winmostar チュートリアル

LAMMPS
非平衡MDによる
複素誘電率/誘電正接計算

V11.17.3

2026年10月30日　株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

本書について

- 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。

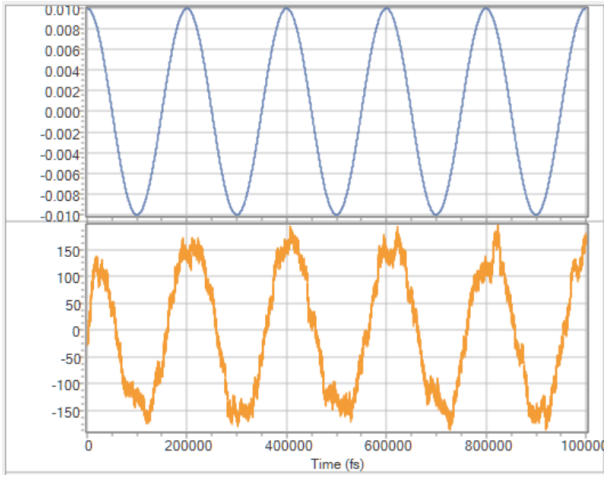
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
  - Winmostar導入講習会：基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
  - Winmostar基礎講習会：理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
  - 個別講習会：ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まずよくある質問を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

- 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。

Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

概要・注意点

- 本チュートリアルの実施にはWinmostar V11プロフェッショナル版エリートが必要です。
- 本チュートリアルでは、特定周波数における複素誘電率および誘電正接を、外部電場を与える非平衡MDから算出します。例としてH_2O液体の系を取り上げます。
  - 参考文献：*J. Chem. Phys.* **158**, 124122 (2023).



注意点：

- ターゲットとなる物質の種類、初期密度に応じて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、外部電場の強さ、シミュレーション時間も結果に影響を与えます。
- チュートリアルという性質上、ここでは物理量の収束に十分なステップ数の計算を実施していません。

Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

動作環境設定

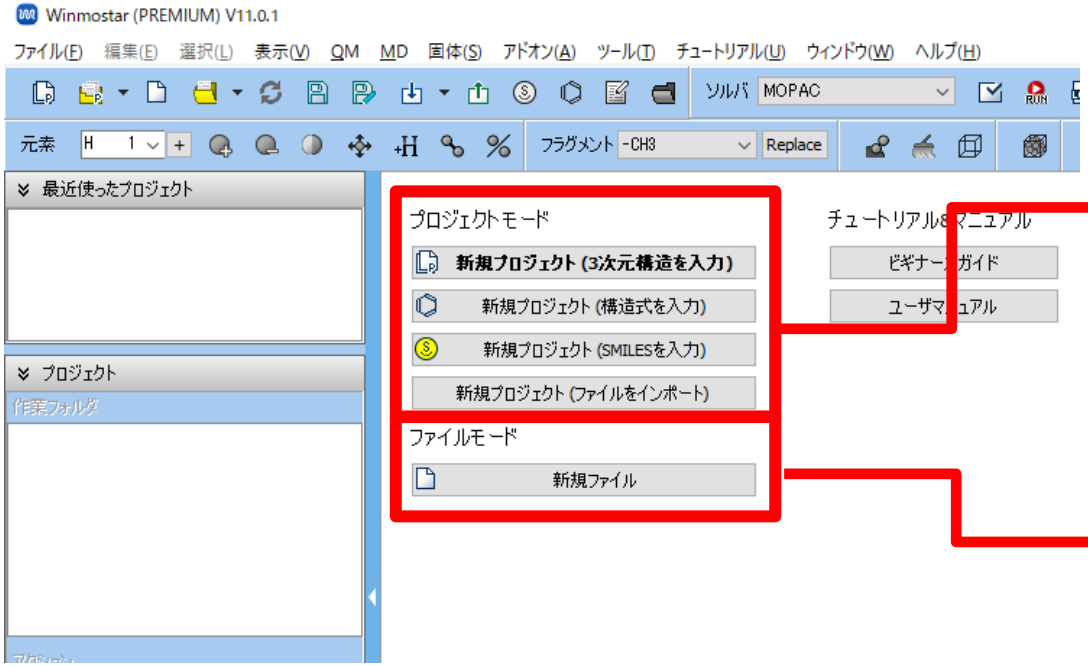
- Winmostar　V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、CygwinWM　2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定してください。
  - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版LAMMPSが同梱されています。

- 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。

Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

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。



プロジェクトモード **V11新機能**
ユーザは個々のファイルを意識することなくジョブを管理できます。
基本的にこのモードを推奨します。

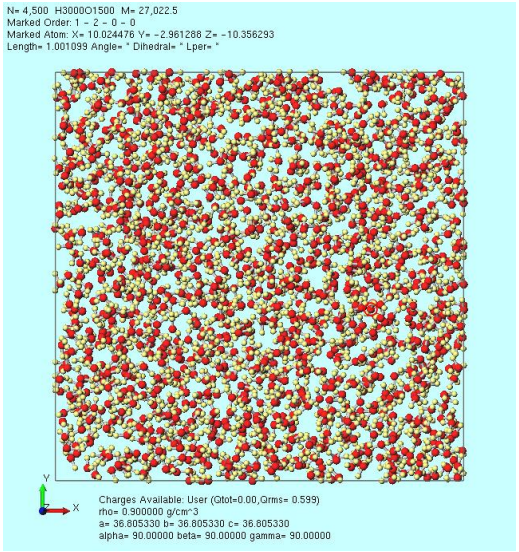
ファイルモード
ユーザは個々のファイルを明示的に作成、管理します。操作方法はV10以前と一緒です。

Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

I.　系のモデリング

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。

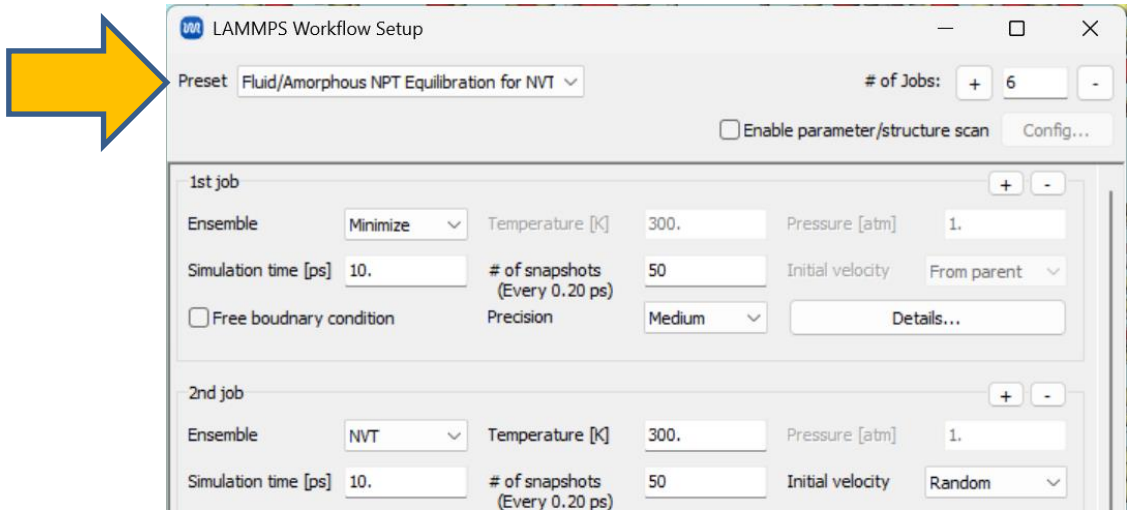
1. **ファイル**｜**新規プロジェクト**をクリックし、**プロジェクト名**に「`water_loss_factor`」と入力して**保存**をクリックします。
2.  **（溶媒を配置/セルを構築）**をクリックします。
3. **Add Water**をクリックし「`1500`」と入力し**OK**をクリックします。
   - 計算精度を落として計算時間を短縮したい場合は「`500`」と入力し**OK**をクリックします。
4. **Simulation Cell**の**Set Density**の右に「`0.9`」と入力し**Build**をクリックします。
5. 「系の作成に成功しました」と表示されたら**OK**をクリックします。



Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

II. 計算の実行（平衡化）

1. **ソルバ**から**LAMMPS**を選択し、(**ワークフロー設定**)を開きます。
2. **OK**をクリックし、「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 NPT Equilibration for NVT」に変更します。
   - 計算精度を落として計算を早く終了したい場合は「Fluid/Amorphous NPT Equilibration」に設定し、すべてのjobの**Precision**を「Low」に変更します。
   - work6_LMP_NVTの平均圧力が設定値から大きくずれる場合は**4th job**の**Simulation time**を長くします。
4. **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。

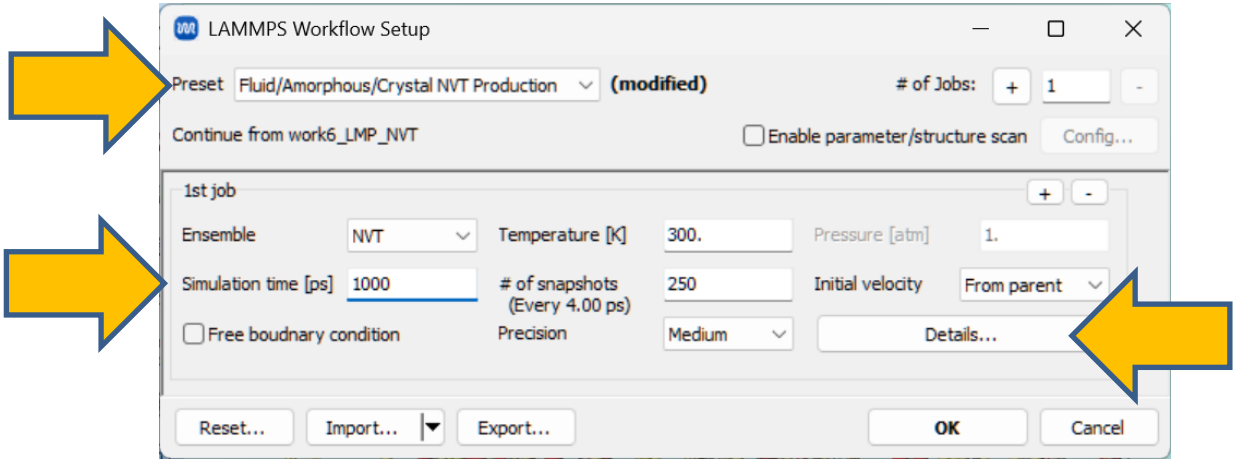


総計算時間：
8並列で0.5時間程度（参考値）

Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

III.計算の実行（本計算）

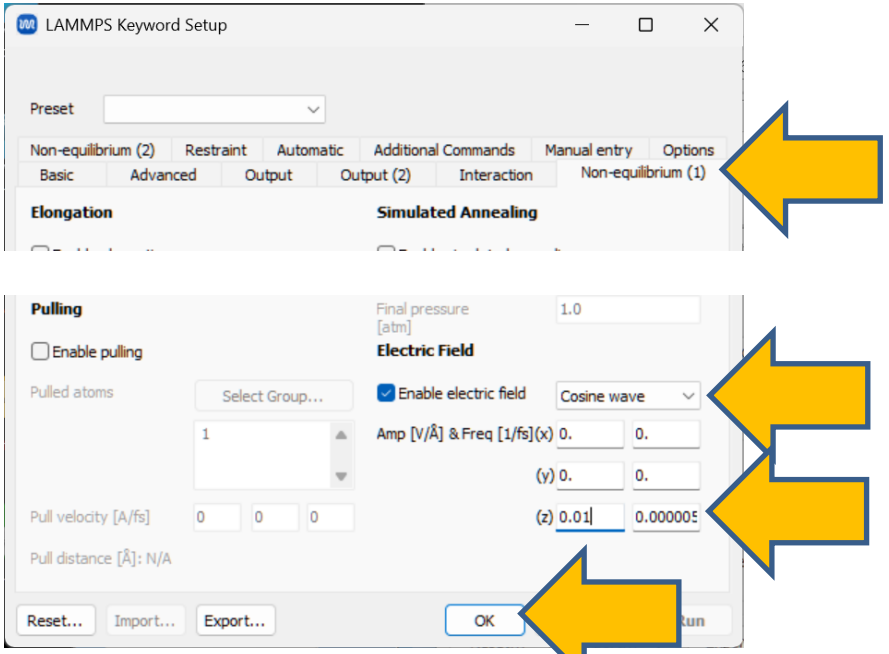
1. すべての作業フォルダの**状態**が**END**または**END(-)**に変化しましたら、再び  （**ワークフロー設定**）をクリックします。
2. 「継続ジョブを実行しますか？…」と表示されたら**はい**をクリックします。
3. 最後の作業フォルダ（work6_LMP_NVT）を選択し**OK**をクリックします。
4. **Preset**を「Fluid/Amorphous/Crystal NVT Production」に変更します。
5. **Simulation time**を「1000」に変更します。
   - 計算精度を落として計算を早く終了したい場合は**Precision**を「Low」、**Simulation time**を「200」に変更します。
6. **Details…**をクリックします。



Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

III.計算の実行（本計算）

7. **Non-equilibrium(1)**タブの**Enable Electric Field**にチェックを入れ、**Cosine wave**を選択します。
8. **Amp [V/Å] & Freq [1/fs]**の**(z)**の右に「`0.01`」「`0.000005`」と入力します。
   - この場合、外部電場の振幅は0.01×10^{10} V/m、周波数は5.0 GHzとなります。
9. **OK**をクリックします。
10. **LAMMPS Workflow Setup**ウィンドウで**OK**をクリックします。
11. **ジョブの設定**ウィンドウで適宜設定を変更し**実行**をクリックします。

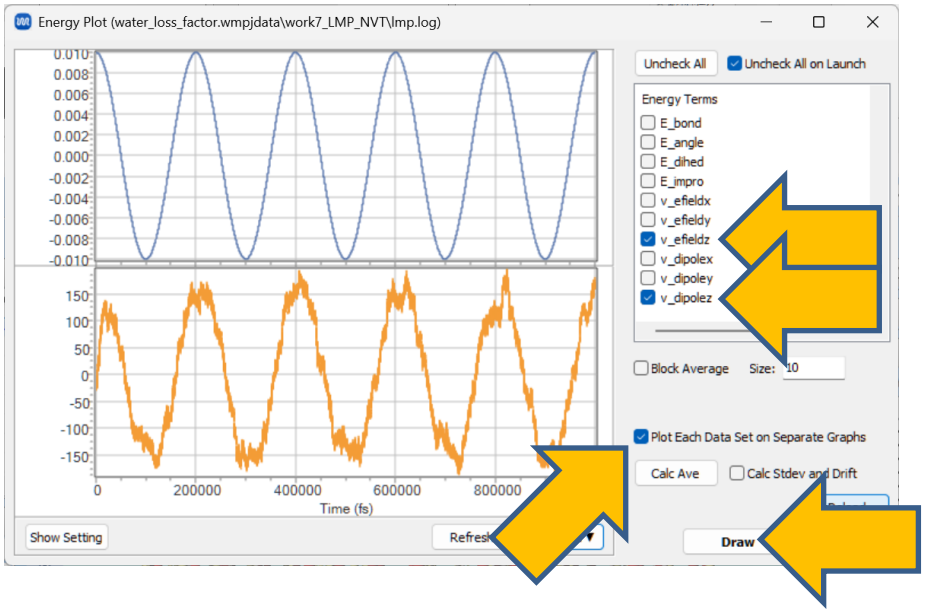


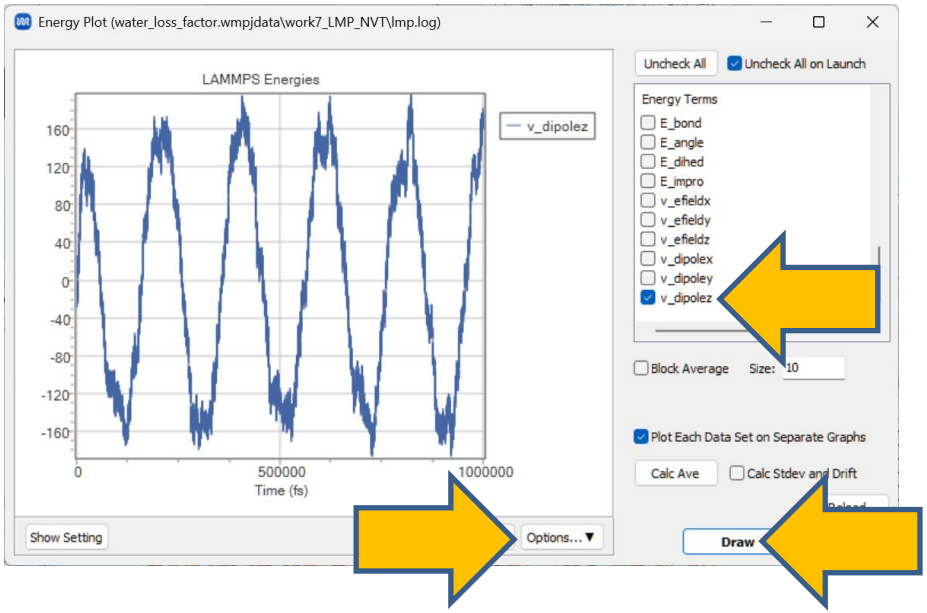
計算時間：
8並列で3時間程度（参考値）

Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

III.結果解析

1. **作業フォルダ**の**状態**が**END**または**END(-)**に変化したことを確認し、**アクション**の**Energy plot**をクリックします。
2. **v_efieldz**（外部電場の大きさ）と**v_dipolez**（系全体の双極子モーメント）にチェックを入れ、**Plot Each Data set on Separate Graphs**にチェックを入れ**Draw**をクリックします。
   - 外部電場と応答の関係を確認します。
3. **v_efieldz**のチェックを外してから**Draw**をクリックし、グラフ右下の**Options | Fit Curve**をクリックします。

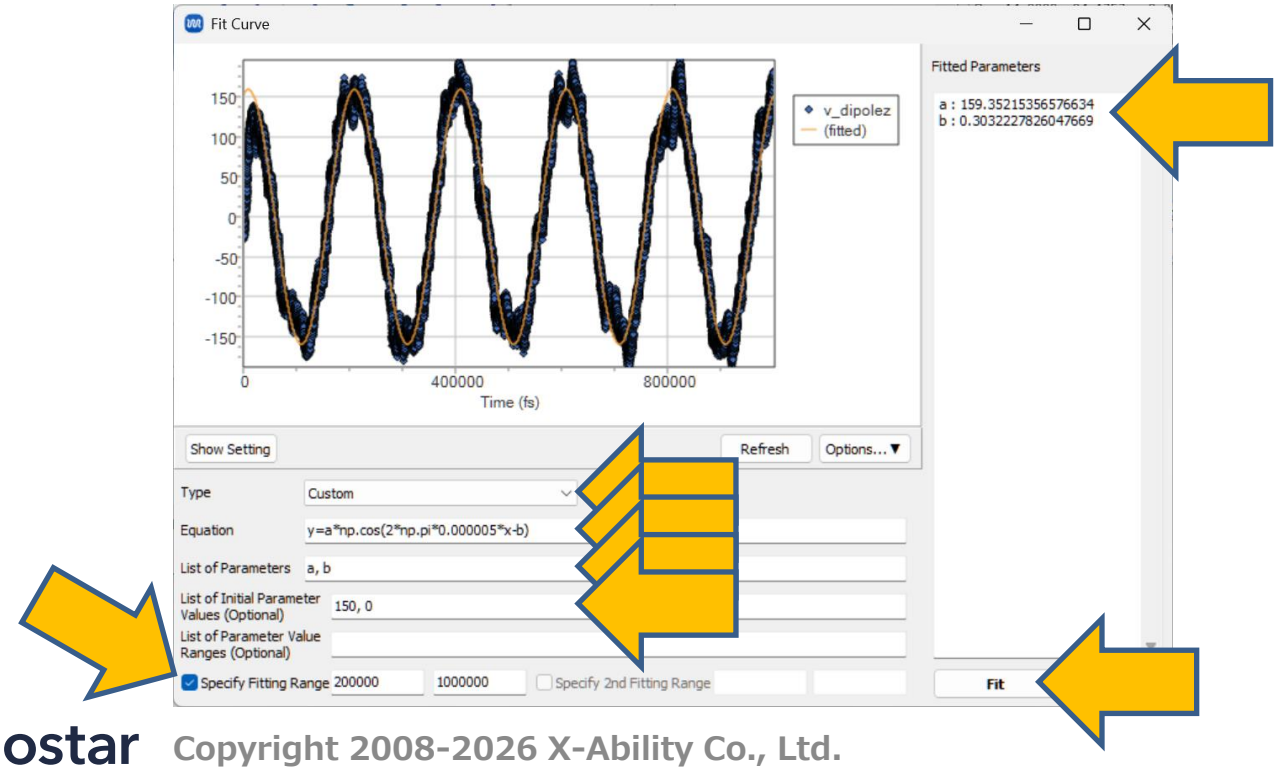




Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

III.結果解析

4. **Type**を「Custom」に変更し、**Equation**に「`y=a*np.cos(2*np.pi*0.000005*x-b)`」（「`0.000005`」の部分はP. 9の8で2番目に入力した値とします）、**List of Parameters**に「`a, b`」、**List of Initial Parameter Values**に「`150, 0`」（「`150`」の部分はデータの最大値付近の適当な値とします）、**Specify Fitting Range**に「`200000, 1000000`」（応答がまだ安定していない0 ps付近のデータを除外します）と入力します。
5. **Fit**をクリックします。**Fitted Parameters**に変数a, bのフィッティングした結果が表示されます。



Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

III.結果解析

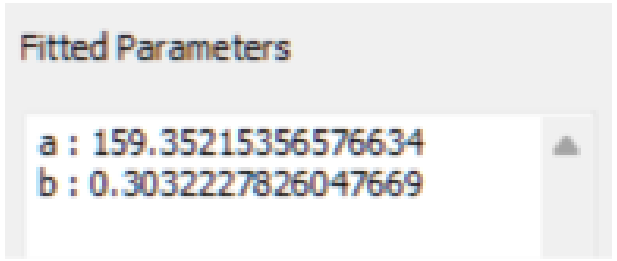
- 複素誘電率と誘電正接は、**Fitted Parameters**のa（系全体の双極子モーメントの振幅，単位は電気素量・Å）、b（損失角）の値を用いて次の通り計算されます。ここでeは電子素量（1.602176634×10^{-19} C）、ε_0は真空誘電率（8.8541878188×10^{-12} F/m）、Vはシミュレーションセルの体積（単位はÅ^3）、E_0は外部電場の振幅（P. 9の8で1番目に入力した値、単位はV/Å）です。

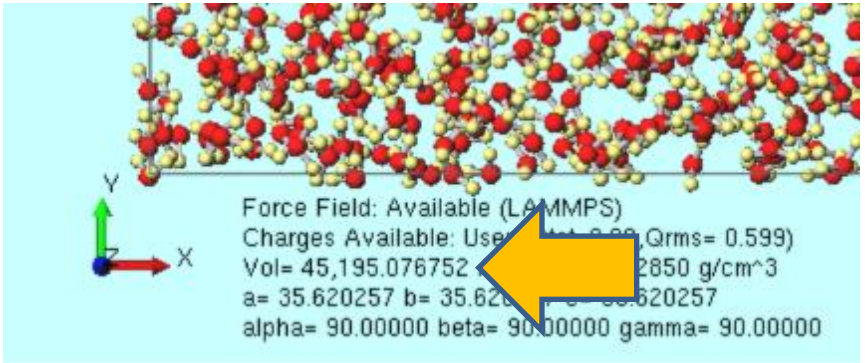
  複素誘電率　（実部）　：$\varepsilon_r = 1 + \dfrac{(a\times10^{-10})e\cos(b)}{(V\times10^{-30})(E_0\times10^{10})\varepsilon_0}$

  （虚部）　：$\varepsilon_i = \varepsilon_r \cdot \tan\delta$

  誘電正接　：$\tan\delta = \tan(b)$

  - シミュレーションセルの体積は、**ツール**｜**環境設定**｜**表示**｜**表示項目**｜**体積**にチェックを入れると分子表示エリアの下部で確認することができます。
  - 本書のケースでは$\varepsilon_r = 61.9, \varepsilon_i = 19.4, \tan\delta = 0.3129$となります。





Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.

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

Copyright 2008-2026 X-Ability Co., Ltd.