M winmostar チュートリアル

LAMMPS 固体壁面を含む系

V11.6.4 2024年9月23日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2024 X-Ability Co., Ltd.



- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方はビギナーズマニュアルを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
 - Winmostar導入講習会:基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
 - <u>Winmostar基礎講習会</u>:理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
 - 個別講習会:ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず<u>よくある質問</u>を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の 再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾な く、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。



 本チュートリアルでは、固体壁と流体(気体または液体)を含む系の例として、2枚のグラ フェンに挟まれた領域における水の挙動を観察する手順を示します。



注意点:

- ターゲットとなる物質の種類、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、力場の種類、スーパーセルのサイズも結果に影響を与えます。
- ここでは固体壁の座標を完全に固定するため、固体壁付近の系内の温度が局所的に低くなる点 に注意してください。



- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、CygwinWM 2023/04/05 バージョン以降をインストール、環境設定してください。
 - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版LAMMPSが同梱されています。
- 上記に該当しない場合、または<u>推奨バージョン</u>以外のLAMMPSを利用したい方は、別途 <u>Windows版LAMMPSのインストールと環境設定</u>が必要です。

Winmostar V11の動作モード

V11にはプロジェクトモードとファイルモードの2つの動作モードが用意されています。 本書ではプロジェクトモードでの操作方法を解説します。 ファイルモードの操作方法はV10のチュートリアルを参照してください。

Winmostar (PREMIUM) V11.0.1

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(D) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)



基本的な操作方法はLAMMPS基礎編チュートリアルを参照してください。

1. ファイル | 新規プロジェクトをクリックし、プロジェクト名に「gwg」と入力して保存をクリックします。

初期構造の作成方法の詳細はWinmostarユーザマニュアル 5.初期構造の作成方法を参照してください。ここでは既存の分子構造ファイルを読み込ませます。

- 2. ファイル | インポート | Samplesファイル | graphite.cifをクリックします。
 - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりにファイル | ファイルをインポートを使います。
- 3. ファイルをインポートダイアログで破棄して読み込みをクリックします。



- 1. 固体 | スーパーセルを作成をクリックします。
- **2.** a, b, cをそれぞれ「20」「12」「1」に変更しOKをクリックします。
- 3. ① (ファイルをエクスポート)をクリックし「graphene.cif」というファイル名で保存します。



- 1. (溶媒を配置/セルを構築)をクリックします。
- 2. Add Waterをクリックし、250と入力してOKをクリックします。
- 3. Set Lattice Constantsにチェックを入れ、Same as main windowをクリックします。
- 4. Change only one directionをクリックし、Select directionではそのままOKをクリックし、Enter densityで「0.05」と入力しOKをクリックします。
- 5. Buildをクリックし、「系の作成に成功しました」と表示されたらOKをクリックします。

| | | 🚾 Solvate/Build Cell | | | | - 🗆 × | |
|--------------------|-------------|------------------------|------------|----------------|----------------|-------------|---|
| | | Name | # Mol | Position | mol/L ~ | Composition | |
| | | WATER | 250 | Random | 2.775 | H2O | |
| | | | | | | | |
| | | | | | | | |
| | | Add Displayed Molecul | e / | Add File (mol: | 2,wmm,etc.) | elete | |
| | | Add SMILES | | Add Wat | er 🧹 | | |
| | | | | | | | |
| | | Simulation Cell Option | | | | | |
| | | ◯ Set Density | | 0.05 | | g/cm^3 ∨ | |
| | | O Set Margin from Solu | ute [nm] | | | | |
| | | Set Lattice Constant | ts [nm] | 4.912 5 | . 1048 5.9 | 965172 | |
| | | An | gles [deg] | 90.00000 9 | 0.00000 90. | .0000C | |
| | | | | Same a | s main windov | | |
| | | | | Change on | ly one directi | on | |
| | | Box Type | | triclinic | | | _ |
| | | Total Number of Atoms | : 750 | | | | |
| | | Reset | | | Build | | |
| M winmostar | Copyright 2 | 008-2024 | + X- | Ability | / Co., | Ltd | |

- 1. MD | 界面ビルダをクリックします。
- 2. Cell 1の...ボタンをクリックし、P.7で保存したgraphene.cifを選択します。
- 3. Buildをクリックし、「正常に系が作成されました」と表示されたらOKをクリックします。

| nterface Builder | Cell Direction Repeat |
|--|---|
| | Cell 1 |
| | O Use displayed cell |
| | Load from file C:¥winmos11¥UserData¥gwg.wmp; |
| | a: 49.1200 [A] Alpha: 90.0000 [deg] |
| 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 1 | b: 51.0480 [A] Beta: 90.0000 [deg] |
| | c: 6.6960 [A] Gamma: 90.0000 [deg] |
| | Coordinates of outmost atoms on selected axis [A]: Cell 2 © Use displayed cell |
| | O Load from file |
| Z | a: 49.1200 [A] Alpha: 90.0000 [deg] |
| k → Y | b: 51.0480 [A] Beta: 90.0000 [deg] |
| | c: 59.6517 [A] Gamma: 90.0000 [deg] |
| N= 2670 rho= 0.252 g/cm^3 a= 49,120 b= 51.048 c= 72.348 | Coordinates of outmost atoms on selected axis [A]: 58.1429 |
| aipna= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000 | |
| | Build Close |

- 1. MD | 界面ビルダをクリックします。
- 2. Cell 2の...ボタンをクリックし、P.7で保存したgraphene.cifを選択します。
- 3. Buildをクリックし、「正常に系が作成されました」と表示されたらOKをクリックします。

| m | nterface Builder | - U X |
|----|--|--|
| | | Cell Direction Repeat |
| | | Cell 1 |
| 12 | | Use displayed cell |
| | | O Load from file |
| | | a: 49.1200 [A] Alpha: 90.0000 [deg] |
| | 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - 1 - | b: 51.0480 [A] Beta: 90.0000 [deg] |
| | an a | c: 72.3477 [A] Gamma: 90.0000 [deg] |
| | | Coordinates of outmost atoms on selected axis [A]: 69.3389 |
| | | |
| | State Carl Harry | |
| | | load from file C:#winmos11#UserData#gwg.wmpi |
| | Z | a: 49.1200 [A] Alpha: 90.0000 [den] |
| | t | b. 51.0480 [A] Beta. 90.0000 [deg] |
| | • Y | |
| | | c: 6.6960 [A] Gamma: 90.0000 [deg] |
| | N= 4590 rho= 0.394 g/cm^3 a= 49.120 b= 51.048 c= 85.044 | selected axis [A]: |
| | alpha = 90.000 beta = 90.000 gamma = 90.000 | |
| | - + 7% | Build Close |

1. 🚾 (X軸方向から表示) をクリックしてから 🛛 🔯 ウィンドウに合わせる) をクリックします。

- 2. Ctrl+ドラッグで、下のグラフェン2層のうち下の1層を矩形選択します。原子が見づらい場合は、Shift+ドラッグで視点を平行移動させます。
- 3. **♂**(**グループ編集**) | **グループを削除**をクリックし、「Do you want to delete or leave group?」と聞かれたら**Delete**をクリックします。



- 1. 同様にして、上のグラフェン2層のうちの上の1層も削除します。
- 2. 🗊 (**セルを作成/編集**) | **セルを変形**をクリックします。
- **3. Set incremental length**を「5」に変更し、**Atomic positions**の**Do not change**にチェッ クを入れ、**OK**をクリックします。

| Set incremental length Set total length [A] Set total length [A] Set normal strain [-] Set density [g/cm^3] Transform by shear strain Transform by shear strain Transform by angle photocology N= 2670 rho= 0.203 g/cm^3 a = 49.120 b= 51.048 c= 90.044 | | | How to transform cell Transform only along the selected axis Axis c Direction Change both sides |
|---|--|---|---|
| N= 2670 rho= 0.203 g/cm^3 a= 49.120 b= 51.048 c= 90.044 | | | Set incremental length [A] Set total length [A] Set total length [A] Set normal strain [-] 0.0 O Transform similarly Target Density [g/cm^3] 0.21465 O Transform by shear strain xy 0.0 O Transform by angle alpha 90.00000 2. Atomic positions Move with keeping fractional coordinate Keep intramolecular dinates © Do not change |
| alpha= 90.000 beta= 90.000 amma= 90.000 | V= 2670 rho= 0.203 g/cm^3 a= 49, 120 b= 51.048 c= 90.044 alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.00 | 0 | Density of original cell [g/cm 3] 0.21465 |

- 1. 選択 | 元素によるグループ選択をクリックします。
- 2. 「1 C 1920」の行をクリックし、Closeをクリックします。
- 3. 選択 | グループを登録をクリックし、グループ名に「graphene」と入力してOKをクリックします。

| W Select by | _ | | Х |
|---------------------------------|--------|------------------------|------|
| Use List Use Selection Language | | | |
| ○ Molecular Species ○ Molecules | Eler | ments | |
| ID Element # Ato | ms | | |
| 1 C 1920 | | $\boldsymbol{\langle}$ | |
| 2 O ¹ 250 | | | |
| 3 H 500 | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| Update List All None | Invert | Clos | se 🖌 |
| | | | |

- 1. ソルバからLAMMPSを選択し、 [1] (ワークフロー設定)をクリックします。
- 2. 「電荷が設定されていない分子が含まれます。電荷を設定しますか?」と表示されたらいいえ をクリックします。
- 3. Exceptionをクリックします。



| 🕺 力場を割り当て | | | _ | | × |
|---------------|---------------------|--------------------------|----------------------|---------|------|
| 力場を割り当てる方法 | まを選択してください | | | | |
| ◉ 自動でパラメータを | 割り当て | | | | |
| 検出され た分子 | 組成 C H2O C | 分子数 960 250 960 | 種類 一般 水分 一般 | 같)子 | |
| (一般) | GAFF | ~ Exception | | | |
| (タンパク質) | AMBER03 | \sim | | | |
| (水分子) | SPC/E | \sim | | | |
| □割り当て後編 | 集ウィンドウを開く | | Du | mp Now. | |
| ○ パラメータファイルを | 使用(無機物系、Re | axFF、散逸粒子 | 動力学 | 法向け) | |
| ○ メインウィンドウのフ | ァイルに書かれたパラッ | メータを使用 | | | |
| ○パラメータの割り当 | てをスキッブ | | | | |
| | < Back | ОК |] | Can | icel |

- 1. 左側のリストの1つ目のC960にチェックを入れ、右側のSigmaとEpsilonにそれぞれ 「0.343」、「0.439」(本書ではUFFのパラメータを使用)と入力します。
- 2. 同様に2つ目のC960にチェックを入れ、右側の欄に「0.343」、「0.439」と入力します。
- 3. Setをクリックします。



- 1. 力場を割り当てウィンドウに戻ったらOKをクリックします。
- 2. 「**正常に力場が設定されました**」と表示されたら**OK**をクリックします。
- 3. Presetを「Fluid/Amorphous/Crystal NVT Equilibration」に変更します。
- 4. 2nd jobのTemperatureを「1000」に変更します。
- 5. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は2nd jobのPrecisionを「Low」に変更し ます。

| LAMMPS Workflow Setup | | | | _ | |
|--------------------------------------|------------------------------------|---------------|---------------------|------------|--------|
| Preset Fluid/Amorphous/Crystal NVT E | quilibration 🗸 (mo | dified) | # of Jo | bs: + | 2 - |
| | | Enal | ble parameter/struc | cture scan | Config |
| 1st job | | | | - | • |
| Ensemble Minimize ~ | Temperature [K] | 300. | Pressure [atm] | 1. | |
| Simulation time [ps] 10. | # of snapshots (Every 0, 20 ps) | 50 | Initial velocity | From pare | nt 🗸 |
| Free boudnary condition | Precision | Medium \sim | Det | tails | |
| 2nd job | | 1 | | 4 | |
| Ensemble NVT V | Temperature [K] | 1000 | e (atm) | 1. | |
| Simulation time [ps] 50 | # of snapshots (Every 1.00 ps) | 50 | Initial velocity | Random | ~ |
| Free boudnary condition | Precision | Medium \sim | Det | tails | |
| Reset Import 🔽 | Export | | O | к | Cancel |

- **1. 1st job**のDetailsをクリックし、RestraintタブのEnable position restraintにチェックを 入れ、Restrained atomsのSelect Groupボタンをクリックします。
- 2. 登録グループに「graphene」を選択しOKをクリックします。
- **3. LAMMPS Keyword Setup**ウィンドウで**OK**をクリックします。
- 4. 2nd jobのDetailsもクリックし、1~3と同様に設定します。

| | | IAMMPS Keyword Setup | - 🗆 × |
|---|--|---|--|
| IAMMPS Workflow Setup Preset Fluid/Amorphous/Crystal NVT Equilibration (modified) | × | Preset | n Non-equilibrium (1) Non-equilibrium (2) |
| 1st job Ensemble Minimize Temperature [K] 300. Simulation time [ps] 10. # of snapshots (Every 0.20 ps) 50 Free boudnary condition Precision Medium ✓ | Pressure [atm] 1. Initial velocity From parent Details | Distance Restraint Distance Restraint Enable distance restr Restrained atoms I, 1 Bond length [A] 0 | Position Restraint Penable position restraint Restrained atoms 1 2 3 V V V V V V V V V |
| 2nd job Ensemble NVT Temperature [K] 1000 Simulation time [ps] 50 # of snapshots (Every 1.00 ps) 50 Free boudnary condition Precision Medium ✓ | Pressure [atm] 1. | Initial strength 0.0 Final strength 0.0 [kcal/mol/A^2] | Use spring potential Spring constant [kcal/mol/A^2] CReset positions of restrained atoms after run |
| Reset Import Export | OK Cancel | Reset Import Export | OK Cancel 🕅 Run |

- 1. LAMMPS Workflow SetupウィンドウでOKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜 設定した後実行をクリックします。
- 2. work2_LMP_NVTの作業フォルダの状態がENDに変化したら、「work2_LMP_NVT」をクリックし、アクションで M Energy plotをクリックします。
- 3. 水分子の温度の確認として、**Energy Terms**の**c_TempFree**にチェックを入れ**Draw**をクリックすると、拘束されていない水分子についての温度をグラフ化します。

| Energy Plot (gwg.wmp)data#work2_LMP_NV1#Imp.log) | - L X |
|--|-----------------------------------|
| LAMMPS Energies | Uncheck All Uncheck All on Launch |
| 1450.0 1400.0 1350.0 1300.0 1250.0 1200.0 1000.0 900.0 0.0 10000.0 1000.0 1 | Energy Terms |
| Show Setting Options V | Draw Close |

III.計算の実行(本計算)

- 1. メインウィンドウに戻り M (ワークフロー設定) をクリックします。
- 2. 「継続ジョブを実行しますか?…」と表示されたらはいをクリックします。
- 3. work2_LMP_NVTを選択しOKをクリックします。

| × | プロジェクト | | |
|----|------------------------------|---------|---|
| 作 | 業フォルダ (gwg) | Options | • |
| | 名前 | 状態 | |
| | work1_LMP_MIN | END | |
| C | 🕨 🕨 🖉 🖌 🖌 🖉 | END | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| | | | |
| < | | | > |
| | | | |
| 77 | リジョン (work2_LMP_NVT) | | |
| Ē | Coordinate (Initial) | | ^ |
| e | Coordinate (Final) | | |
| | | | |
| | - (T | | |
| | og (Extracted) | | |
| F | Animation | | |
| ~ | Energy plot | | |
| | Radial Distribution Function | n | |

III.計算の実行(本計算)

- 1. Presetを「Fluid/Amorphous/Crystal NVT Production」に変更します。
- **2.** Detailsをクリックし、RestraintタブのEnable position restraintにチェックを入れ、 Restrained atomsのSelect Groupボタンをクリックします。
- 3. 登録グループに「graphene」を選択しOKをクリックします。
- **4. LAMMPS Keyword Setup**ウィンドウで**OK**をクリックします。
- 5. ジョブの設定ウィンドウで実行をクリックします © LAMMPS Keyword Setup

| LAMMPS Workflow Setup | Basic Advanced Output Interaction Non-equilibrium (1) Non-equilibrium (2) Restraint Automatic Additional Commands Manual entry Options Distance Restraint Position Restraint |
|--|--|
| ontinue from work2_LMP_NVT Enable parameter/structure scan Config | Restrained atoms Select Marke Ins Restrained atoms Select Group |
| st job + - nsemble NVT ✓ Temperature [K] 300. Pressure [atm] 1. imulation time [ps] 50 # of snapshots (Every 0.20 ps) Free boudnary condition Precision Medium ✓ Details Reset Import ▼ Export OK Cancel | Initial strength 0.0 Use spring potential Final strength 0.0 Spring constant [kcal/mol/A^2] .00 Reset positions of restrained atoms after run |
| vinnostar Convright 2008-2024 V-Ability Co. 1td | Reset Import Export |

III.計算の実行(本計算)

- 1. work3_LMP_NVTの作業フォルダの状態がENDまたはEND(-)に変化したら、 「work3_LMP_NVT」をクリックし、アクションで日Animationをクリックします。
- 2. 🔞 (X軸方向から表示)と 🛐 (ウィンドウに合わせる)をクリックします。
- 3. アニメーション操作エリアの ▶ (Play/Pause)をクリックし分子の動く様子を観察します。



IV.結果解析

- **1. 作業フォルダ**の「work3_LMP_NVT」をクリックし、**アクション**で**Density Profile**をクリックします。
- **2. Groupで「3: MOL02_H20**」と「**5: graphene**」にチェックが入った状態にし**Draw**をクリックします。
- 3. グラフ下部のShow Settingをクリックし、Y AxisのAutoscaleのチェックを外し、Maxを 「500」に変更すると水の密度分布を確認できます。(定常状態ではないことに注意)





• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>の受講をご検討ください。(詳細はP.2)
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まずよくある質問を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の 再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上