

 winmostar チュートリアル

LAMMPS

電解液系

V10.2.0

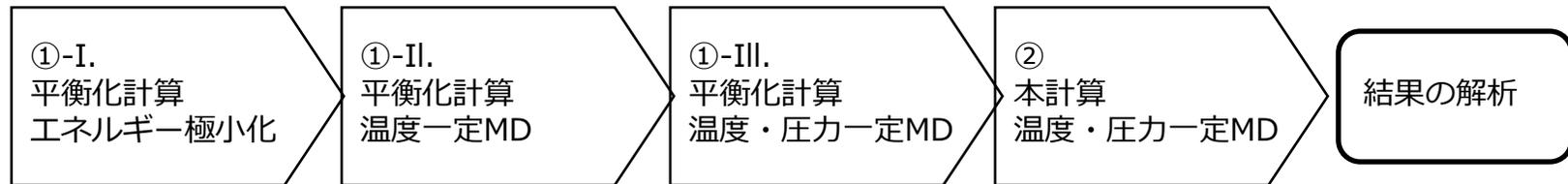
2020年10月1日 株式会社クロスアビリティ

本書について

- 本書はWinmostar V10の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V10をお使いになる方は[ビギナーズガイド](#)を参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)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。
 - [Winmostar基礎講習会](#)：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[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。
- 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。

概要

- リチウムイオンの電解液として使われる、LiBF₄の炭酸プロピレン（PC）溶液のMD計算を実施し、各成分の自己拡散係数を算出します。



注意点：

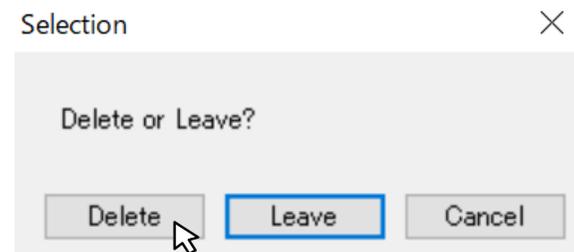
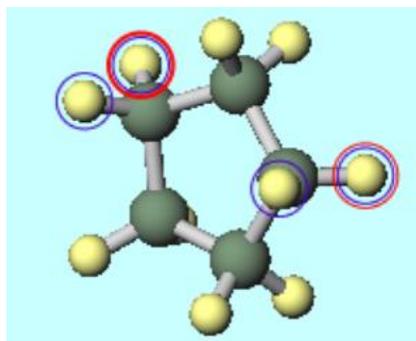
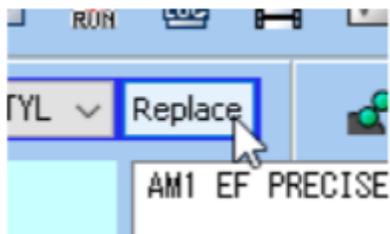
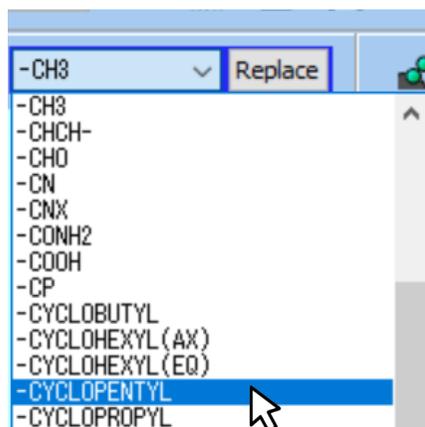
- イオン溶液のMD計算においては、力場・電荷の経験的なチューニングを行わないと実験から得られたイオン伝導度を再現しない場合があります。
- 本チュートリアルでは、実施時間を短縮するため平衡化計算のステップ数を短めに設定しています。
- 同様の理由で計算精度は落とし、ソルバ間で完全に計算条件を一致させることは難しいため、他のソルバで計算した結果と異なることがあります。
- 分子の種類、初期密度に応じて平衡化に必要なステップ数は変化します。
- 平衡化計算、本計算のステップ数が大きいほど、再現性が良く、信頼性の高い結果を取得することができます。
- 相互作用計算方法や力場の種類も、計算結果に大きく影響します。

動作環境設定

- 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[推奨バージョン](#)以外のLAMMPSを利用したい方は、別途[Windows版LAMMPSのインストールと環境設定](#)が必要です。

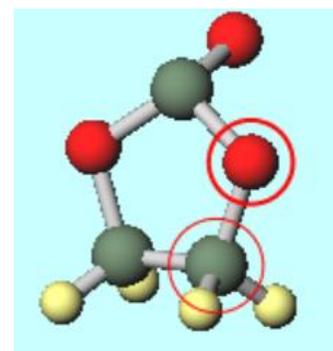
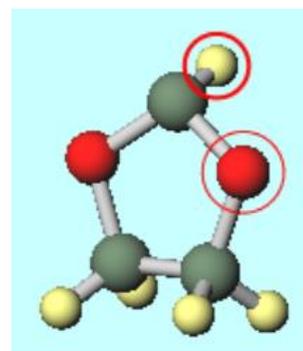
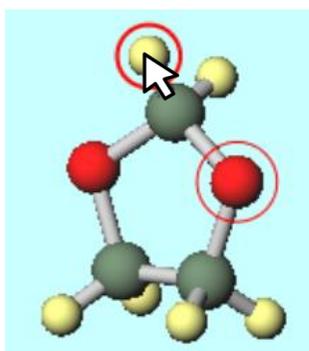
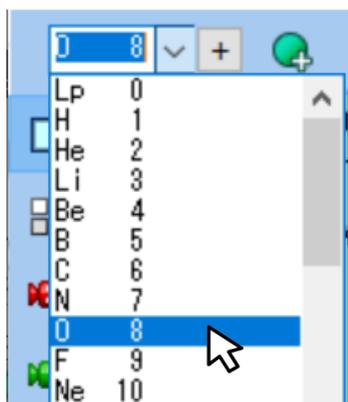
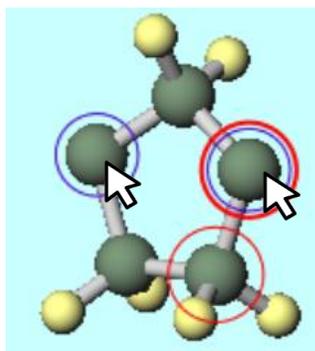
I -1. 溶媒分子 Propylene Carbonate (PC)の作成

1. フラグメントを選択メニューから-CYCLOPENTYLを選択する。
2. Replaceボタンをクリックする。
3. Ctrlキーを押しながらH原子を4つクリックし、下図のように青丸で選択された状態で、原子を削除ボタン  をクリックする。
4. Deleteをクリックする。



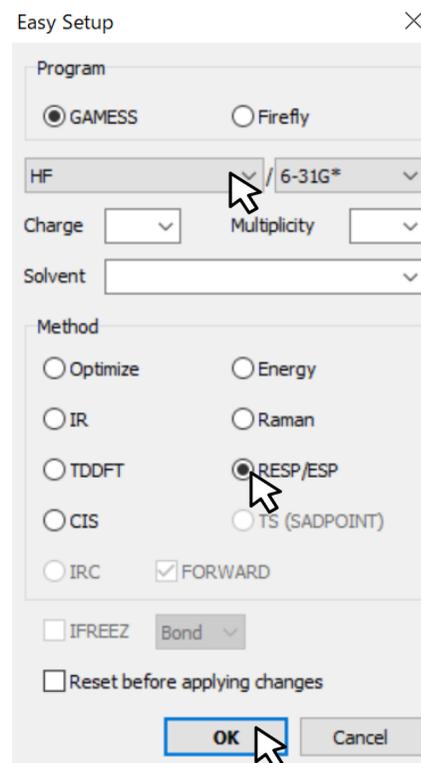
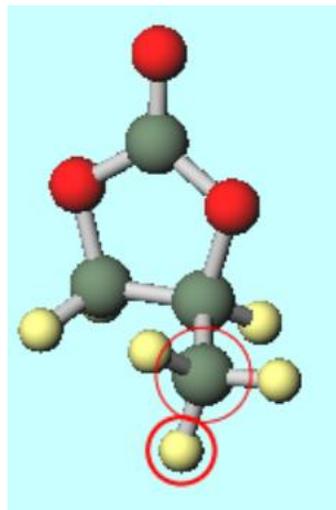
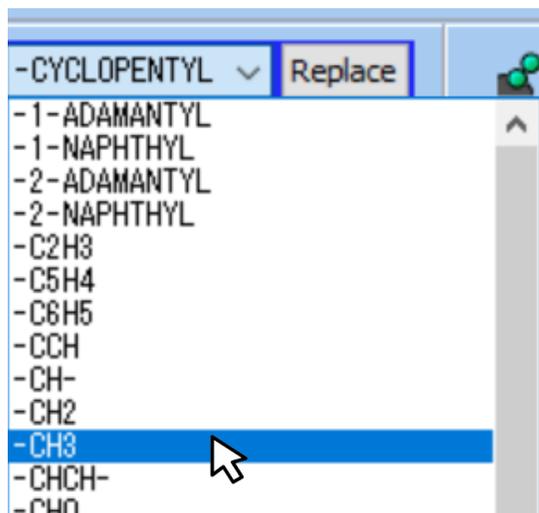
I-1. 溶媒分子 Propylene Carbonate (PC)の作成

1. **Ctrl**キーを押しながら**H原子を削除したC原子2つ**をクリックし、青丸で選択された状態で、メインウィンドウ上部の**編集操作で適用される元素を選択**メニューから**O 8**を選択する。
2. **元素を変更**ボタンをクリックする。
3. O原子に挟まれたC原子上のH原子をクリックし、赤色の太丸で選択された状態で、**原子を削除**ボタンをクリックする。
4. もう一方の水素原子をクリックし選択した後に、**編集操作で適用される元素を選択**メニューから**O 8**を選択する。
5. **元素を変更**ボタンをクリックする。



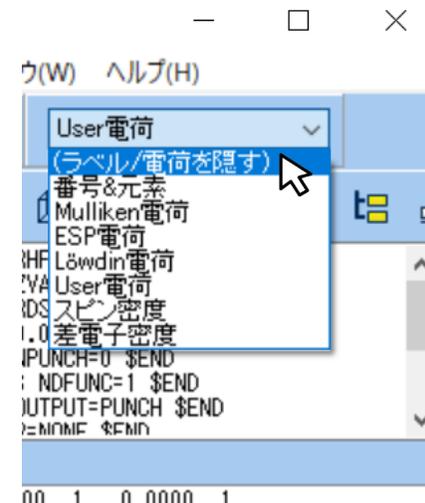
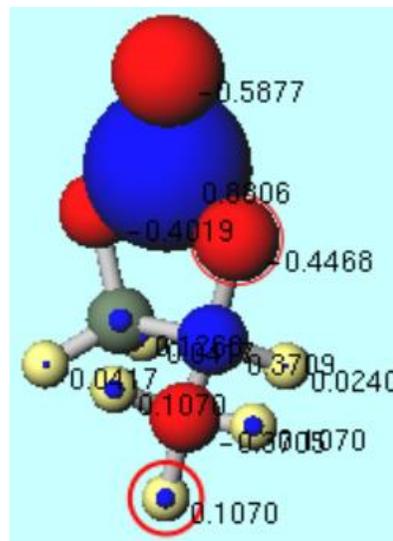
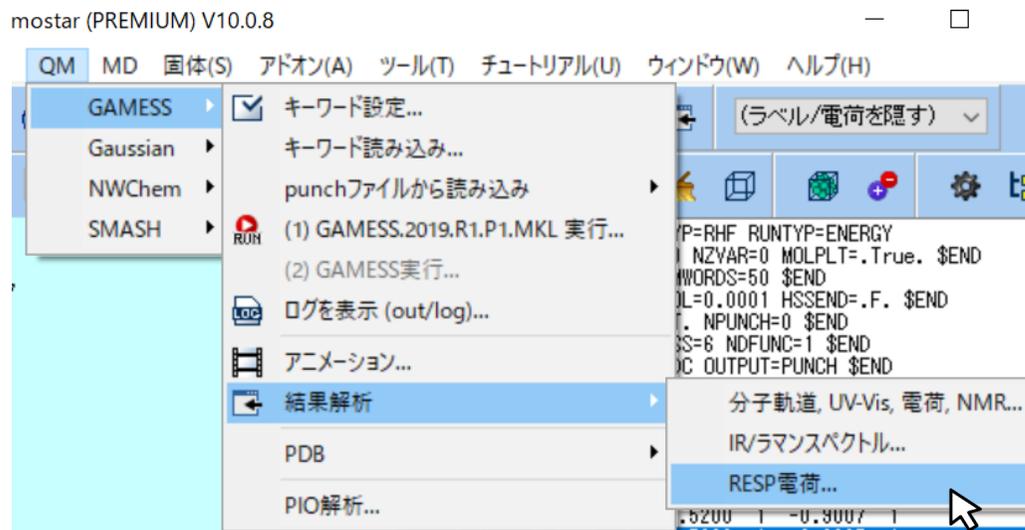
I-2. 溶媒分子PCの電荷計算

1. H原子をどれか一つクリックし、赤色の太丸で選択された状態にする。
2. フラグメントを選択メニューから-CH₃を選択し、**Replace**ボタンをクリックする。
3. 簡易構造最適化ボタン  をクリックする。
4. **QM | GAMESS | キーワード設定**メニューをクリックする。開いた**GAMESS Setup**ウィンドウで、**Easy Setup**ボタンをクリックする。
5. **Easy Setup**ウィンドウで**HF/6-31G***、**Method: RESP**と設定し**OK**をクリックする。
6. **GAMESS Setup**ウィンドウで**Run**をクリックする。
7. 「PC_resp.inp」として保存する。



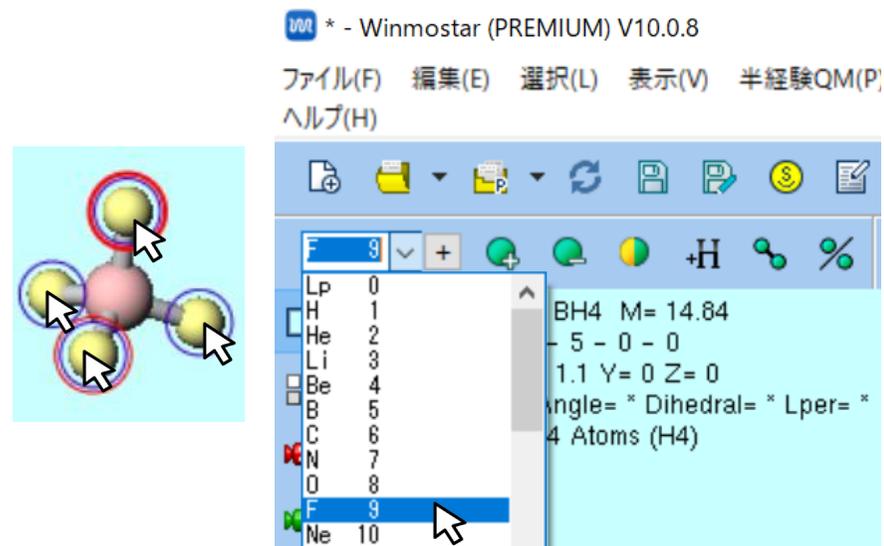
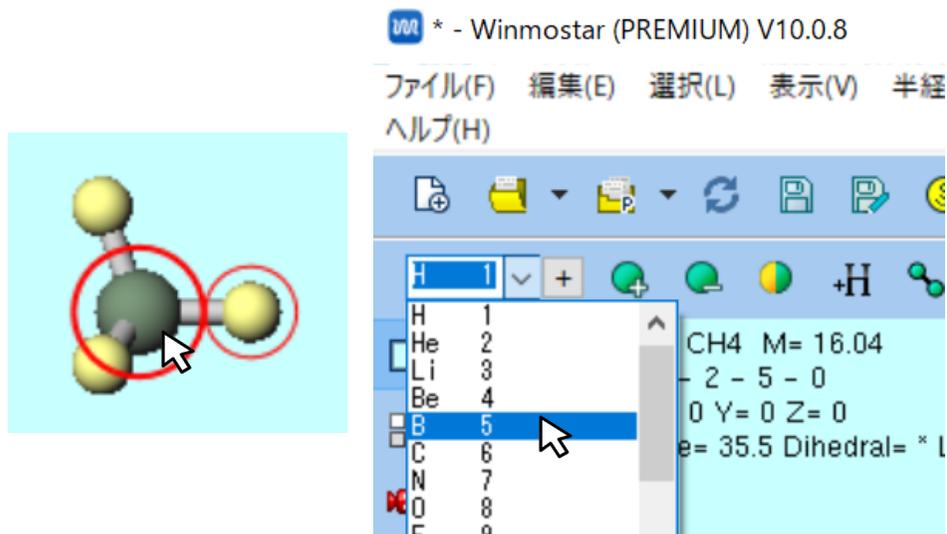
I-2. 溶媒分子PCの電荷計算

1. 計算終了後、**QM | 結果解析 | RESP電荷**を選択し、デフォルトで選ばれるpunchファイルを選択する。
2. 情報ダイアログが2回出現し、いずれも**はい**ボタンを押す。メイン画面上にRESP電荷が表示される。
3. **ラベル/電荷プルダウンメニューで(ラベル/電荷を隠す)**を選択し、電荷を非表示にする。
4. **ファイル | 名前を付けて保存**をクリックし、「PC_resp.mol2」として保存する。



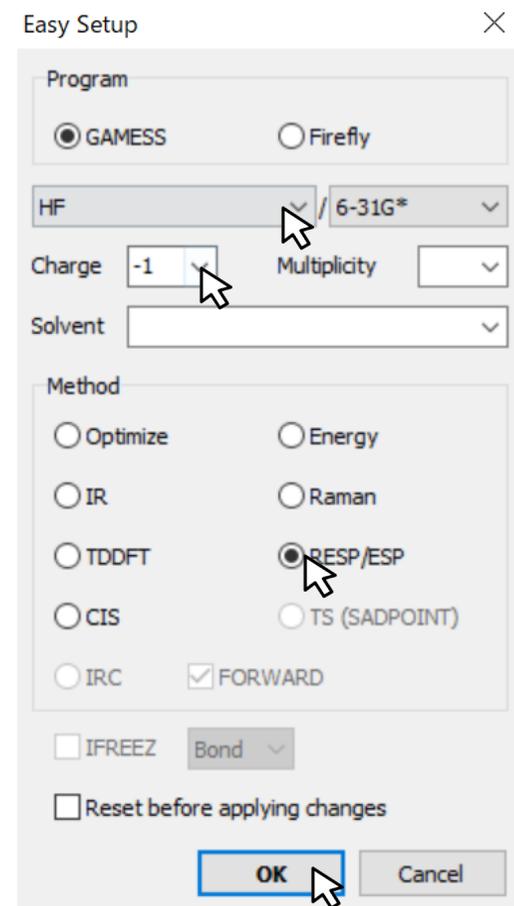
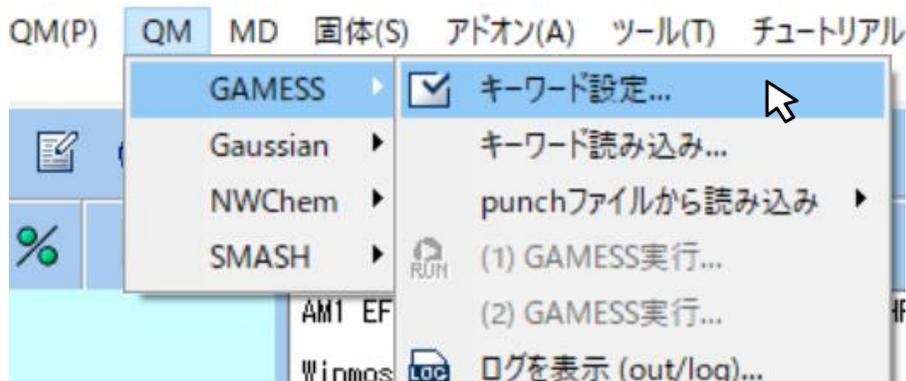
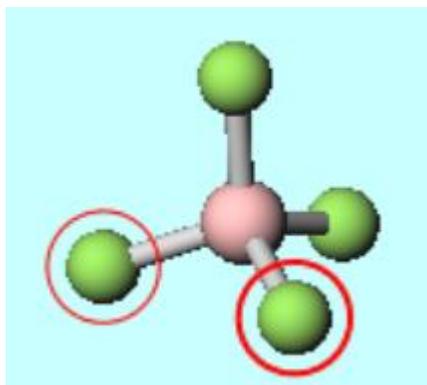
II-1. BF₄⁻アニオンの作成

1. **ファイル | 新規**をクリックする。
2. メタン (CH₄) をメイン画面上で作成する。
3. **C原子**が赤丸で選択された状態で、**編集操作で適用される元素を選択**メニューから**B 5**を選択する。
4. **元素を変更ボタン**  をクリックする。
5. **Ctrlキー**を押しながら**H原子を4つ**クリックし青丸で選択された状態で、**編集操作で適用される元素を選択**メニューから**F 9**を選択する。
6. **元素を変更ボタン**  をクリックする。



II-2. BF_4^- アニオンの電荷計算

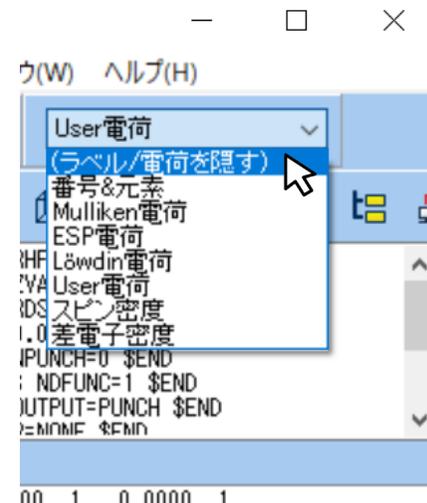
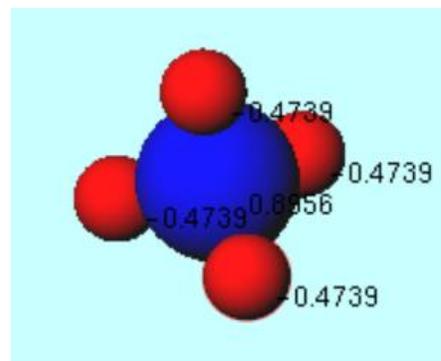
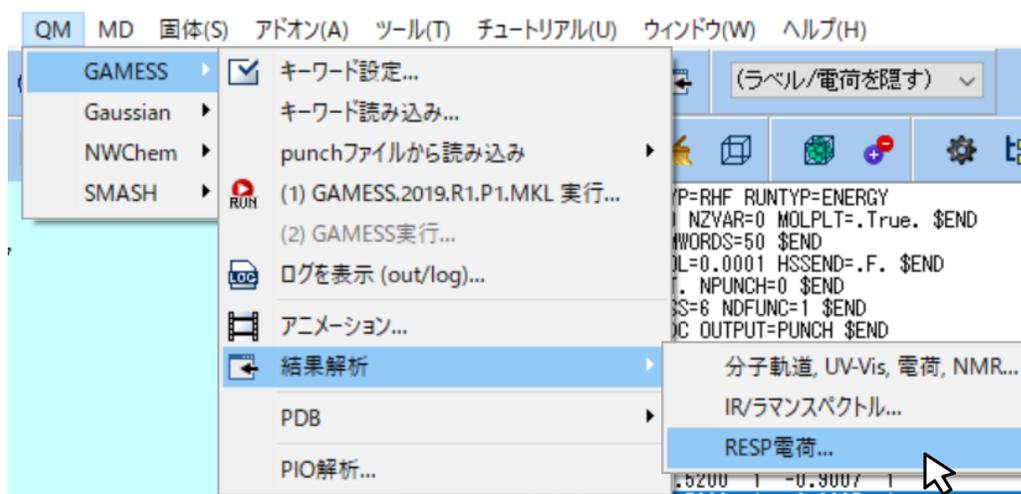
1. 簡易構造最適化ボタン  をクリックする。
2. QM | GAMESS | キーワード設定メニューをクリックする。開いたGAMESS Setupウィンドウで、Easy Setupボタンをクリックする。
3. Easy SetupウィンドウでHF/6-31G*、Charge: -1、Method: RESPと設定しOKをクリックする。
4. GAMESS SetupウィンドウでRunをクリックする。
5. 「BF4_resp.inp」として保存する。



II-2. BF₄⁻アニオンの電荷計算

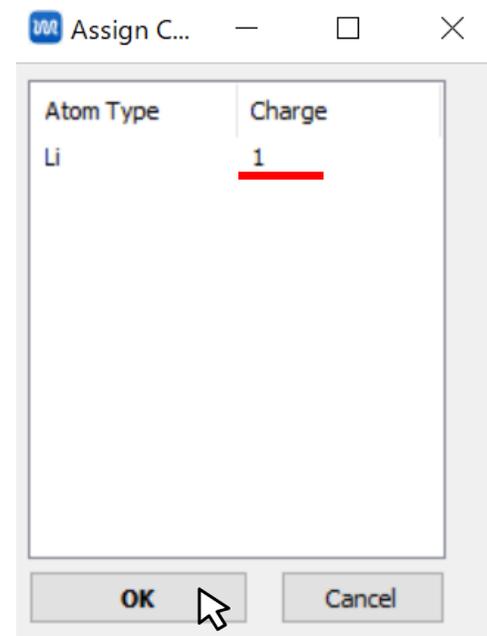
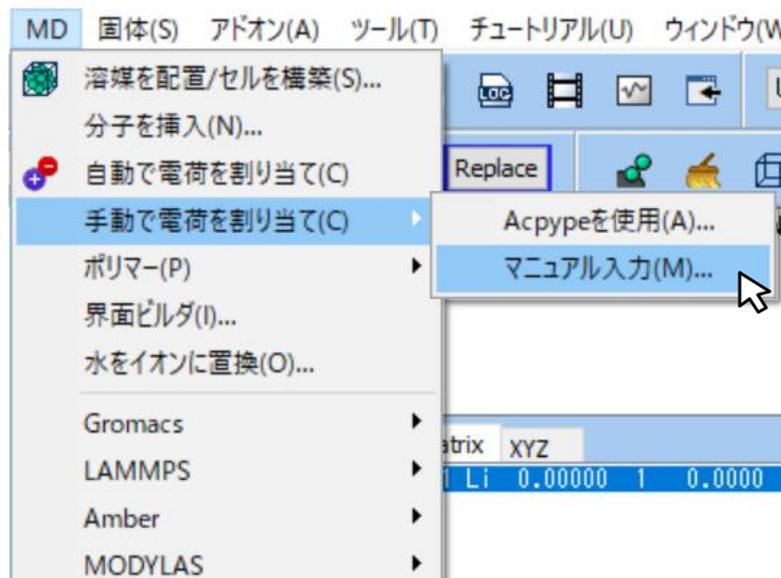
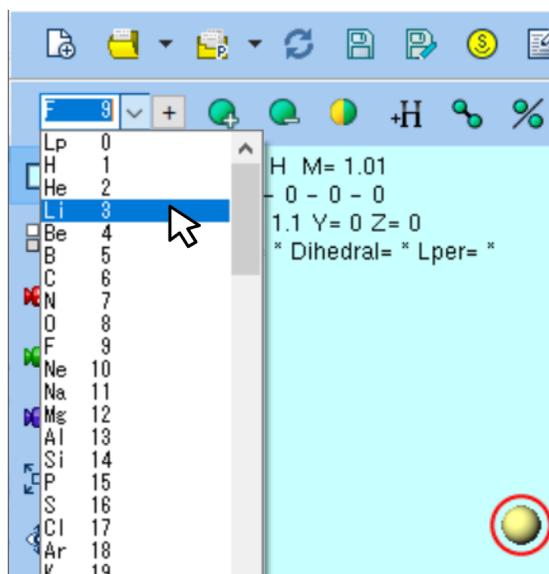
1. 計算終了後、**QM | 結果解析 | RESP電荷**を選択し、デフォルトで選ばれるpunchファイルを選択する。
2. 情報ダイアログが2回出現し、いずれも**はい**ボタンを押す。メイン画面上にRESP電荷が表示される。
3. **ラベル/電荷プルダウンメニューで(ラベル/電荷を隠す)**を選択し、電荷を非表示にする。
4. **ファイル | 名前を付けて保存**をクリックし、「BF4_resp.mol2」として保存する。

mostar (PREMIUM) V10.0.8



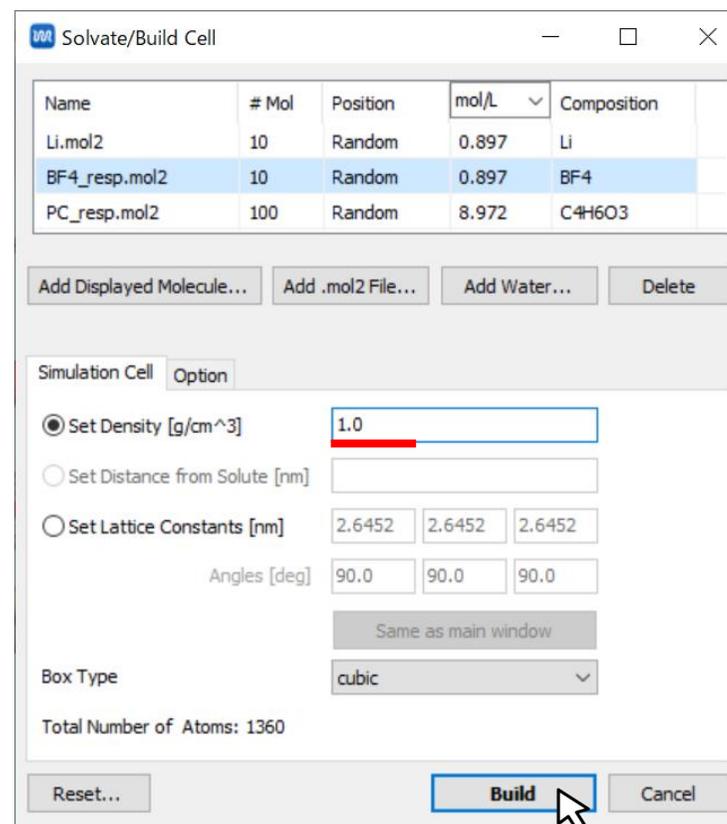
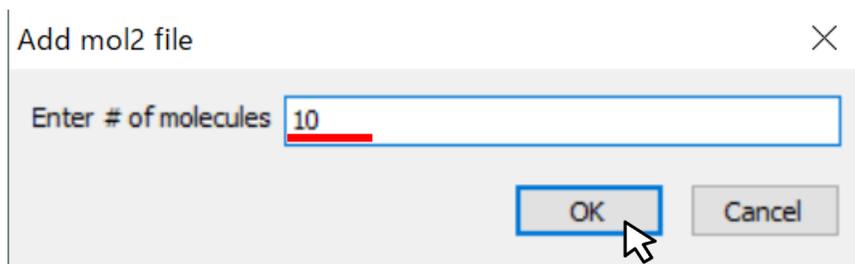
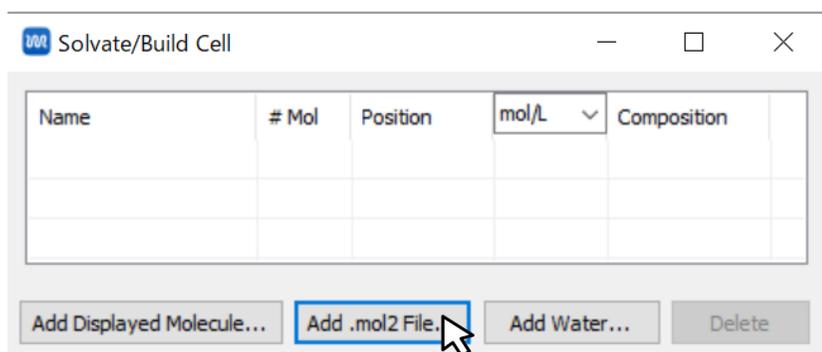
Ⅲ-1. Li⁺カチオンの電荷割り当て

1. **ファイル | 新規**をクリックする。
2. **原子を削除ボタン**  をクリックする。警告が出るが**はい**をクリックする。
3. メインウィンドウ上部の**編集操作で適用される元素**を選択メニューから**Li 3**を選択する。
4. **元素を変更ボタン**  をクリックする。
5. **MD | 手動で電荷を割り当て | マニュアル入力**をクリックする。表示されたウィンドウのLiの**Charge**を**1**にして**OK**をクリックする。
6. **ファイル | 名前を付けて保存**をクリックし、「**Li.mol2**」として保存する。



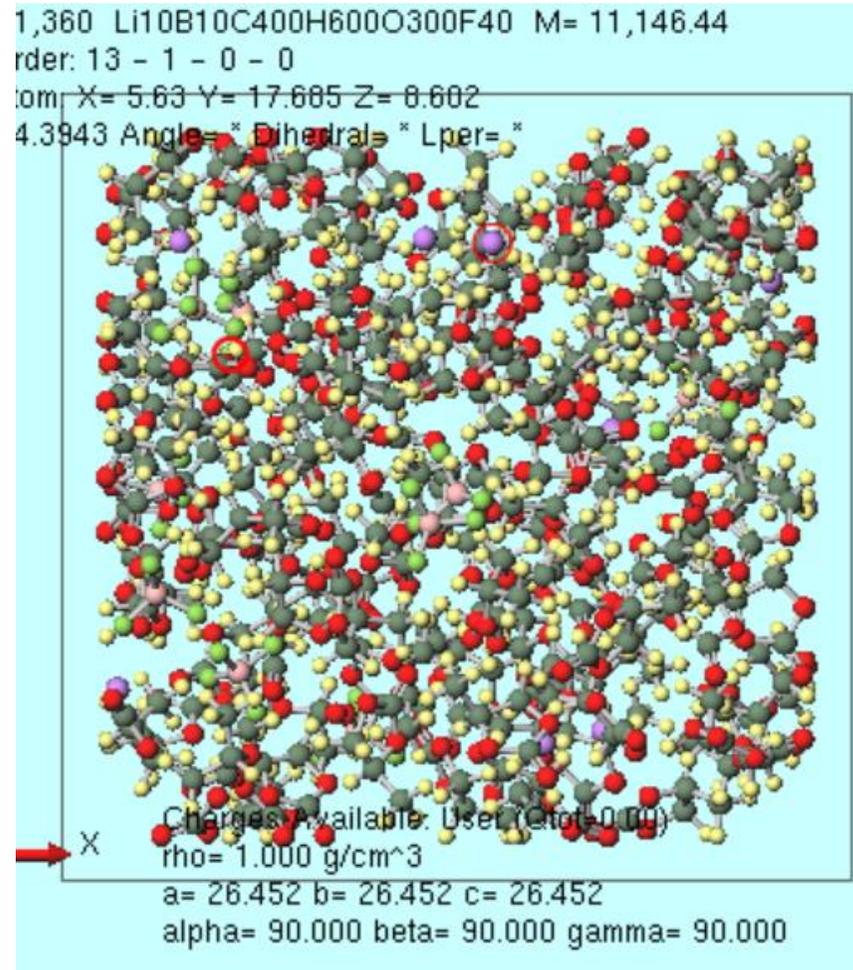
IV. 電解液の作成

1. 溶媒を配置/セルを構築ボタン  をクリックする。
2. **Add .mol2 Molecule** ボタンをクリックし、**Li.mol2** を選択し、**Enter # of molecules** に **10** と入力し **OK** をクリックする。
3. 同様に、**BF4_resp.mol2** を **10** 分子、**PC_resp.mol2** を **100** 分子追加する。
4. **Density** を **1.0 g/cm³** として、**Build** をクリックする。



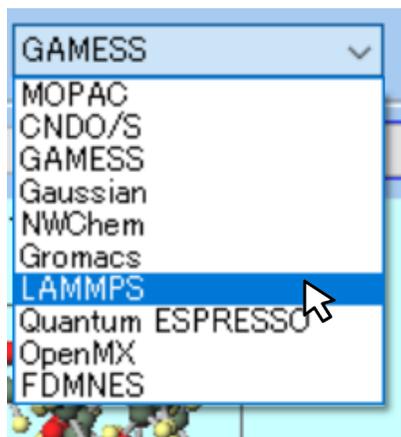
IV. 電解液の作成

1. 下図のような系が作成される。



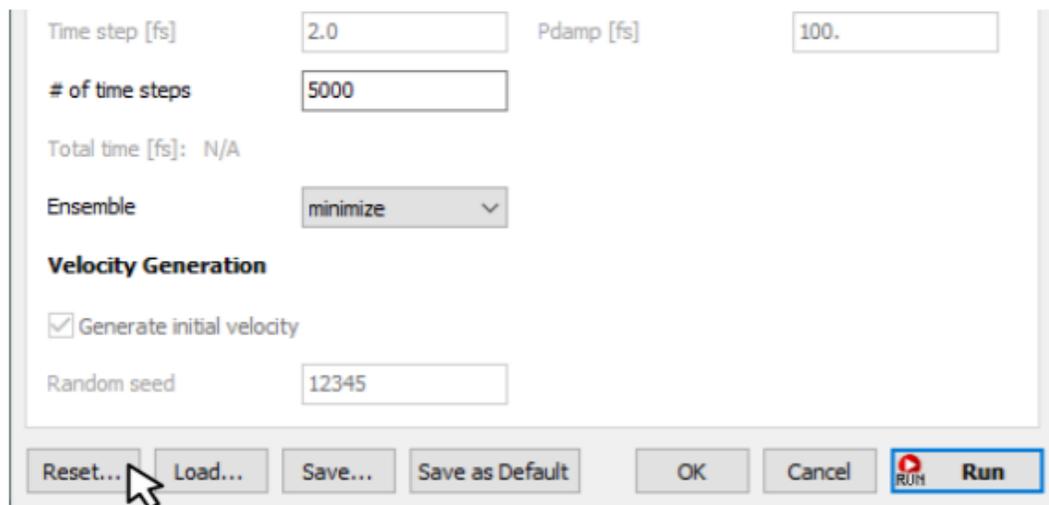
V. 電解液のMD計算（エネルギー極小化）

1. ソルバー一覧で**LAMMPS**を選択し、 (**キーワード設定**) をクリックする。
2. 力場を割り当てウィンドウが開いたら、**Dreiding**を選択し、右下の**OK**ボタンを押す。黒いターミナルウィンドウが数秒間出現し、処理に成功すると「**正常に力場が設定されました**」と表示される。



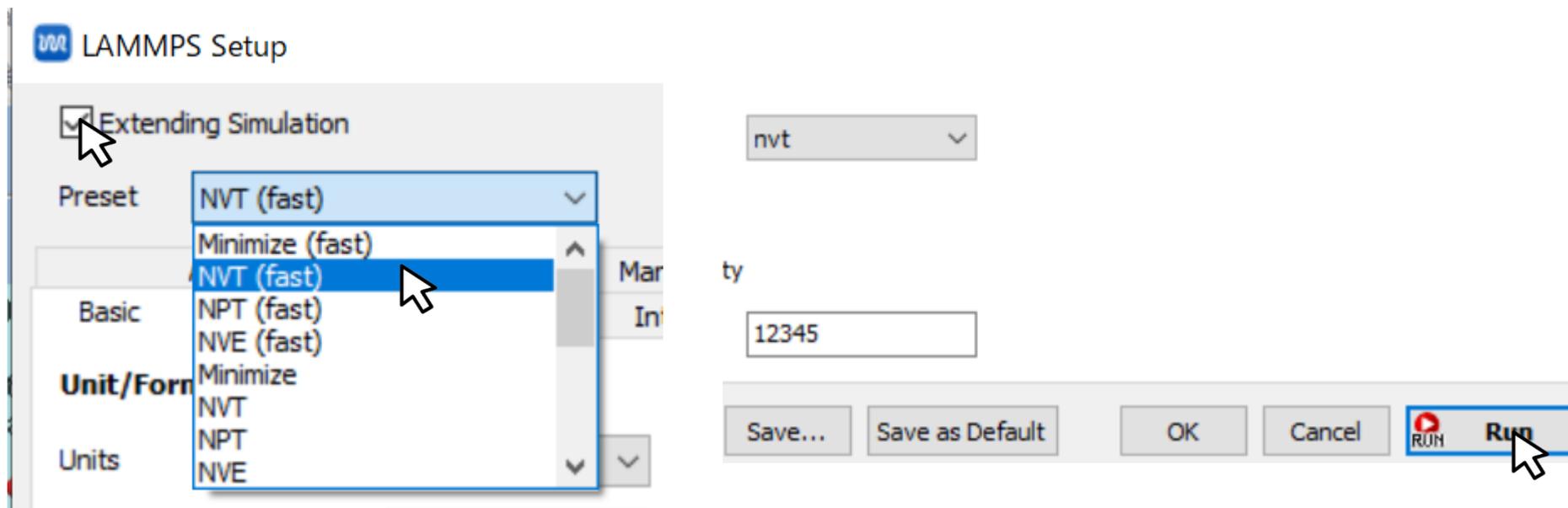
V. 電解液のMD計算（エネルギー極小化）

1. **LAMMPS Setup** ウィンドウ左下の**Reset**ボタンを押し、警告ダイアログでは**はい**ボタンをクリックする。
2. ウィンドウ右下の**Run**ボタンをクリックし、座標ファイル名を「**LiBF4PC**」として保存する。



V. 電解液のMD計算（温度一定）

1. 計算終了後、 (キーワード設定)をクリックする。
2. **Extending Simulation**にチェックを入れ、**Preset**に**NVT (fast)** を指定する。
3. **Run**をクリックする。



V. 電解液のMD計算（温度・圧力一定）

1. 計算終了後、 (キーワード設定)をクリックする。
2. **Preset**に**NPT (fast)** を指定する。
3. **# of time steps**を**25000**に変更し、**Run**をクリックする。

LAMMPS Setup

Extending Simulation MPI processes

Preset: NPT (fast)

Automatic		Manual entry		Options	
Basic	Advanced	Output	Interaction	Non-equilibrium (1)	Restraint
Unit/Format/Potential			Temperature Coupling		
Units	real	Temperature [K]	300.0		
Atom style	full	Tdamp [fs]	100.		
Pair style	lj/cut/coul/long	Pressure Coupling		iso	
Force field/Potential file	Dreiding	Pressure control	iso		
Run Control		Pressure [atm]	1.0 1.0 1.0		
Time step [fs]	2.0	Pdamp [fs]	100.		
# of time steps	25000				
Total time [fs]: 50,000					

V. 電解液のMD計算（本計算）

1. 計算終了後、 (キーワード設定)をクリックする。
2. # of time stepsを500000に変更し、Runをクリックする。

Run Control

Time step [fs]

2.0

of time steps

500000

Total time [fs]: 1,000,000

Ensemble

npt

Velocity Generation

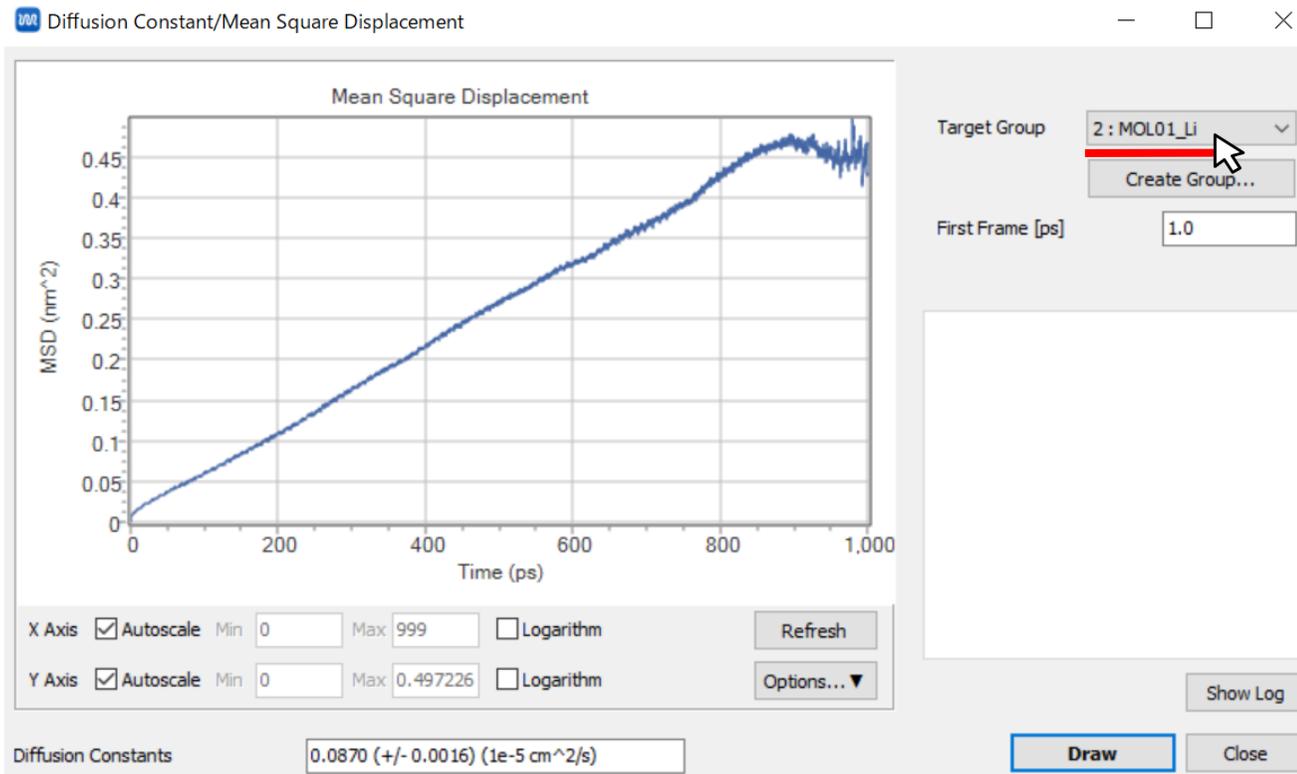
Generate initial velocity

Random seed

12345

V. 電解液のMD計算（本計算）

1. 計算終了後、（結果解析）から自己拡散係数/平均二乗変位を選択し、出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。トラジェクトリファイルと座標ファイルとインデックスファイルそれぞれについてダイアログが開く。
2. **Target Group**から、Li or BF4 or C4H6O3を選択し、**Draw**ボタンをクリックすると平均二乗変位のグラフと自己拡散係数が表示される。



最後に

- 各機能の詳細を調べたい方は[ユーザマニュアル](#)を参照してください。



[ユーザマニュアル](#)



[Winmostar 講習会](#)の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、[Winmostar導入講習会](#)、[Winmostar基礎講習会](#)、または[個別講習会](#)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