

 winmostar チュートリアル

LAMMPS/Gromacs

ガラス転移温度算出

(ポリマー、スキャン計算)

V11.13.0

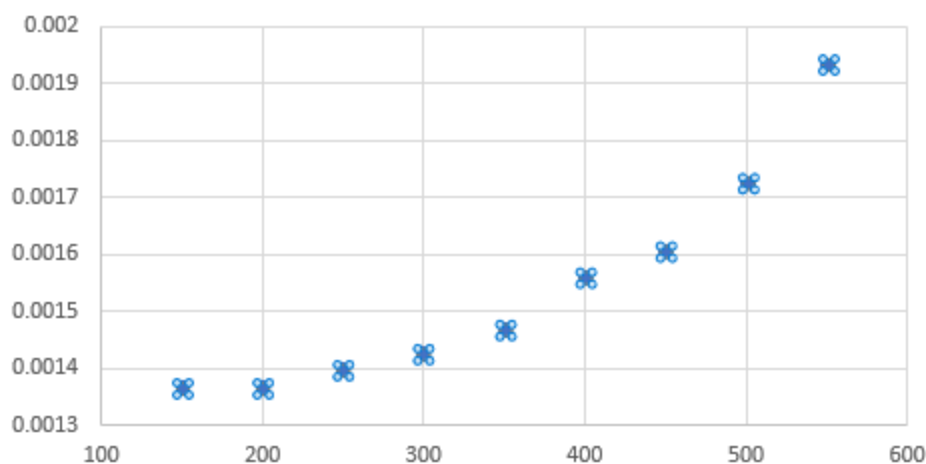
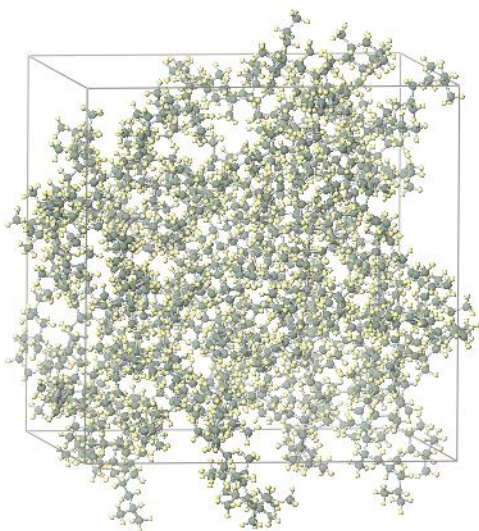
2025年 7月 1日 株式会社クロスアビリティ

本書について

- 本書はWinmostar 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

- 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。
- ポリプロピレン溶融体の計算を温度を変えながら多数実行し、ガラス転移温度を算出します。



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）も結果に影響を与えます。
- チュートリアルという性質上、ここではステップ数を短めにして計算を実行しています。

動作環境設定

- 本機能を用いるためにはCygwinとGAMESSのセットアップが必要です。LAMMPSを用いるためにはLAMMPSのセットアップが必要です。
- <https://winmostar.com/jp/installation/> インストール方法のWindows用のGAMESS、LAMMPSとCygwinの設定手順に従います。

(6) **こちらの手順**に従いWinmostar用のCygwin環境（CygwinWM）を構築します。

(7) WinmostarをインストールしたWindows PC（ローカルマシン）上で使用するソルバを、以下のリンク先の手順でインストールします。リモートサーバでのみ計算を行う場合もインストールしてください。

量子化学計算を実行する方 : **GAMESS** [NWChem](#) [Gaussian](#)

分子動力学計算を実行する方 : **LAMMPS**

固体物理計算を実行する方 : [Quantum ESPRESSO](#) [FDMNES](#)

Fragment ER（別売）を実行する方 : [NAMD](#)

※ポリマービルダを利用するためにはLAMMPSのインストールが必要です。

※使用する予定のないソルバをインストールする必要はありません。

※Gromacs, Amber, MODYLAS, OpenMXは前の手順でインストールするCygwinに含まれます。

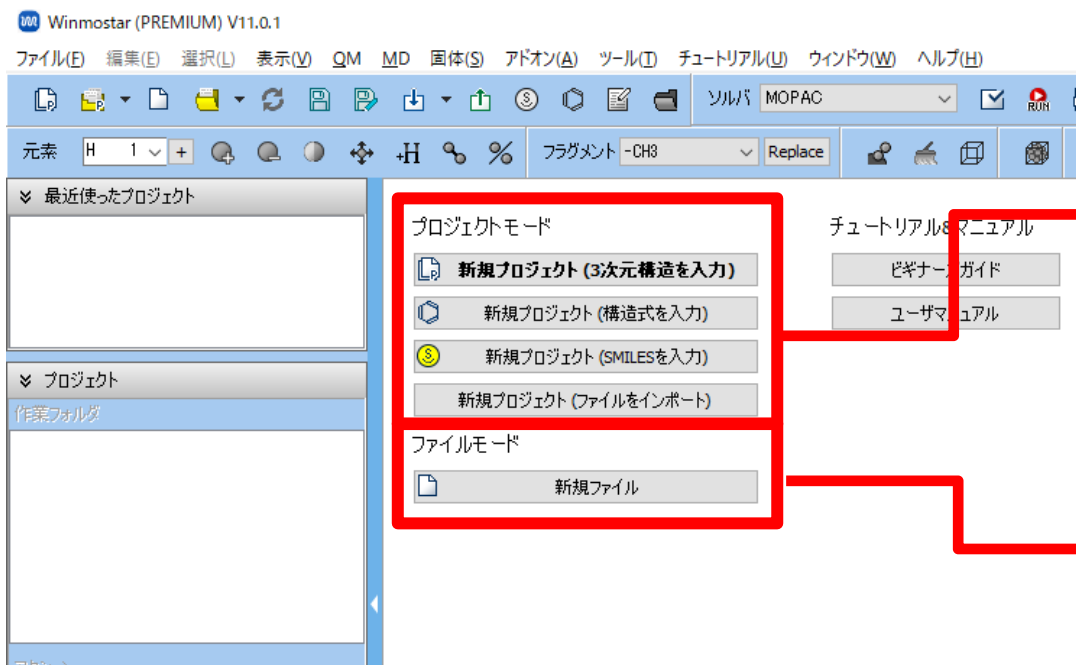
※最大原子数を拡張したMOPAC6を使う場合は[こちら](#)から入手してください（動作未保障）。

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。

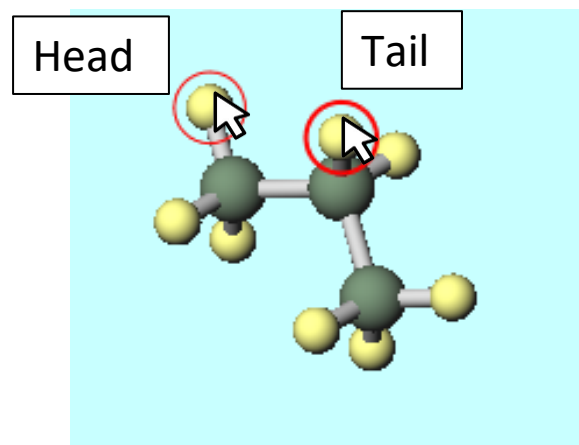
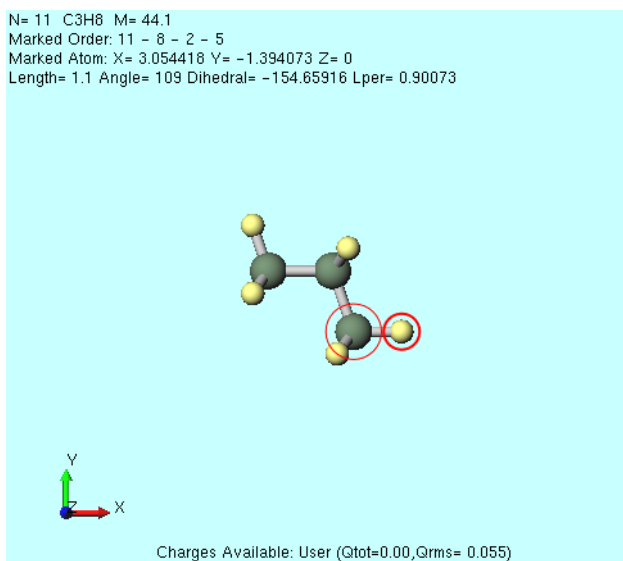
ファイルモード

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

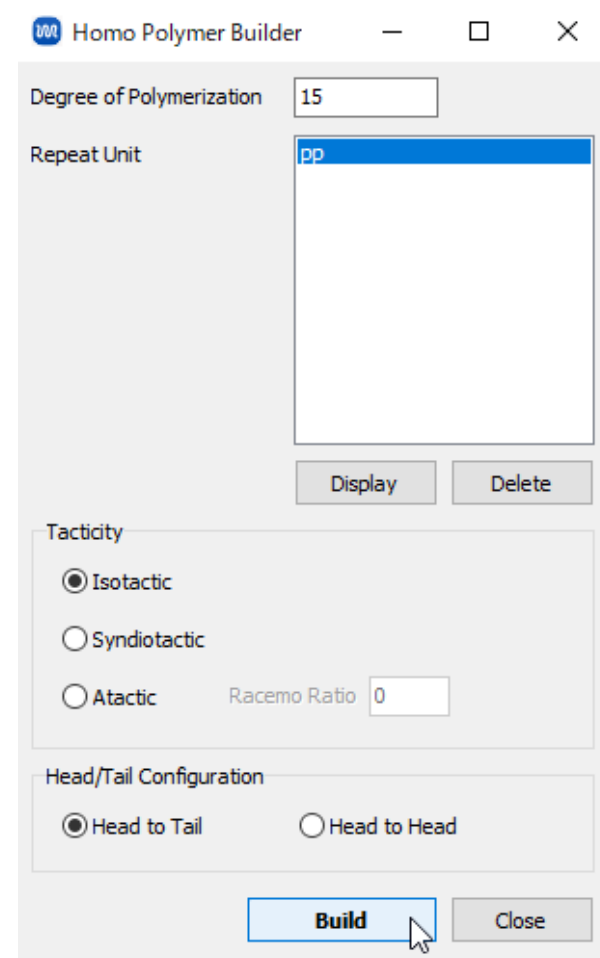
基本的な操作方は[LAMMPS基礎編チュートリアル](#)または[Gromacs基礎編チュートリアル](#)を参照してください。

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_scan」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。



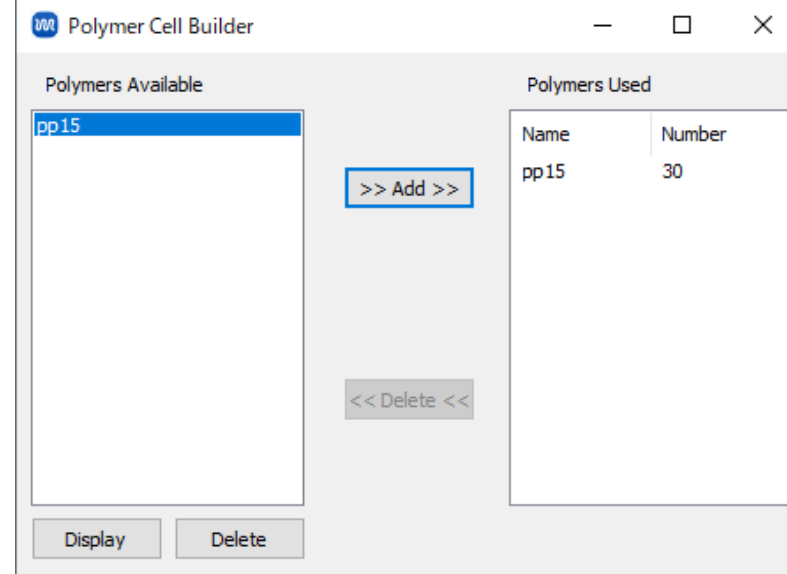
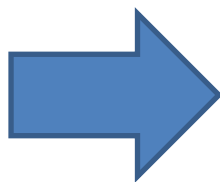
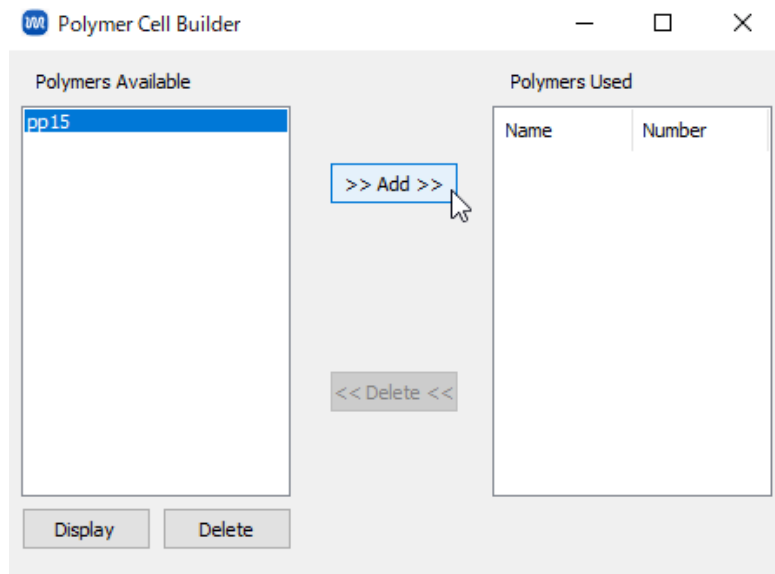
I. 系のモデリング

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**をクリックします。
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。



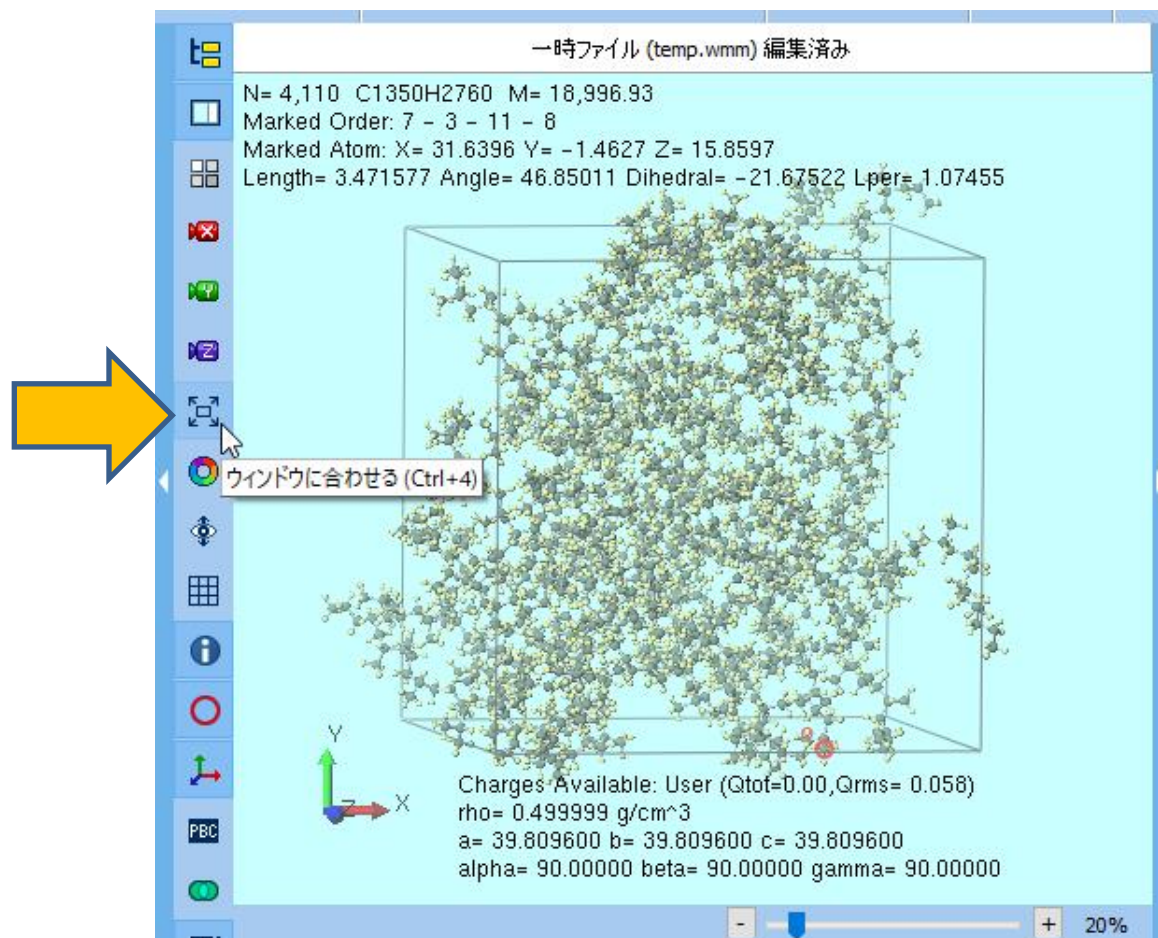
I. 系のモデリング

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。



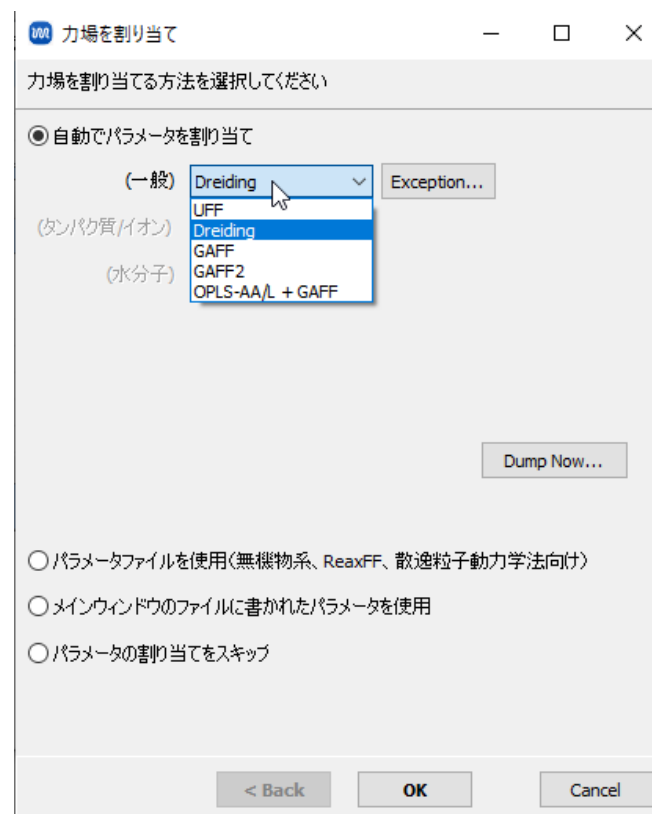
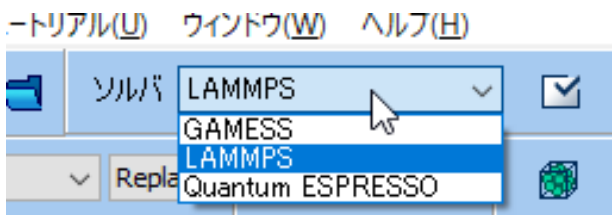
I. 系のモデリング

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」または「Gromacs」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。



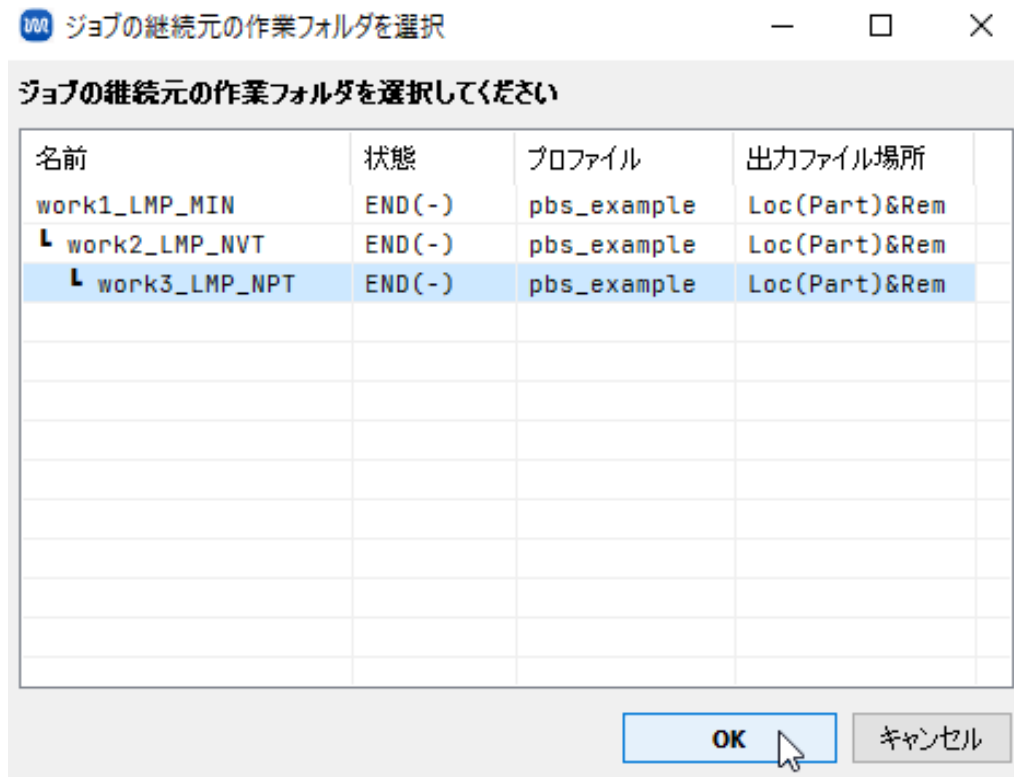
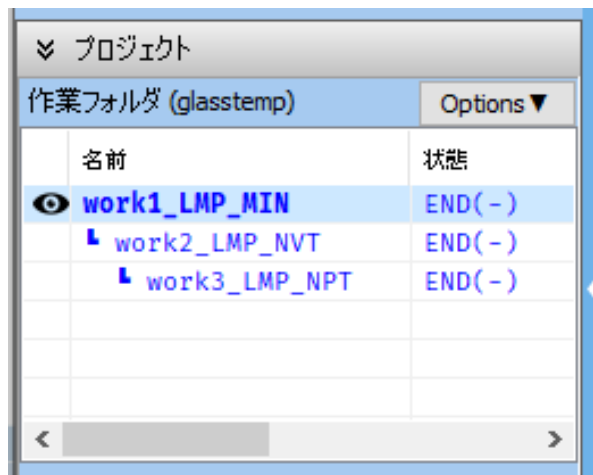
II. 計算の実行

1. 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**3rd job**の**Simulation time**を「10」に変更します。
 - **Preset**を12-Step Compressionや21-Step Compression-Decompressionにするとより平衡化計算が安定します。
2. **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 'Gromacs Workflow Setup' window. At the top, the 'Preset' is set to 'Fluid/Amorphous NPT Equilibration' and the number of jobs is set to 3. Below this, there are three sections for job configuration: '1st job', '2nd job', and '3rd job'. Each section contains fields for 'Ensemble', 'Temperature [K]', 'Pressure [atm]', 'Simulation time [ps]', '# of snapshots', 'Initial velocity', 'Free boundary condition', and 'Precision'. The '1st job' section has 'Ensemble' set to 'Minimize', 'Simulation time [ps]' set to 10, and 'Precision' set to 'Medium'. The '2nd job' section has 'Ensemble' set to 'NVT', 'Simulation time [ps]' set to 10, and 'Precision' set to 'Medium'. The '3rd job' section has 'Ensemble' set to 'NPT', 'Simulation time [ps]' set to 50, and 'Precision' set to 'Medium'. At the bottom of the window, there are buttons for 'Reset...', 'Import...', 'Export...', 'OK', and 'Cancel'. A mouse cursor is pointing at the 'OK' button.

II. 計算の実行

1. work1からwork3までのすべての作業フォルダの**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. **# of Jobs**で+を2回クリックします。**1st Job**の**Ensemble**を「NVT」に変更し、**Simulation time**を「10」とします。適宜**2nd job**, **3rd Job**の**Simulation time**を変更します。
 - **Simulation time**を大きくすると最終的に得られるグラフが滑らかになります。
3. 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**と**3rd job**の**Precision**を「Low」、**Simulation time**を「10」に変更します。
4. **Enable scan calculation**にチェックを入れ**Config**をクリックします。

Gromacs Workflow Setup

Preset: Fluid/Amorphous NPT Production (modified) # of Jobs: 3

Continue from work3_GMX_NPT ☒ Enable parameter/structure scan # Conditions: 9 Config...

1st job

Ensemble: NVT Simulation time [ps]: 10 Precision: Medium

2nd job

Ensemble: NPT Simulation time [ps]: 50 Precision: Medium

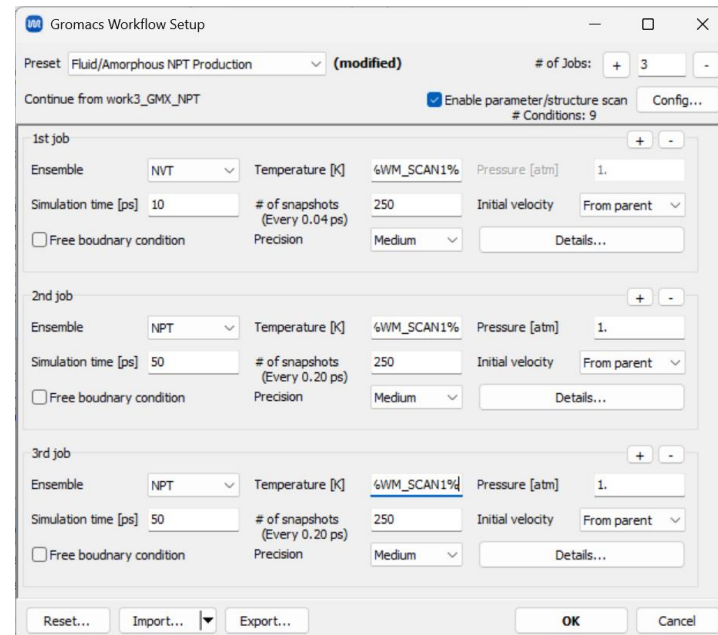
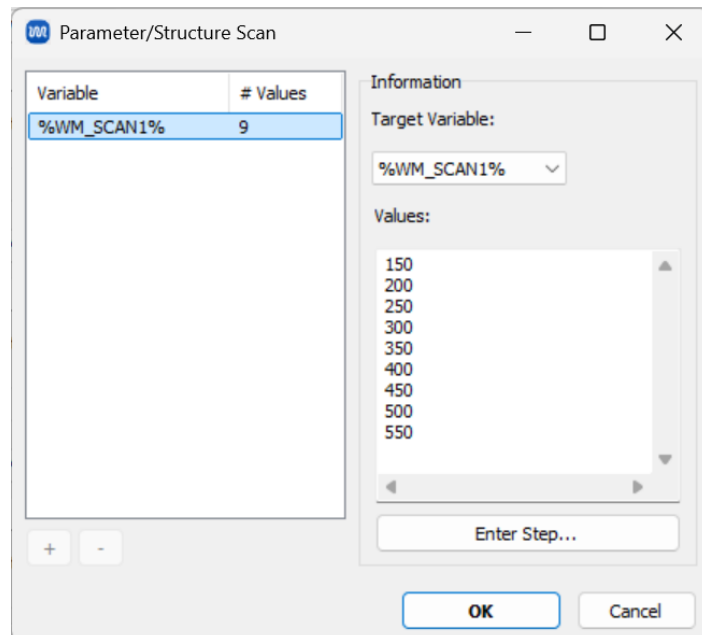
3rd job

Ensemble: NPT Simulation time [ps]: 50 Precision: Medium

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

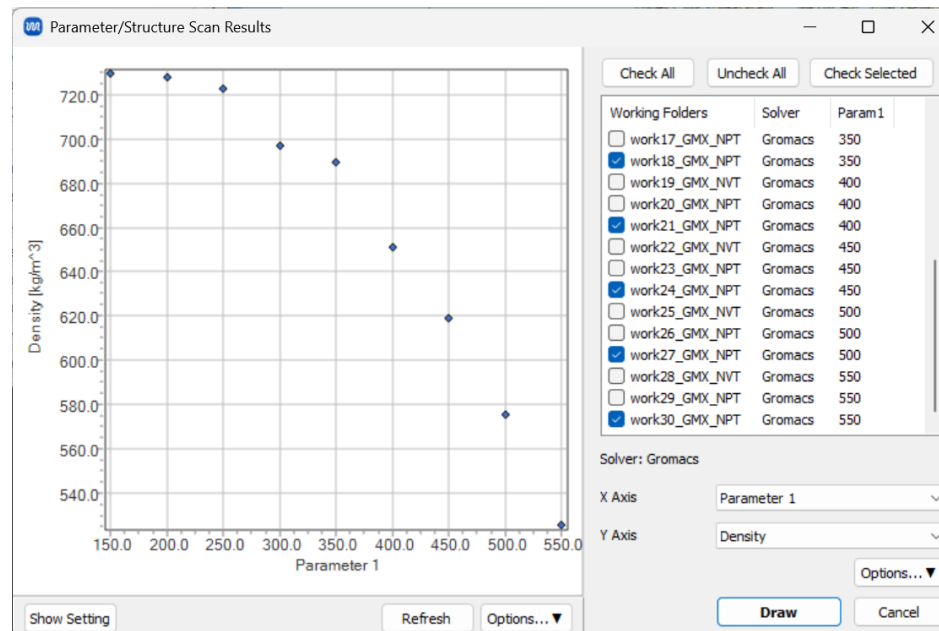
II. 計算の実行

1. **Enter Step...**をクリックし、**Minimum value**に「150」、**Interval**に「50」、**Number of steps**に「9」と入力します。
 - **Values**の範囲に適宜得られるガラス転移温度が含まれるように設定します。また**Interval**が小さいほど最後のフィッティングが安定します。
2. **Parameter Scan**ウィンドウで**OK**をクリックします。
3. **Workflow Setup**ウィンドウで**1st job ~ 3rd job**の**Temperature**に「`%WM_SCAN1%`」と入力し**OK**をクリックします。**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。



III.結果解析

1. work4～work21の作業フォルダの**状態**が**END**または**END(-)**に変化したら、**ファイル | プロジェクト | スキャン結果表示**をクリックします。
2. **Uncheck All**をクリックし、work6, 9, 12, 15, 18, 21, 24, 27, 30にチェックを入れ、**Y Axis**を「Density」に変更し、**Draw**をクリックします。
2. 処理が完了しグラフが出現した後**Options | Export csv & Open Excel**をクリックします。
 - LAMMPS (g/cm³) とGromacs (kg/m³) で単位が異なります。
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

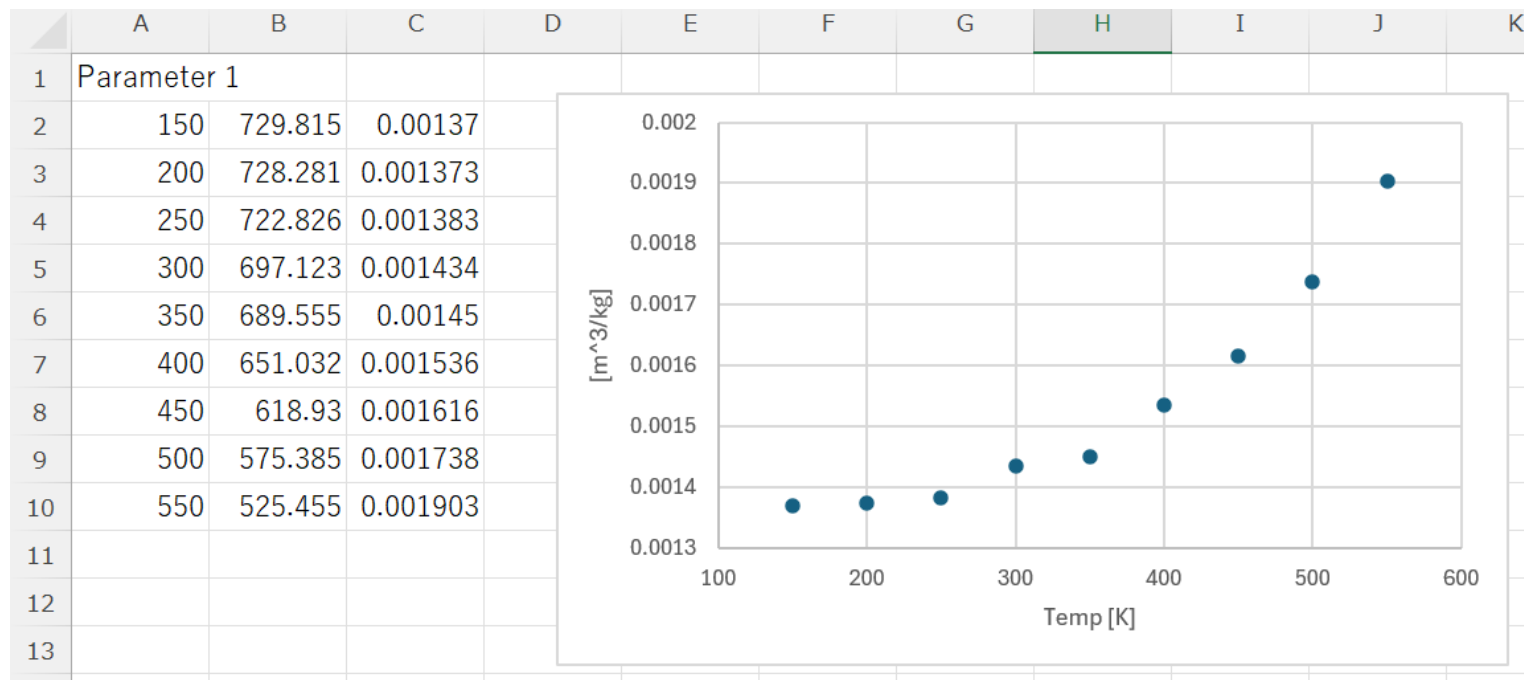
1. 出力されたcsvファイルの1カラム目を横軸、2カラム目の逆数を縦軸にプロット（温度-比容曲線）します。この曲線の変曲点の温度がガラス転移温度の推測値となります。

※ 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。

※ 本書のように各温度で独立したMDを流す方法ではなく温度を走査する方法もあります。



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