

 winmostar チュートリアル

**LAMMPS**

**ガラス転移温度算出  
(ポリマー、冷却計算)**

V11.1.1

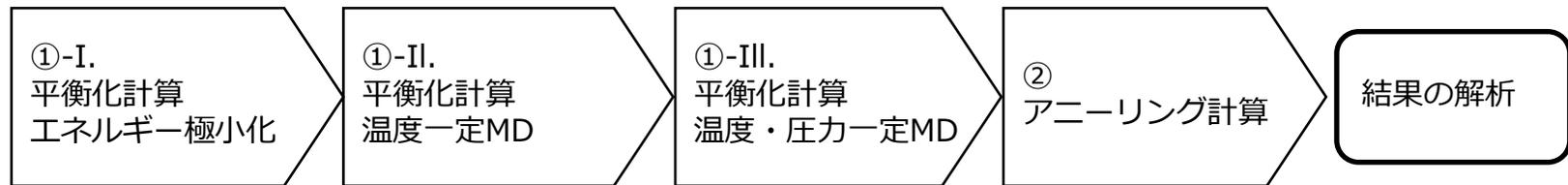
2022年4月28日 株式会社クロスアビリティ

# 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。

# 概要

- ポリプロピレン溶融体の冷却過程からガラス転移温度を算出します。処理のフローを以下に示します。



## 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）、降温（昇温）速度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。

# 動作環境設定

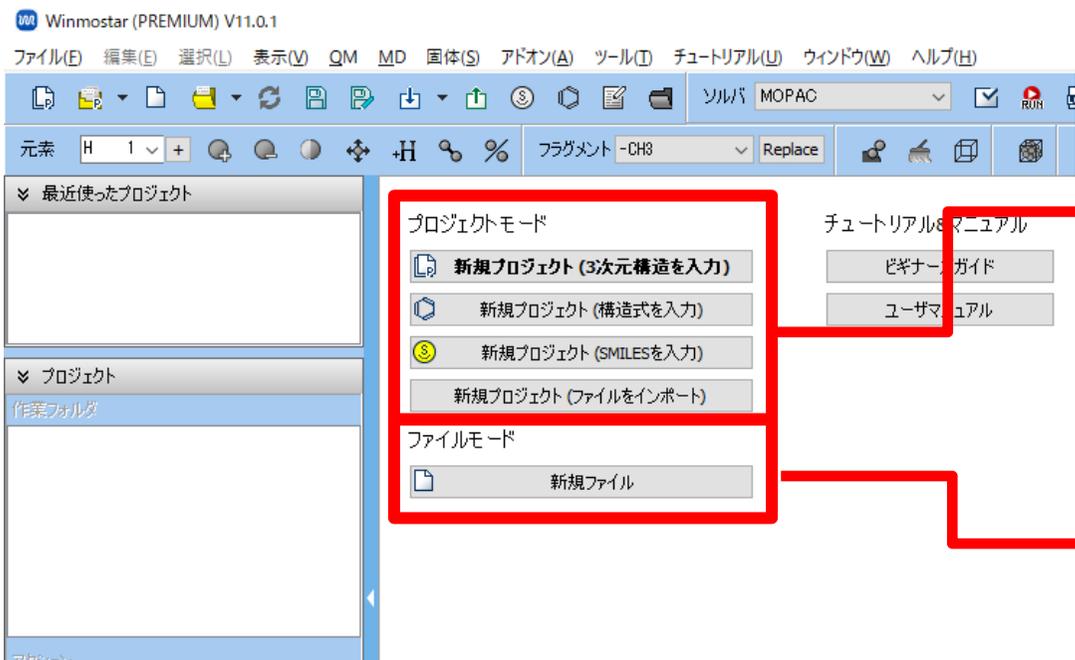
- Winmostar V11.5.0以降を利用しかつ64bit環境をご利用の方は、[CygwinWM 2023/04/05バージョン以降をインストール、環境設定](#)してください。
  - 2023/04/05バージョン以降のCygwinWMには推奨バージョンの64bit版LAMMPSが同梱されています。
- 上記に該当しない場合、または[推奨バージョン](#)以外のLAMMPSを利用したい方は、別途[Windows版LAMMPSのインストールと環境設定](#)が必要です。

# 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。

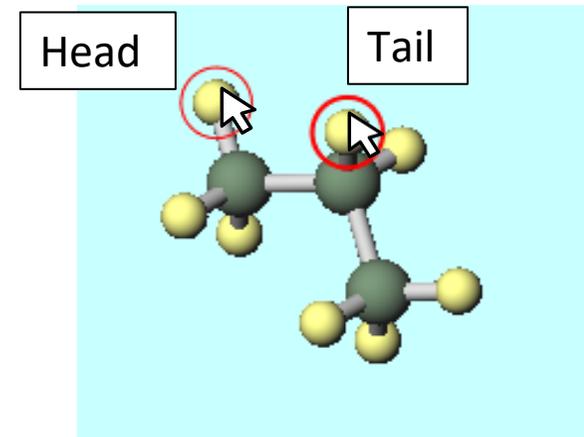
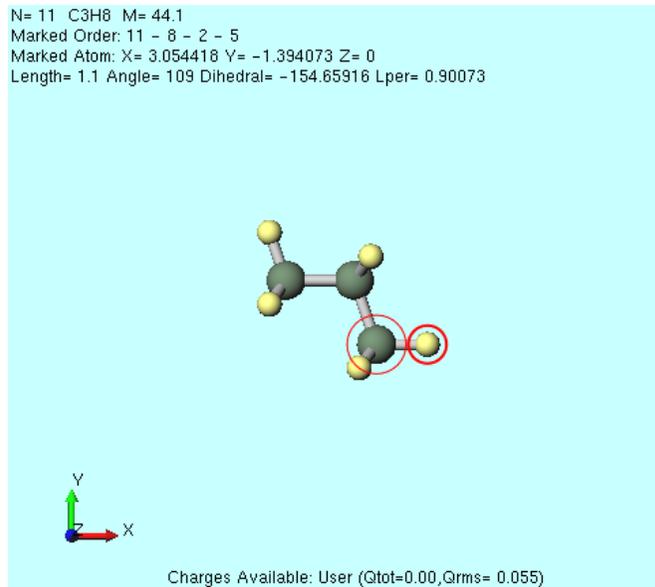
## ファイルモード

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。

# I. 系のモデリング

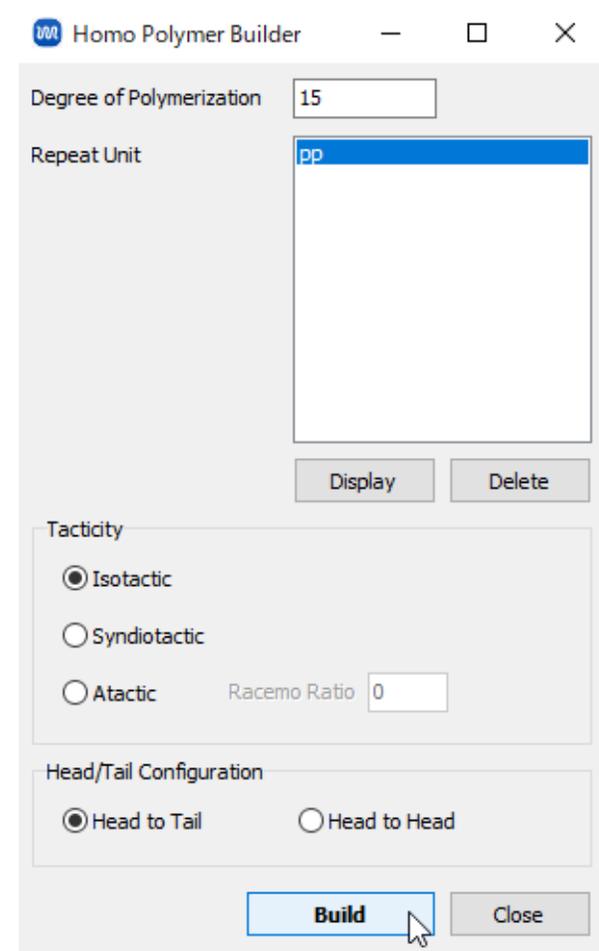
基本的な操作方法は[LAMMPS基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

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「glasstemp」と入力して**保存**をクリックします。
2. **Replace**を3回クリックしポリプロピレンの繰り返し単位（プロパン、 $C_3H_8$ ）を作成します。
3.  **自動で電荷を割り当て**をクリックし**OK**をクリックします。
4. 「正常に電荷が設定されました」と表示されたら**OK**をクリックします。
5. 重合した際に隣の繰り返し単位と結合する2箇所（HeadとTail）を続けてクリックします。



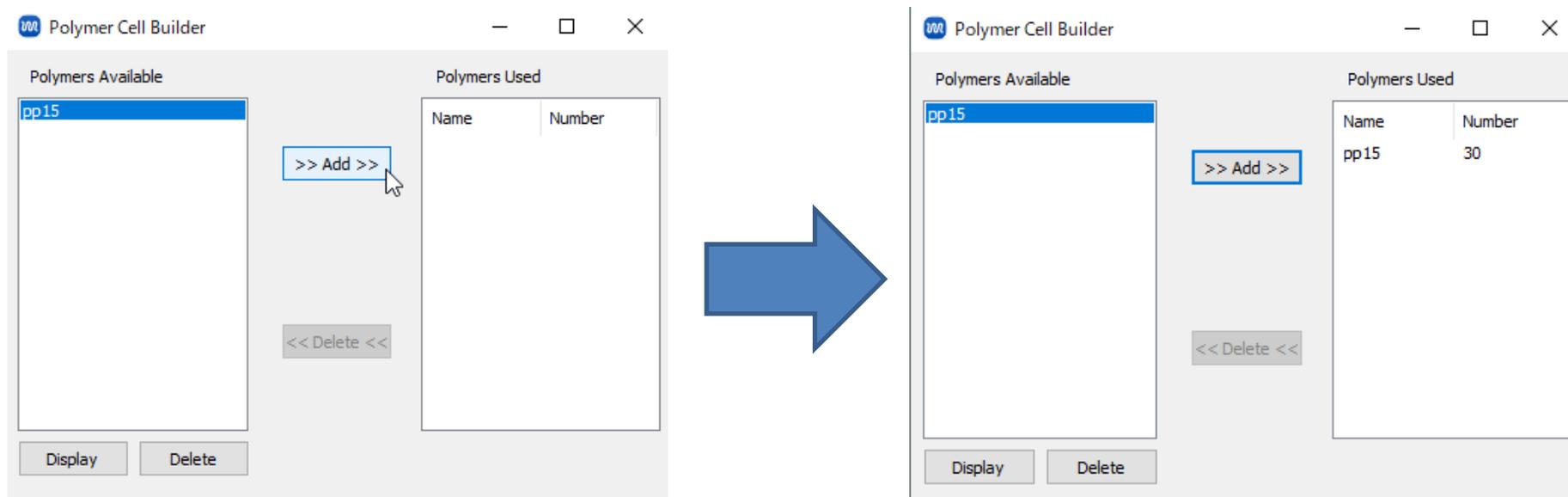
# I. 系のモデリング

1. **MD | ポリマー | 繰り返し単位登録**をクリックし**OK**をクリックします。
2. **Enter name**で「pp」と入力し**OK**をクリックします。
3. 「…pp.wmo saved successfully.」と表示されたら**OK**をクリックする。
4. **MD | ポリマー | ホモポリマービルダ**をクリックし以下のように設定します。
  - **Degree of Polymerization**を「15」に変更
  - **Repeat Unit**に「pp」を選択
5. **Build**をクリックし**Enter polymer name**で「pp15」と入力し**OK**とクリックします。
6. 「…pp15.wpo saved successfully.」と表示されたら**OK**をクリックします。
7. **Close**をクリックし**Homo Polymer Builder**ウィンドウを閉じます。



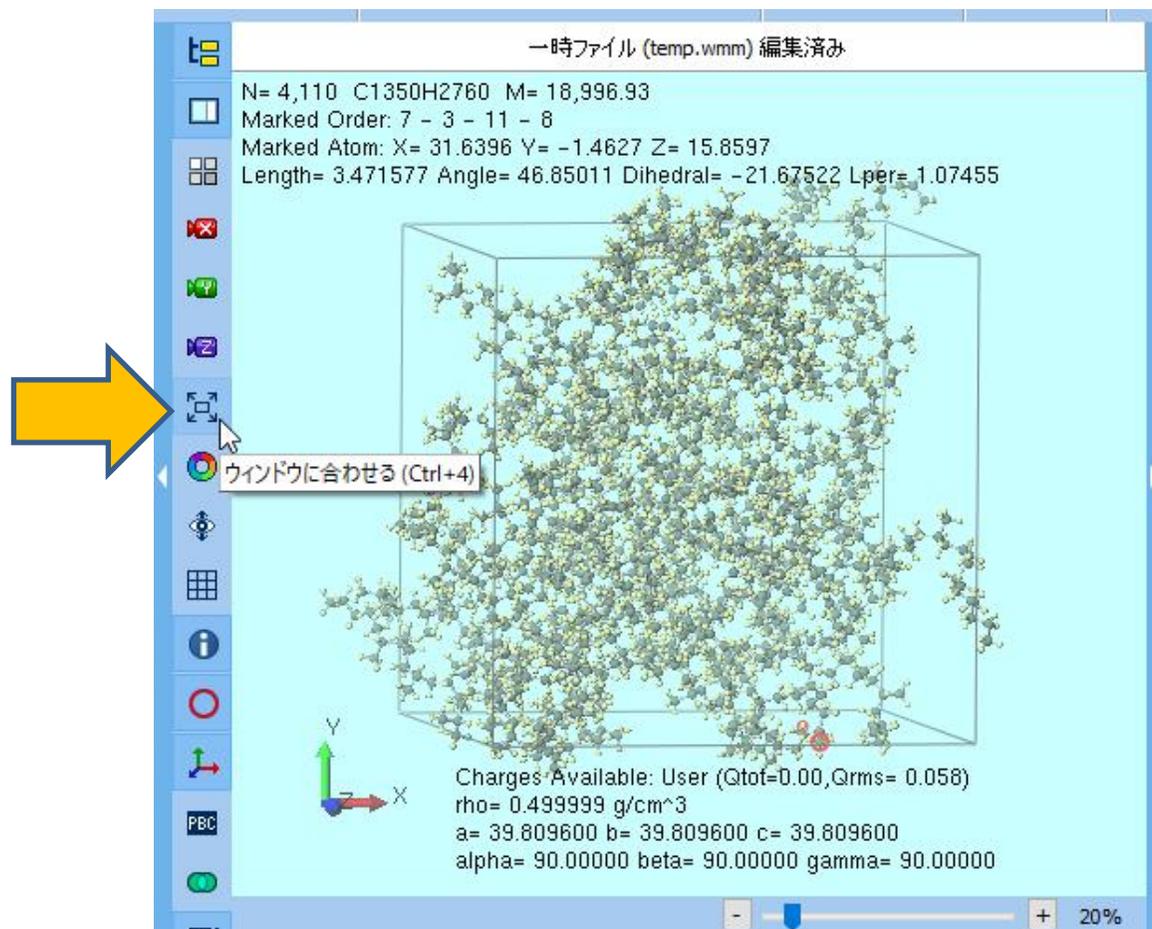
# I. 系のモデリング

1. MD | ポリマー | ポリマーセルビルダをクリックします。
2. **Polymers Available**からpp15を選択し**Add**をクリックします。
3. **Enter Value**に「30」と入力し**OK**をクリックします。
3. **Polymers Used**に「pp15 30」と表示されたのを確認し、**Build**をクリックします。
4. 黒いウィンドウが出現し数十秒程度ポリマーの構築処理が流れた後、「Successfully generated polymer system.」と表示されたら**OK**をクリックします。
5. **Close**をクリックし**Polymer Cell Builder**ウィンドウを閉じます。



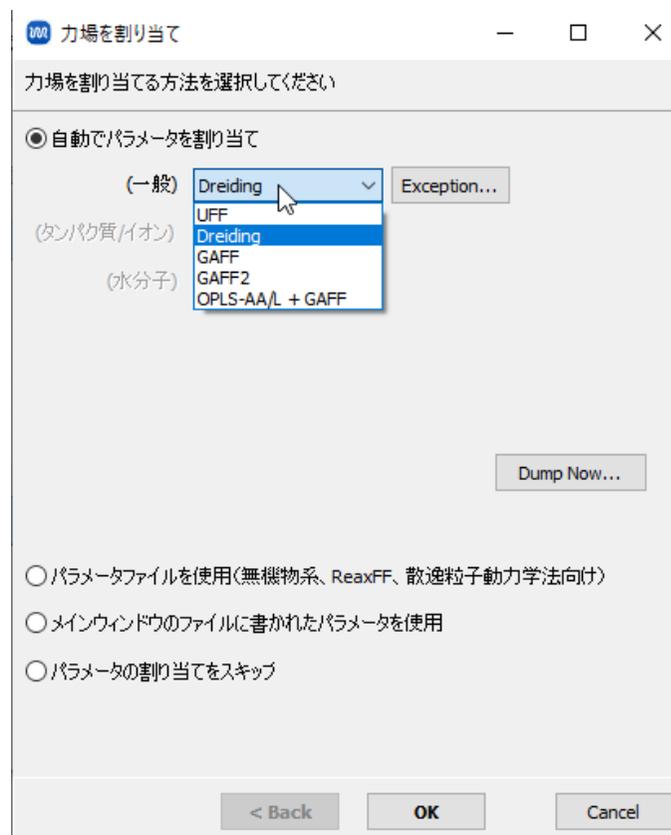
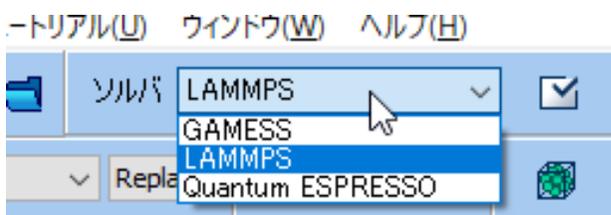
# I. 系のモデリング

1.  ウィンドウに合わせるをクリックし、系の全体を確認します。



## II. 計算の実行

1. ソルバで「LAMMPS」を選択し、 (ワークフロー設定) をクリックします。
2. 自動でパラメータを割り当ての(一般)をDreidingに変更し、右下のOKをクリックします。
3. 数秒処理が流れた後「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。



## II. 計算の実行

1. LAMMPS Workflow Setupウィンドウで以下のように設定を変更します。
  1. 2nd jobのTemperatureを「550」に変更
  2. 3rd jobのTemperatureを「550」に変更
2. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は1st job、2nd job、3rd jobすべてのPrecisionを「Low」に変更します。
3. 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。

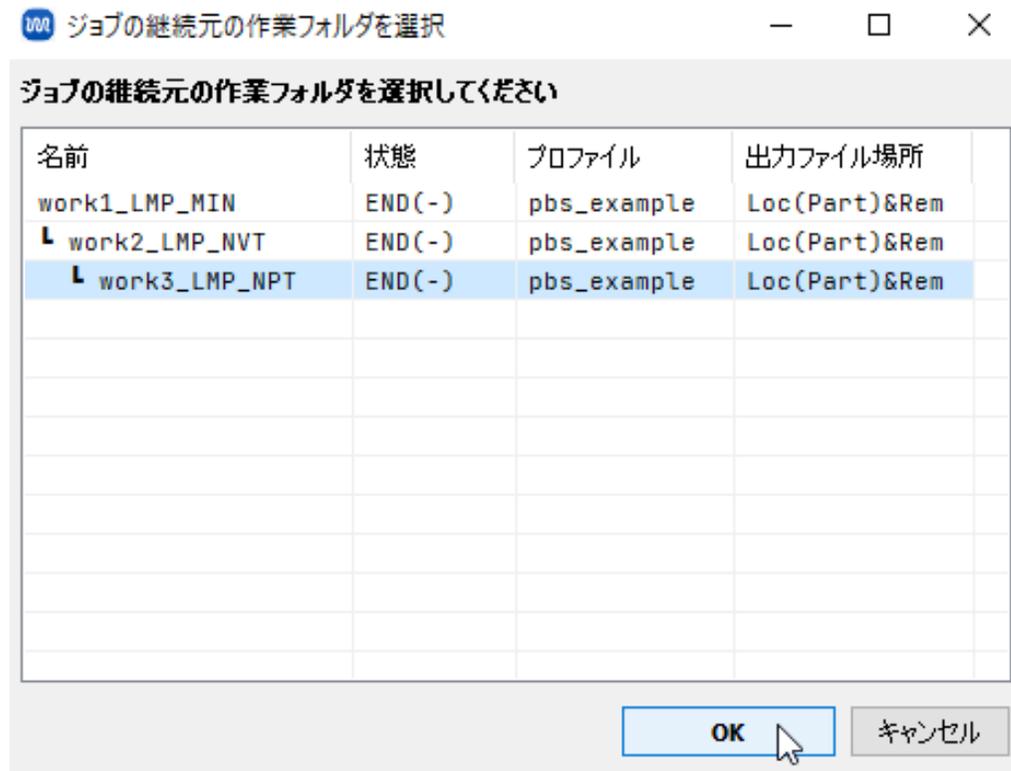
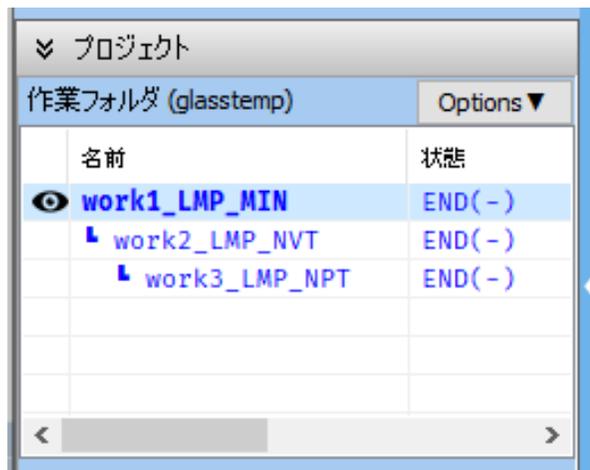
The screenshot shows the LAMMPS Workflow Setup window with the following settings:

- Preset:** Fluid/Amorphous NPT Equilibration (modified)
- # of Jobs:** 3
- 1st job:** Ensemble: Minimize, Temperature [K]: 300, Pressure [atm]: 1, Simulation time [ps]: 10, # of snapshots: 50, Initial velocity: From parent, Precision: Medium
- 2nd job:** Ensemble: NVT, Temperature [K]: 550, Pressure [atm]: 1, Simulation time [ps]: 10, # of snapshots: 50, Initial velocity: Random, Precision: Medium
- 3rd job:** Ensemble: NPT, Temperature [K]: 550, Pressure [atm]: 1, Simulation time [ps]: 50, # of snapshots: 50, Initial velocity: From parent, Precision: Medium

Buttons at the bottom: Reset..., Import..., Export..., OK, Cancel.

## II. 計算の実行

1. work1\_LMP\_MINからwork3\_LMP\_NPTまでの3つの作業フォルダの**状態がENDまたはEND(-)**に変化したら、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. work3\_LMP\_NPTを選択し**OK**をクリックします。



## II. 計算の実行

1. **Preset**を「Fluid/Amorphous NPT Production」に変更します。
2. 以下のように設定を変更します。
  1. **1st job**の**Temperature**を「550」に変更
  2. **1st job**の**Simulation time**を「1000」に変更
3. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は**1st job**の**Precision**を「Low」、**Simulation time**を「50」に変更します。
4. **Details...**をクリックします。

LAMMPS Workflow Setup

Preset: Fluid/Amorphous NPT Production (modified) # of Jobs: 1

Continue from work3\_LMP\_NPT  Enable parameter scan Config...

1st job

Ensemble: NPT Temperature [K]: 550 Pressure [atm]: 1

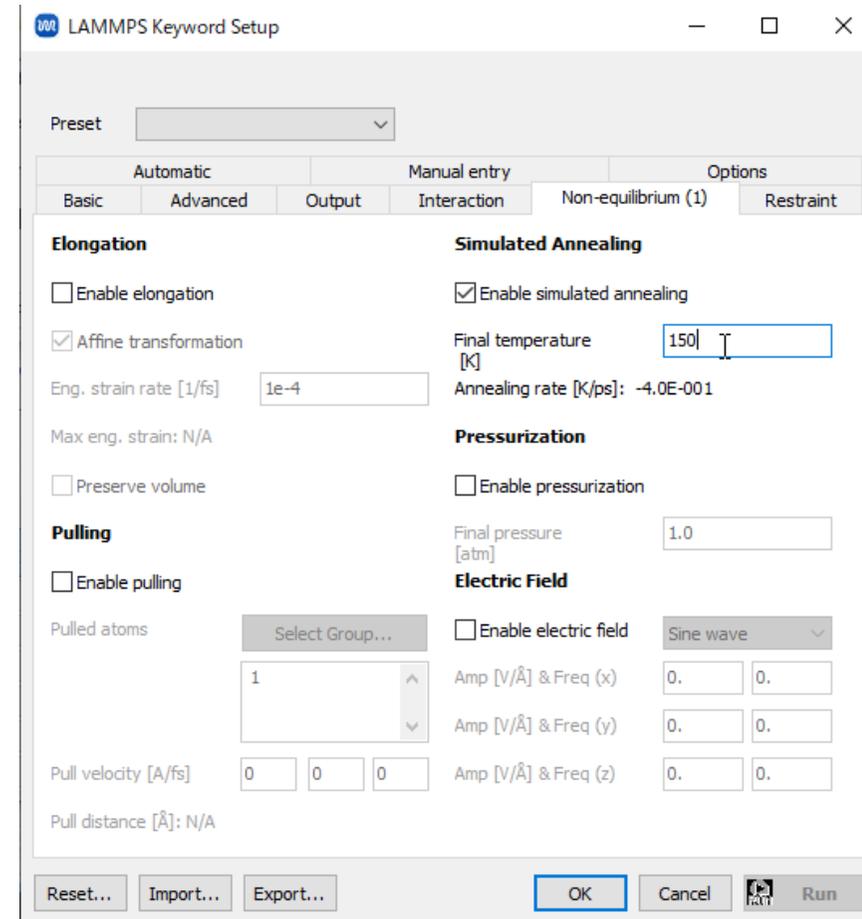
Simulation time [ps]: 1000 # of snapshots: 250 Initial velocity: From parent

Free boundary condition Precision: Medium Details...

Reset... Import... Export... OK Cancel

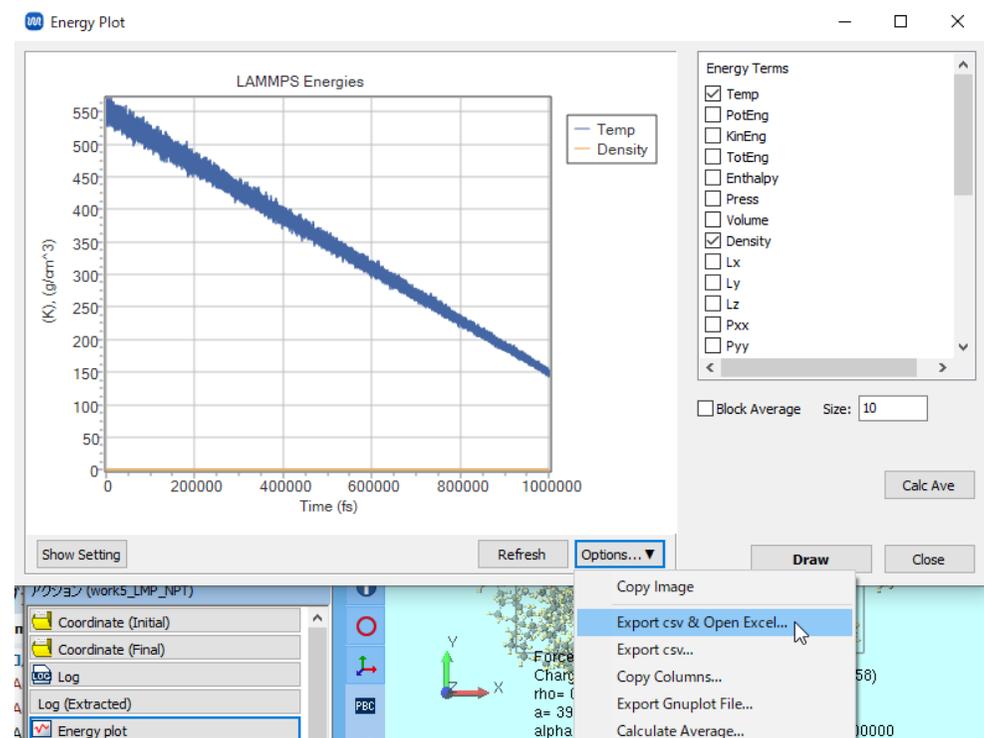
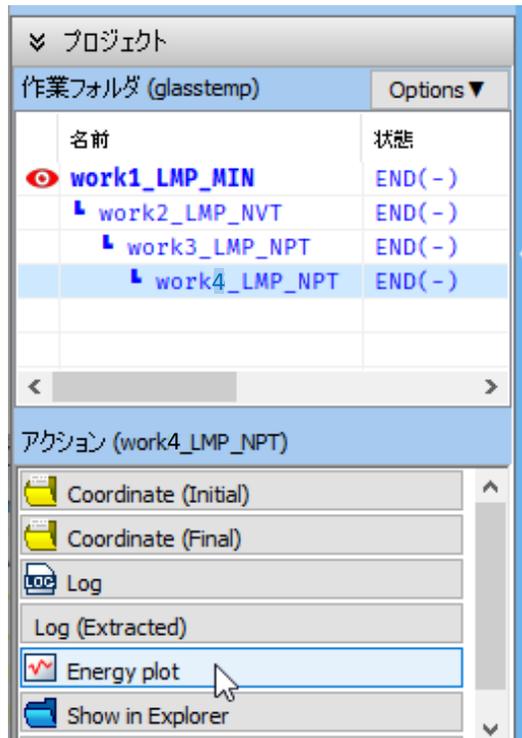
## II. 計算の実行

1. LAMMPS Keyword Setupウィンドウで**Non-equilibrium(1)**タブに移動し以下のように設定を変更します。
  1. **Enable simulated annealing**をチェック
  2. **Final temperature**を「150」に変更
2. **OK**をクリックして**LAMMPS Keyword Setup**ウィンドウを閉じます。
3. **LAMMPS Workflow Setup**ウィンドウで**OK**をクリックします。
4. **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。



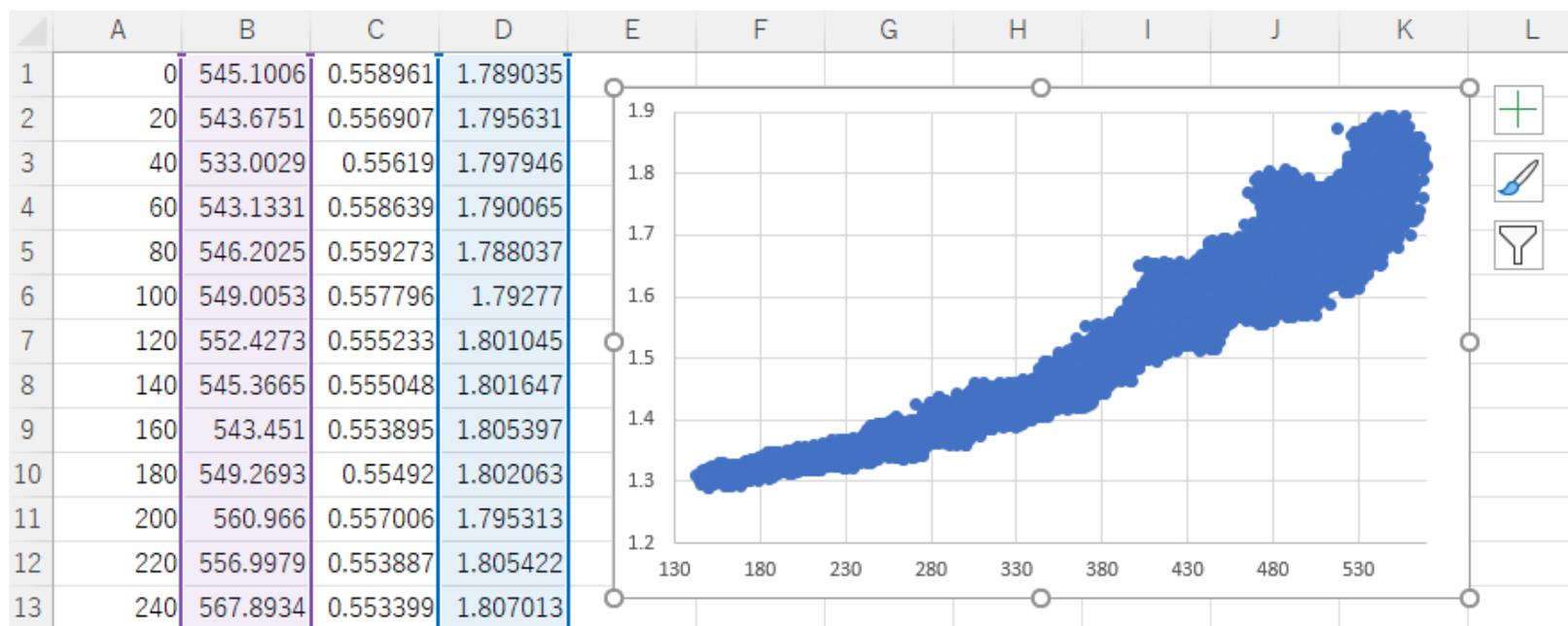
# III. 結果解析

1. work4\_LMP\_NPTの作業フォルダの状態が**END**または**END(-)**に変化したら、「work4\_LMP\_NPT」をクリックし、**アクション**で  **Energy plot**をクリックします。
2. **Energy Terms**にて**Temp**と**Density**にチェックを入れ**Draw**をクリックし、**Options Export csv & Open Excel**をクリックします。
3. 名前を付けて**保存**で**保存**をクリックします。



# III.結果解析

- 出力されたcsvファイルの2カラム目を横軸、3カラム目の逆数を縦軸にプロット（温度-比容曲線）します。この曲線の変曲点の温度がガラス転移温度の推測値となります。
  - ※ 高温側・低温側をそれぞれ一次関数でフィッティングしそれらの交点を変曲点とします。
  - ※ 精度を落として計算した場合は変曲点が見えづらくなります。
  - ※ 本書の計算条件よりも分子数を大きくし、計算時間を長くすると再現性が向上します。
  - ※ 本書のように温度を走査する方法ではなく各温度で独立したMDを流す方法もあります。



# 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