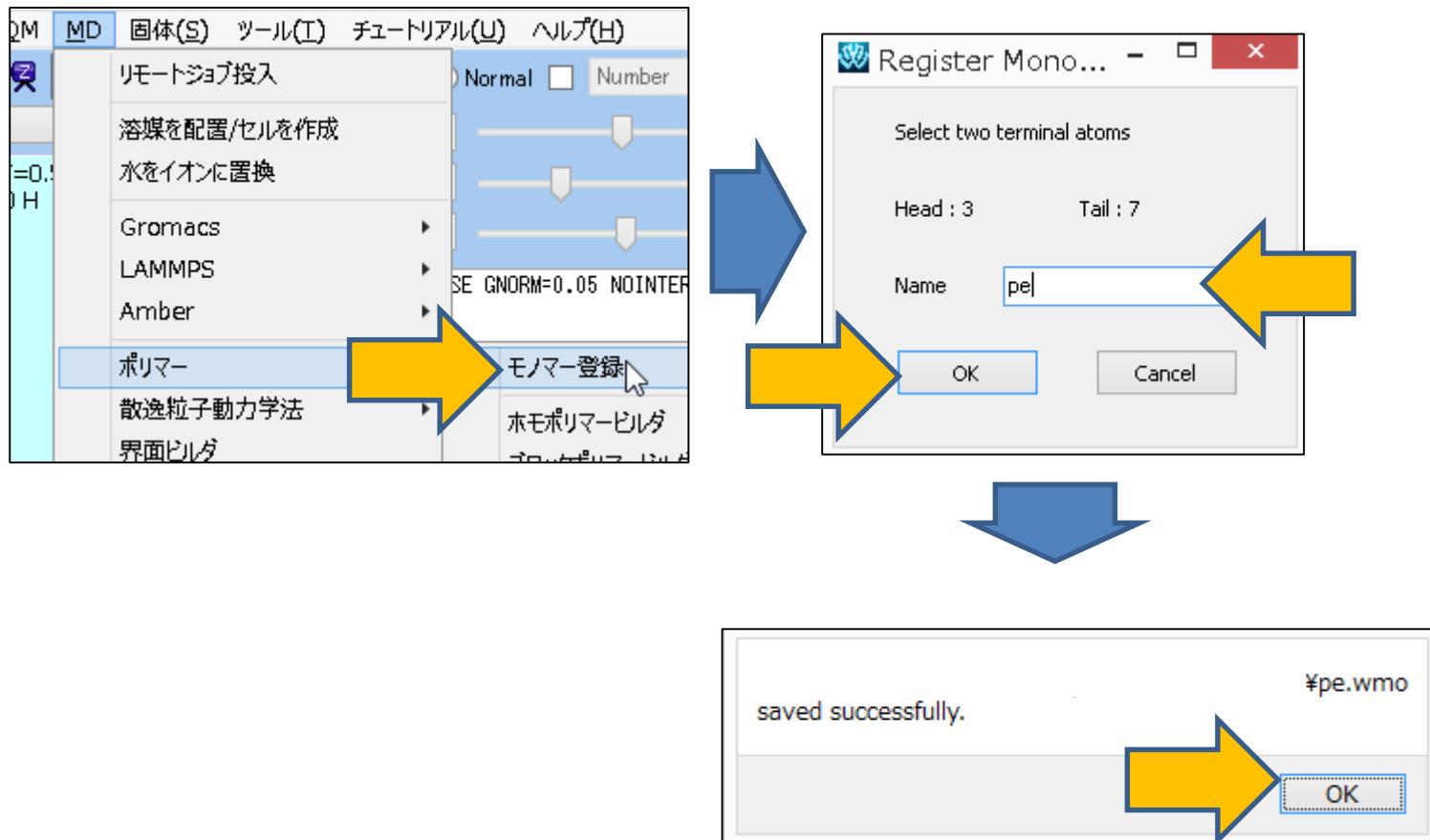
次に、[MD] – [電荷割り当て] – [Acpypeを使用]とする。

電荷を非表示にしたい場合はメイン画面左のアノテーションボタンで「None」を選ぶ。
 最後に、重合した際に隣のモノマーと結合する2箇所を続けて左クリックする。



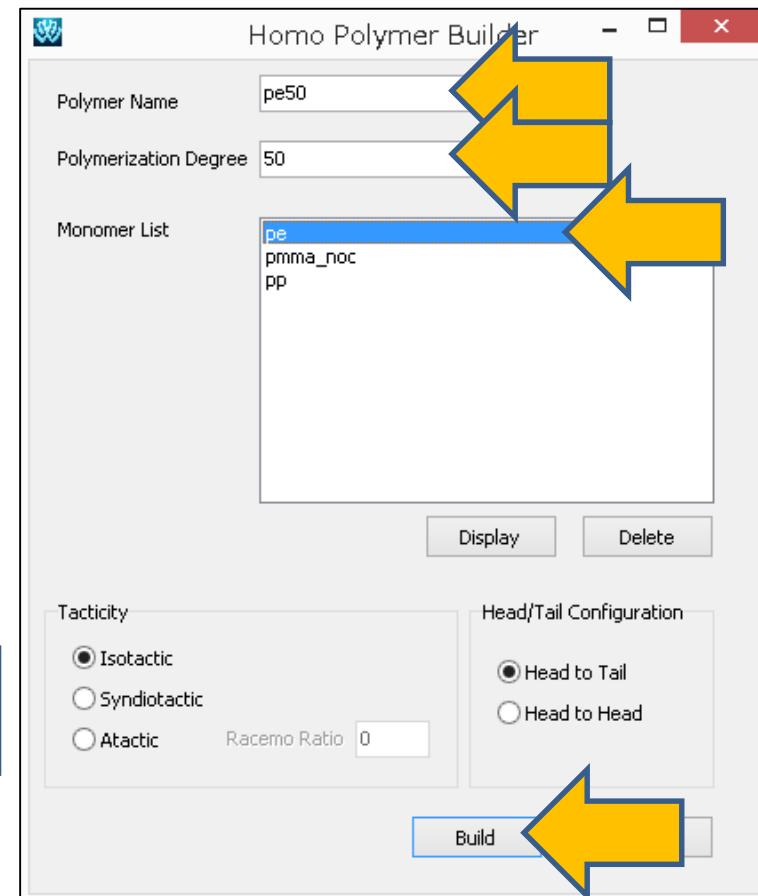
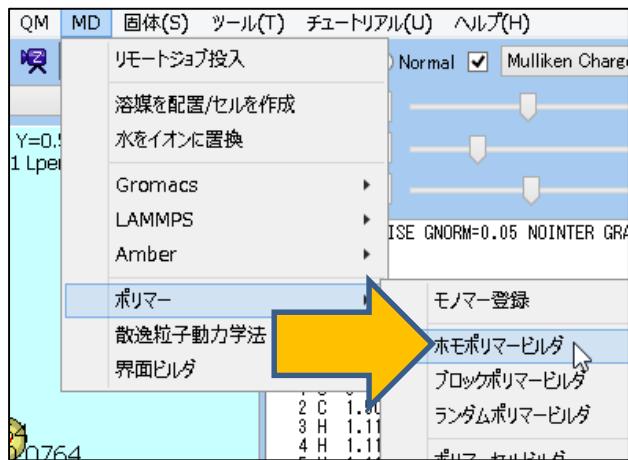
I. モノマーを登録

[MD]-[ポリマー]-[モノマー登録]にて、「Name」に「pe」と入力し「OK」とする。
登録が成功した旨を伝えるダイアログが出現するので「OK」とする。



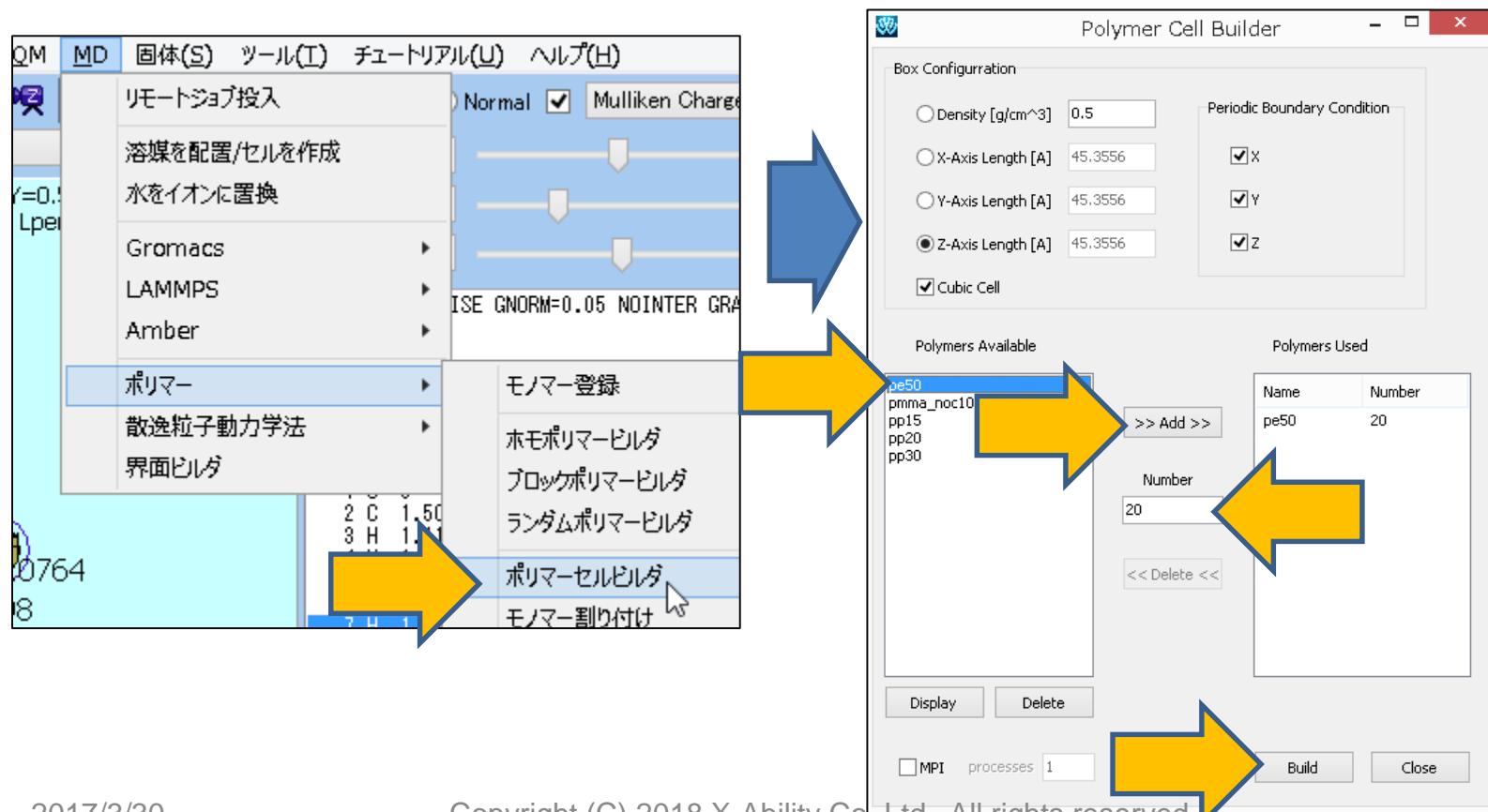
II. ポリマーを定義

[MD]-[ポリマー]-[ホモポリマービルダ]にて、「Polymer Name」に「pe50」、「Polymerization Degree」に「50」、「Monomer List」で「pe」を選択し、「Build」し、「Close」する。



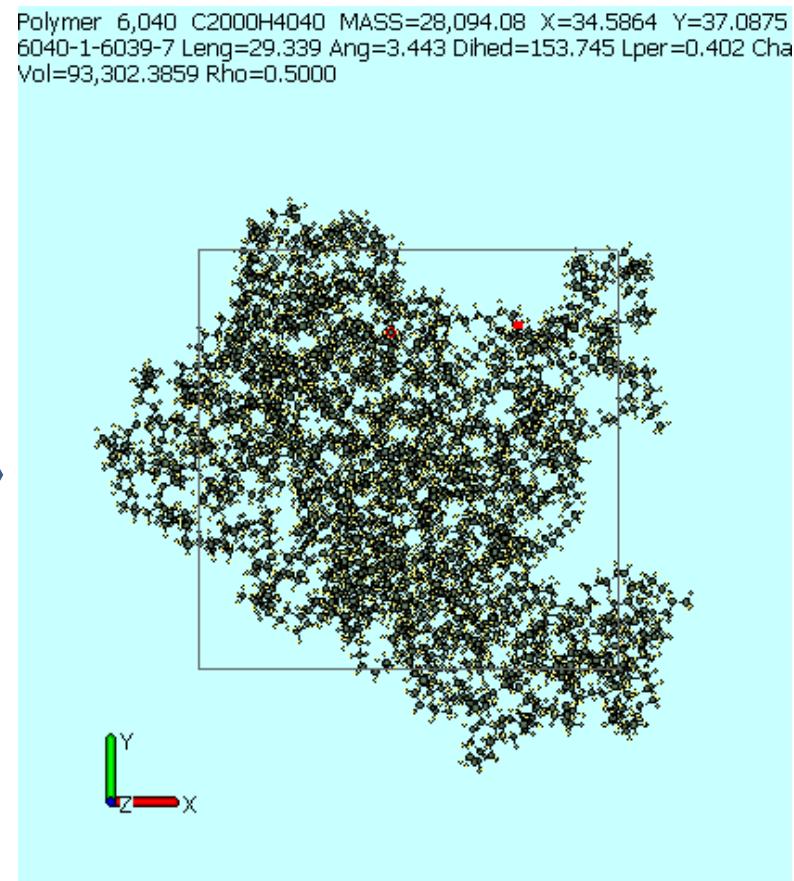
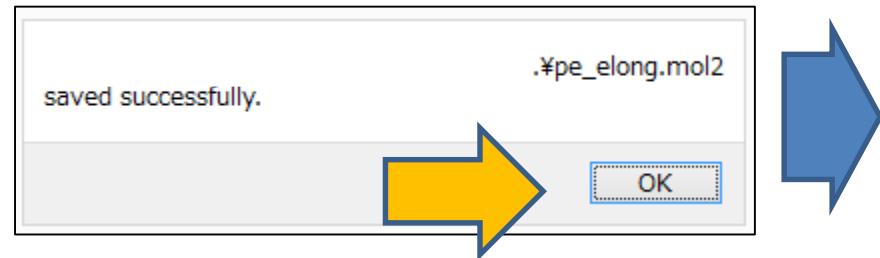
III. 系を作成

[MD]-[ポリマー]-[ポリマーセルビルダ]にて、「Polymers Available」から「pe50」を選択し、「Number」を「20」とし「Add」する。その後「Build」する。
保存時のファイル名は仮に「pe_elong.mol2」とする。



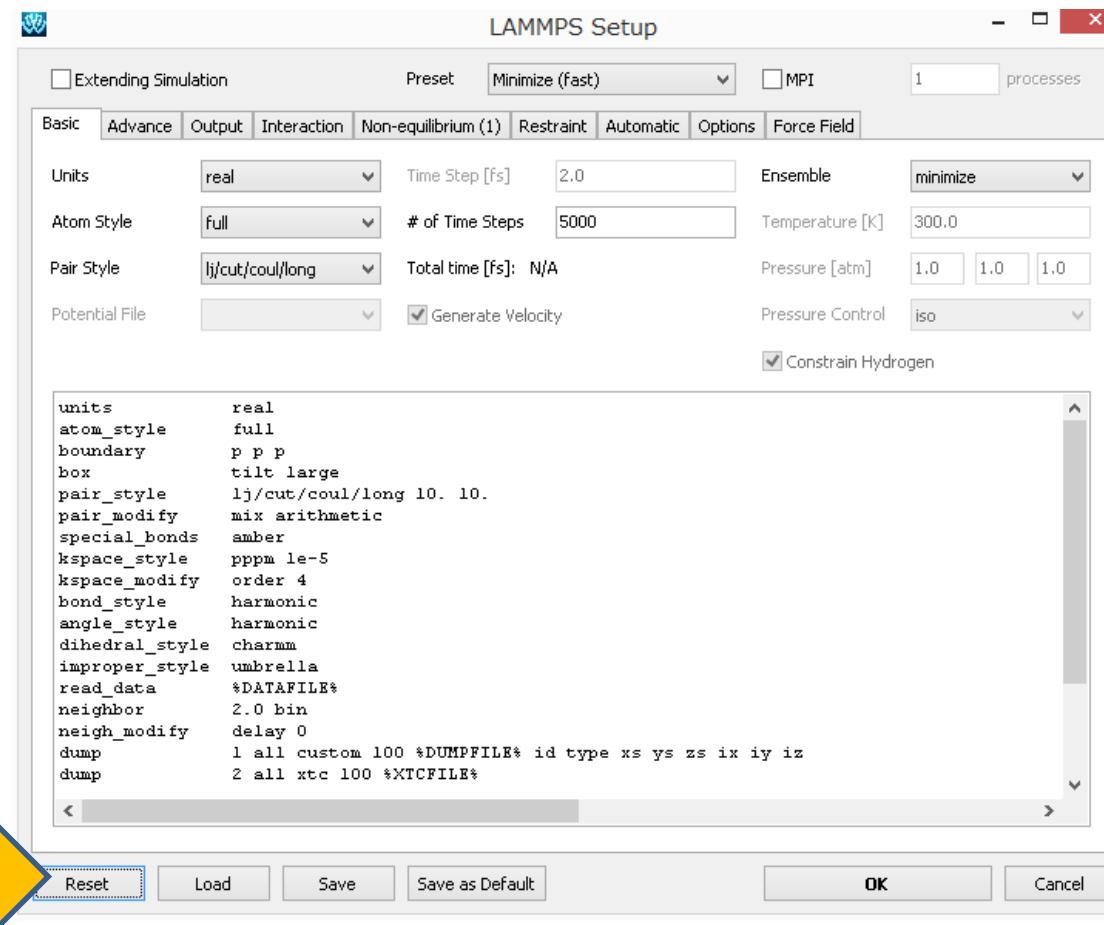
III. 系を作成

作成が成功したことを告げるダイアログを閉るとメイン画面に系が表示される。
ポリマーセルビルダは「Close」する。



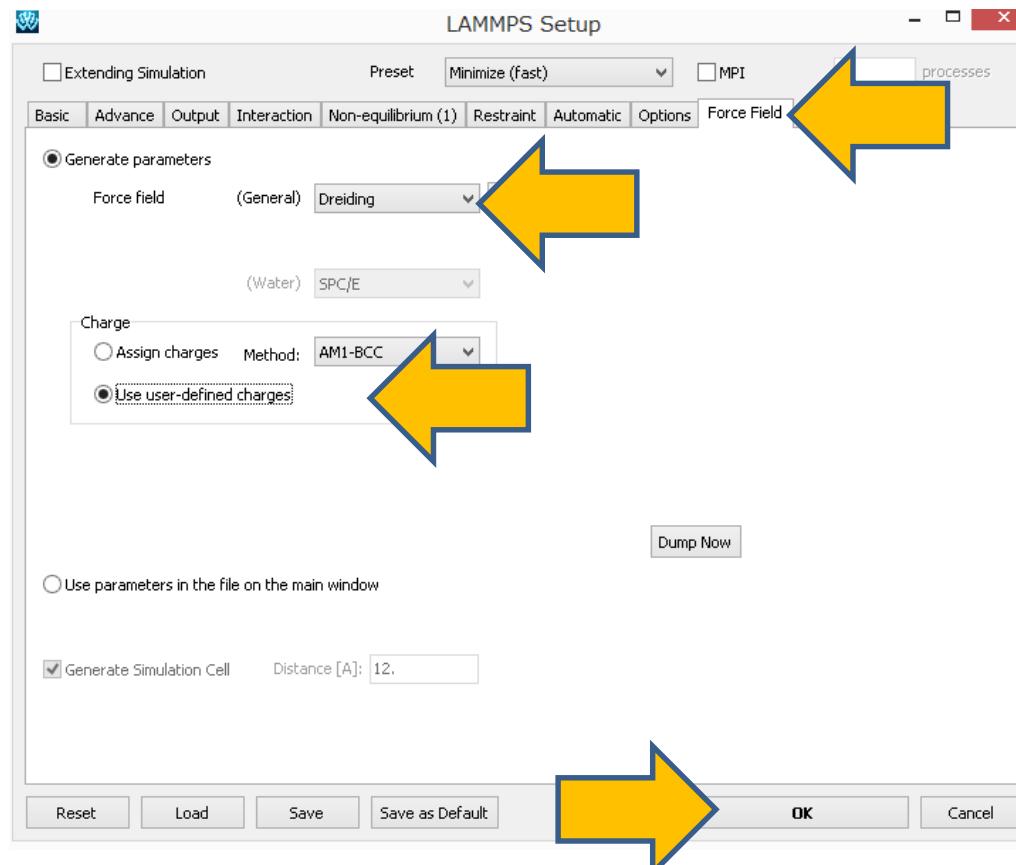
IV. 平衡化計算

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Reset」をクリックする。



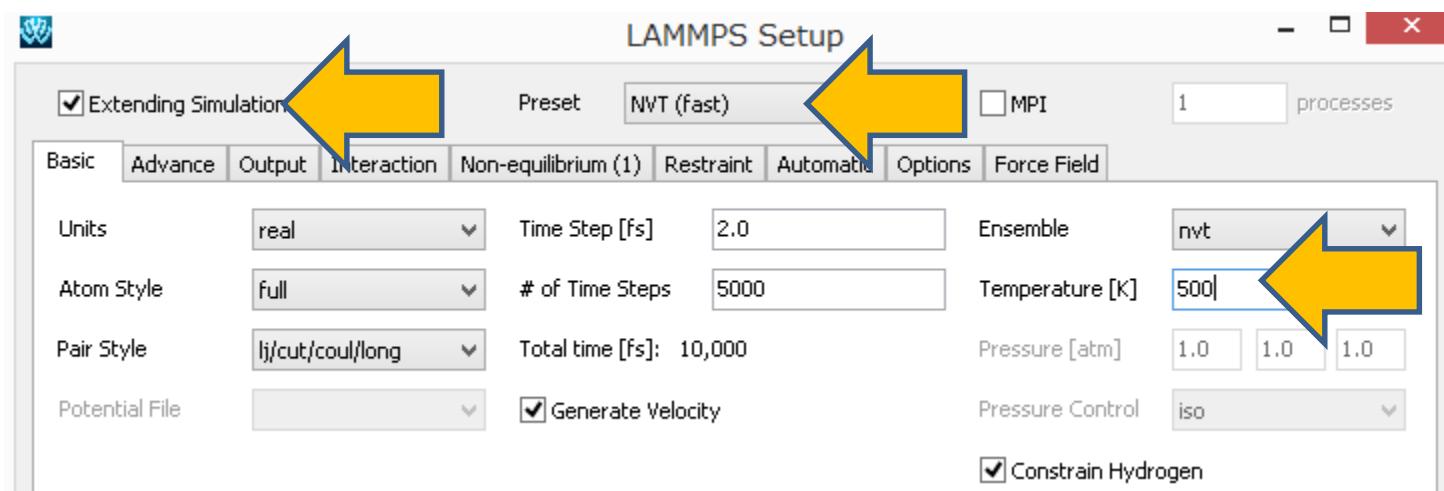
IV. 平衡化計算

「Force Field」タブを選択し、「Force Field」に「Dreiding」、「Charge」に「Use user-defined charges」を選択し、「OK」する。
その後、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]とする。



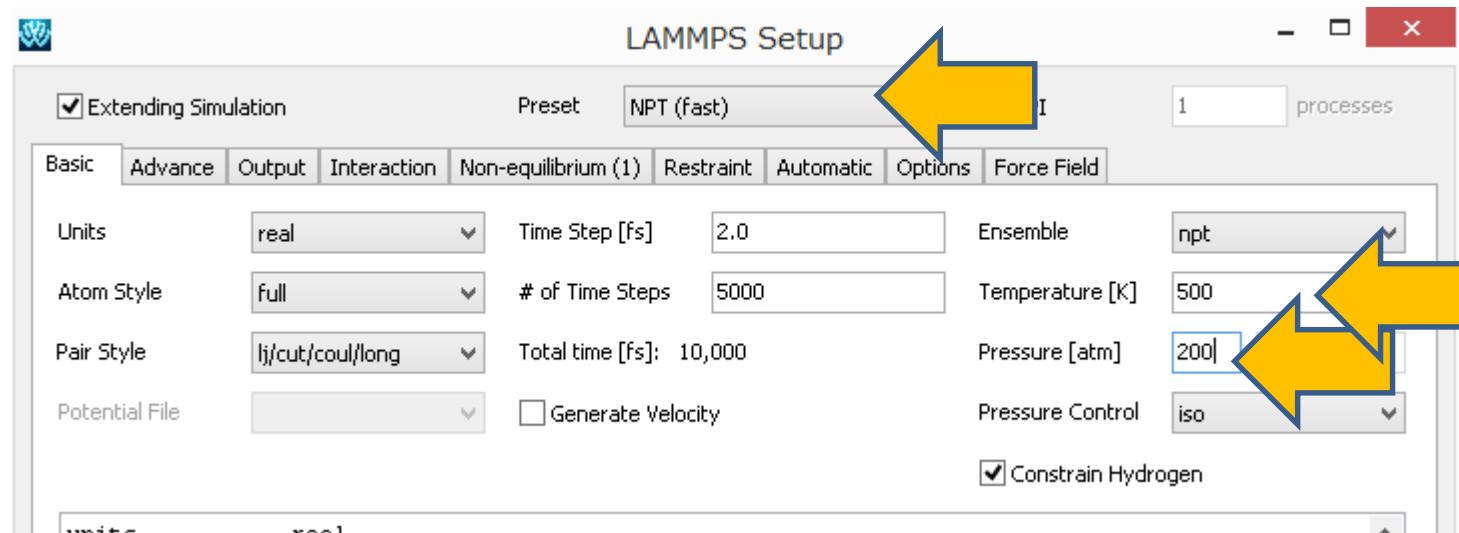
IV. 平衡化計算

計算終了後、同様に[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Extending Simulation」にチェックを入れ、「Preset」に「NVT (fast)」を指定し、「Temperature」は「500」に変更し「OK」する。その後、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]とする。



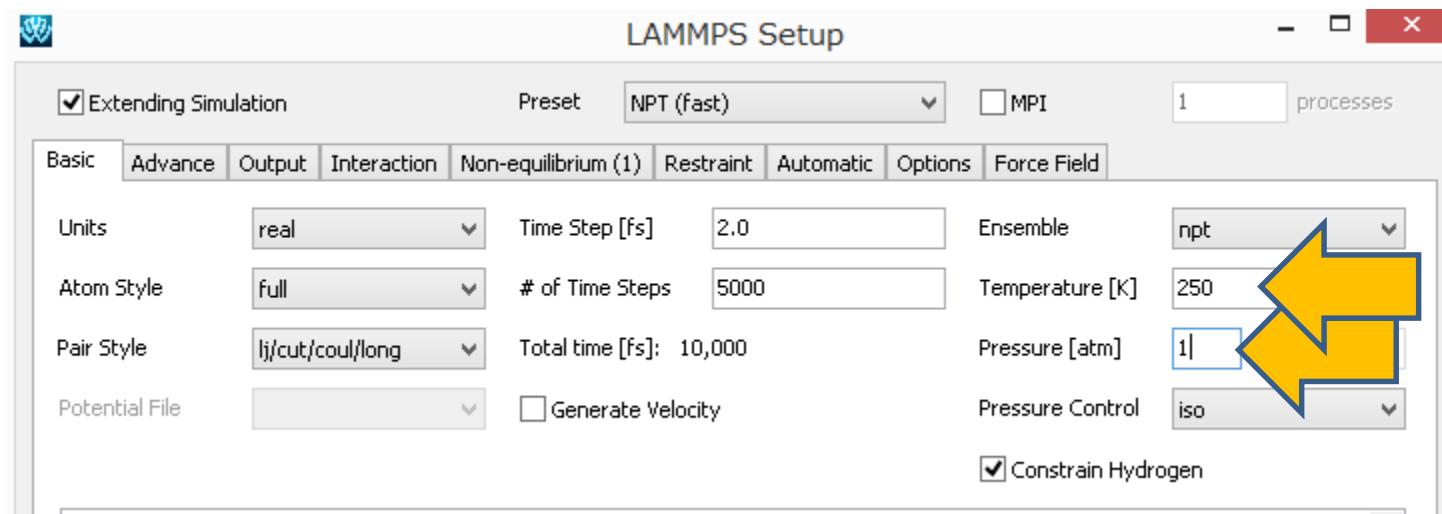
IV. 平衡化計算

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Preset」に「NPT (fast)」に設定し、「Temperature」を「500」、「Pressure」を「200」に変更し、「OK」する。
その後、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]とする。



IV. 平衡化計算

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Basic」タブの「Temperature」を「250」、「Pressure」を「1」とし、「OK」する。
その後、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]とする。

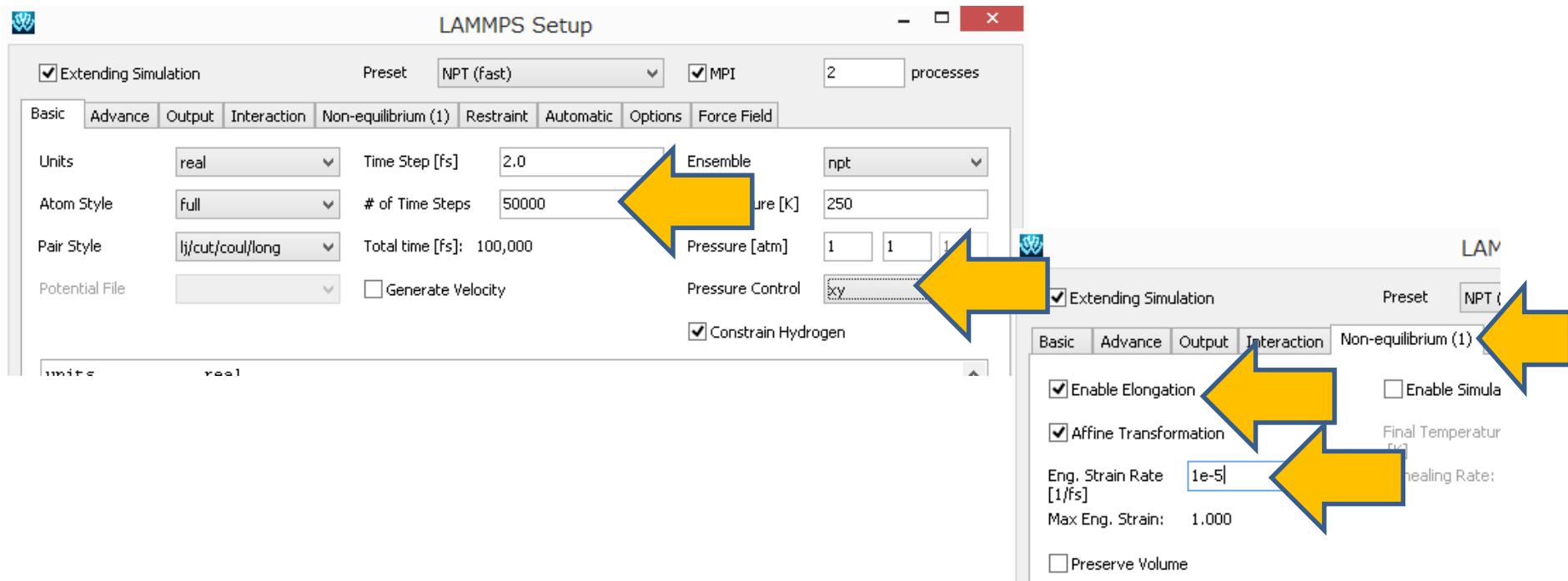


V. 伸長計算

次に、ひずみ-応力(S-S)曲線算出を目的として、伸長計算を行う。

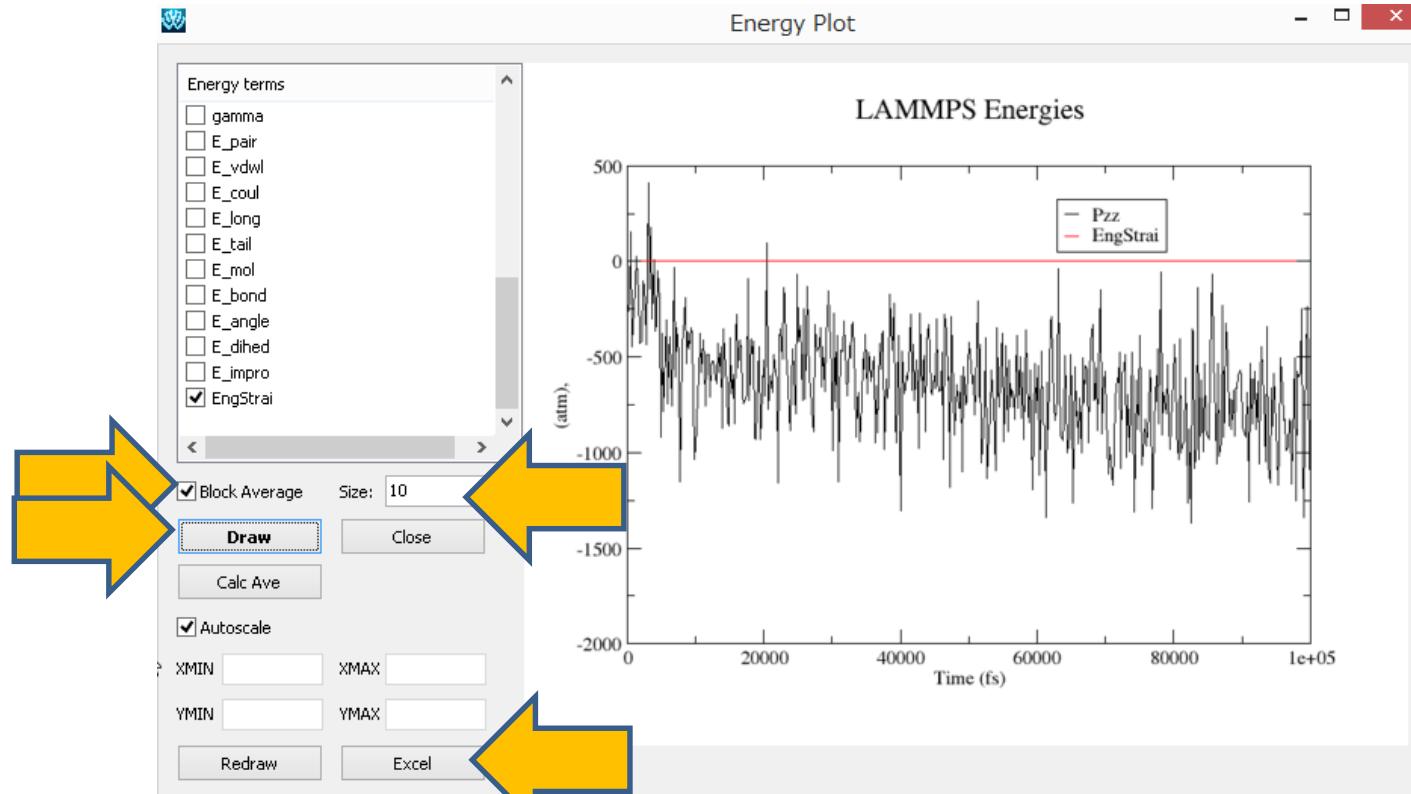
[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Basic」タブの「# of Time Steps」を「50000」、「Pressure Control」を「xy」とし、「Non-equilibrium (1)」タブの「Enable Elongation」にチェックを入れ、「Eng. Strain Rate」を「1e-5」にし、「OK」する。

その後、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]とする。



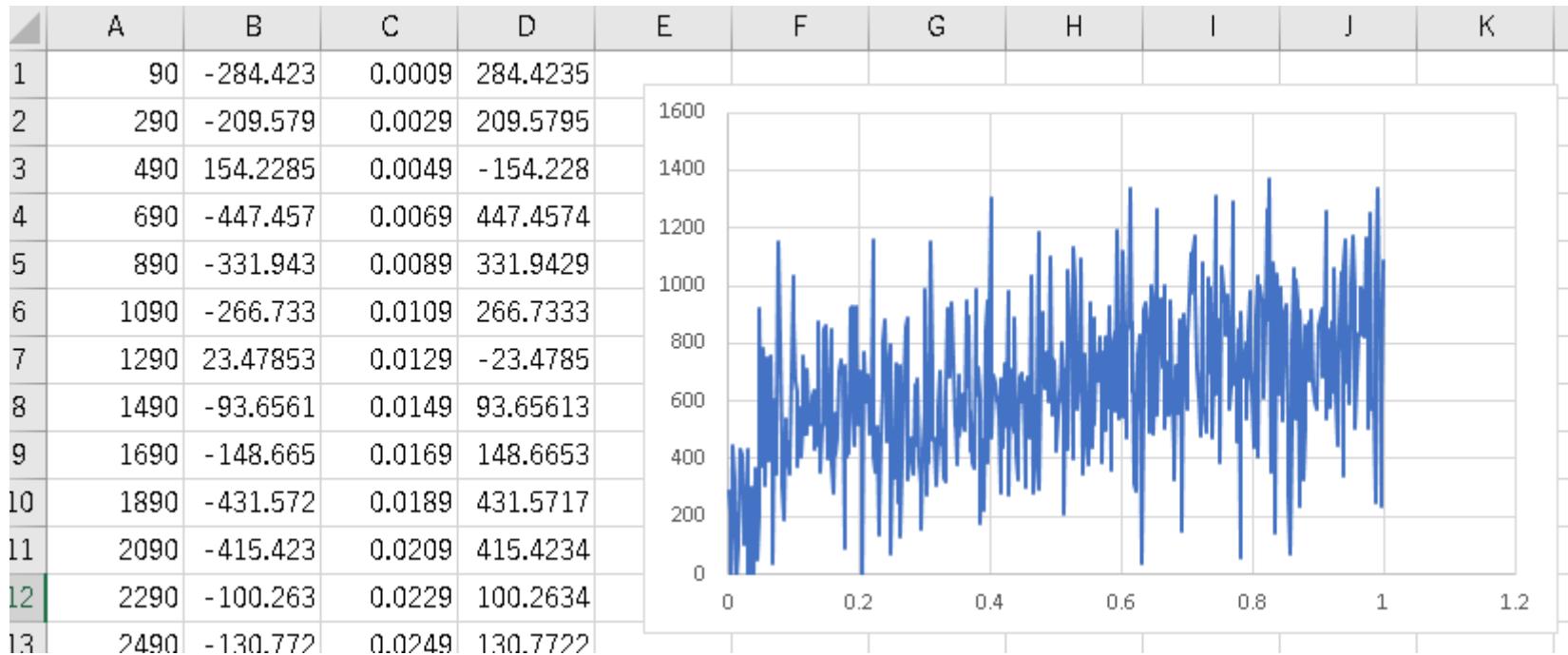
V. 伸長計算

計算終了後、[MD]-[LAMMPS]-[エネルギー変化]にて、デフォルトで選ばれるファイルを選び、「Energy terms」にて「Pzz」(z方向の圧力)、「EngStrai」(工業ひずみ)にチェックを入れ、「Block Average」にチェックを入れ「Size」を「10」とし、「Draw」をクリックした後「Excel」を押す。



V. 伸長計算

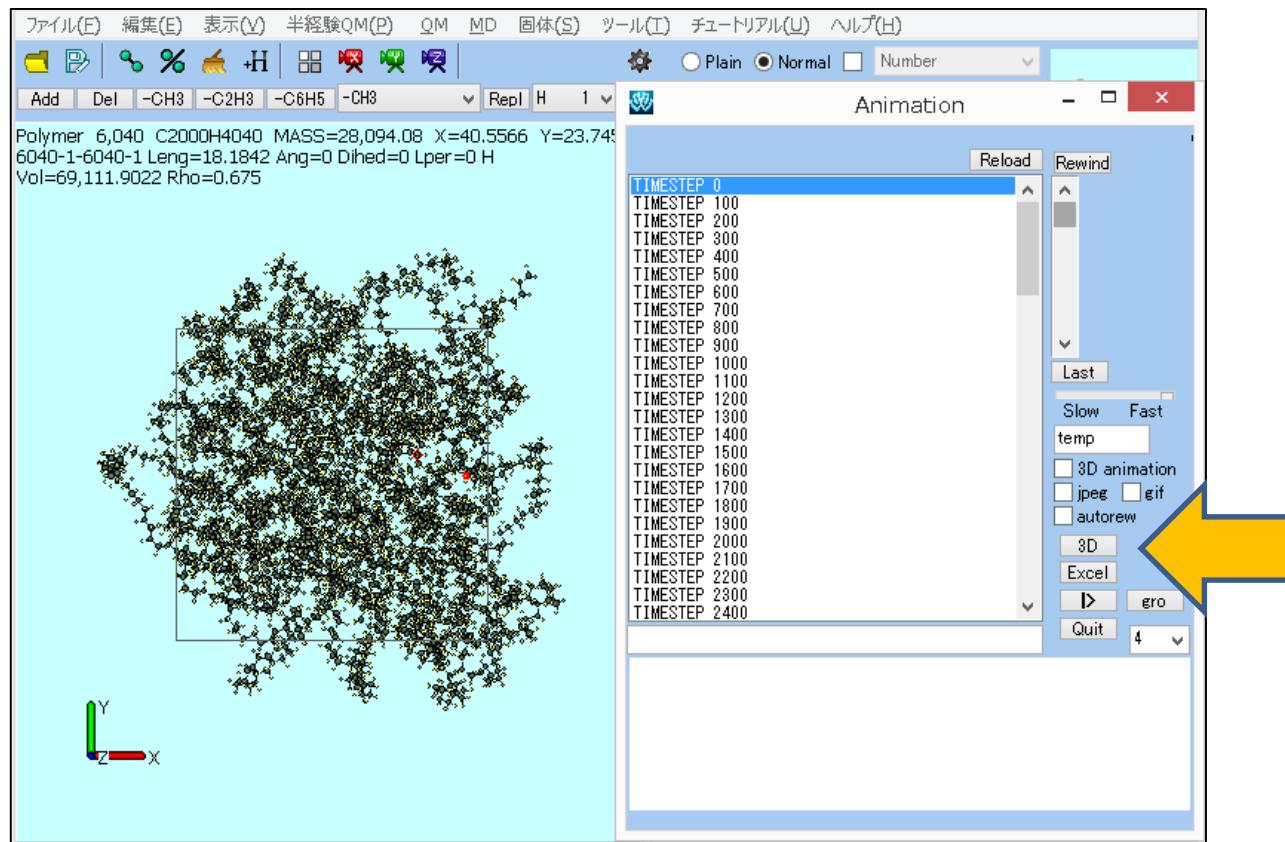
3列目と、2列目に-1を掛けた列(ここではD列)をプロットする。これはひずみ-応力曲線(S-S曲線)に相当する。
 (ここでは縦軸の下限は0としてプロットした)



参考文献: Hossain, D., Tschopp, M.A., Ward, D.K., Bouvard, J.L., Wang, P., Horstemeyer, M.F., Polymer, 51 (2010) 6071-6083.

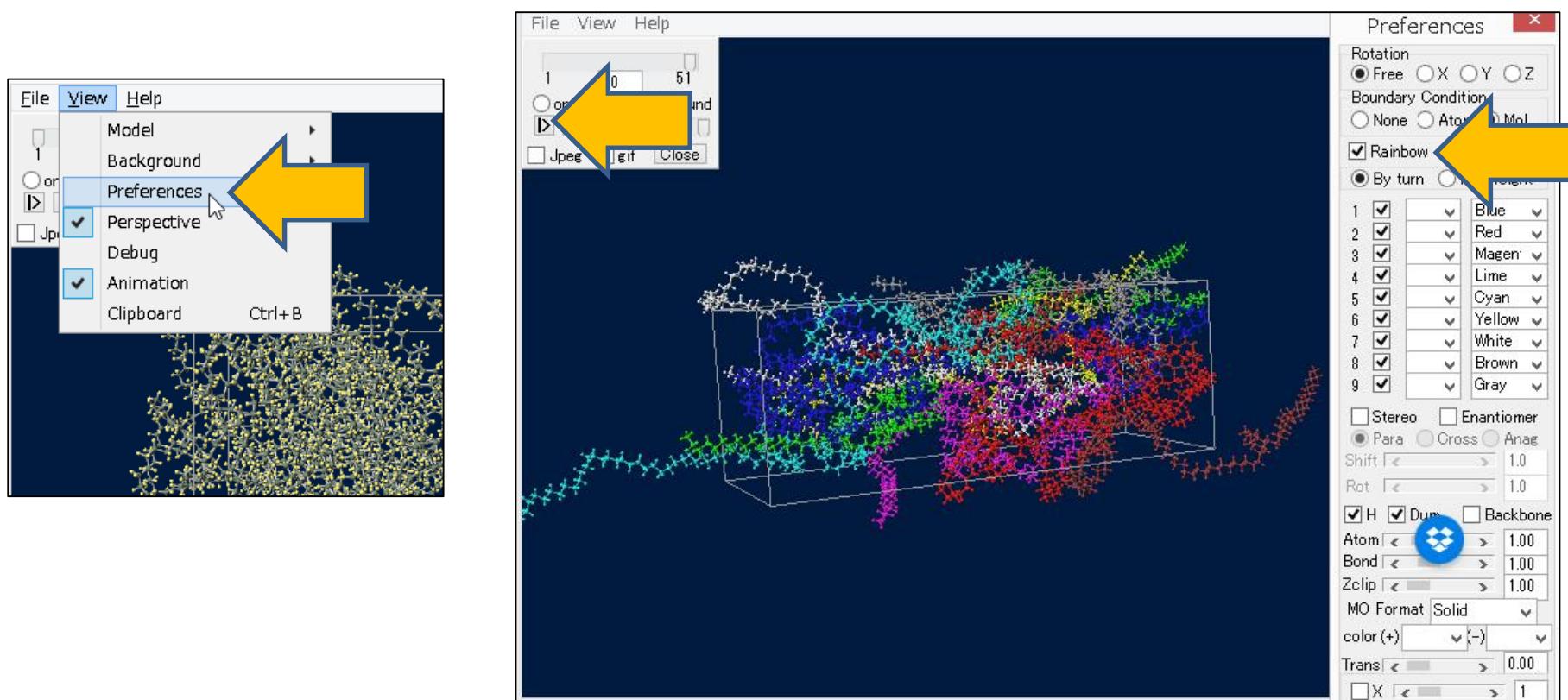
V. 伸長計算

Winmostarに戻り[MD]-[LAMMPS]-[トラジェクトリ読み込み]にて、デフォルトで選ばれるファイルを開く。そして、「Animation」ウィンドウの「3D」をクリックする。



V. 伸長計算

起動したWinmostar 3Dの[View]–[Preferences]を選び、「Preferences」パネルにて「Rainbow」をチェックする。画面左の「|>」(再生)ボタンを押し、ポリマーが引き伸ばされる様子を観察する。



facebook アカウント登録 メールアドレスまたは携帯番号 パスワード
■ ログインしたままにする ログイン パスワードを忘れた場合

X-Ability Co.,Ltd.
さんはFacebookを利用しています。
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の
アカウント登録 ログイン

X-Ability Co.,Ltd.
コンピュータ・テクノロジー

いいね！

タイムライン 基本データ 写真 いいね！ 動画

ユーザー >
いいね！38件

情報 >
http://x-ability.jp/

写真 >

山口 達明
最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。
http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_detailpage_o00_s00...

フロンティアオービタルによる新有機化学教程
フロンティアオービタルによる新有機化学教程
AMAZON.CO.JP

いいね！ コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)
11月9日 21:38