winmostar チュートリアル

LAMMPS
固体壁面を含む系

V10.4.3

2021年4月1日　　株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

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

- 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。
- 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、伸長速度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。

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

動作環境設定

- 本機能を用いるためには、LAMMPSとCygwin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LAMMPSとCygwinの設定手順に従います。

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

動作環境設定

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

(6) Windows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。

NWChem　LAMMPS　NAMD　Quantum ESPRESSO　FDMNES

※Gromacs, Amber, MODYLAS, OpenMXは(7)でインストールするcygwin_wmに含まれます。

(7) MDまたはSolidパックの計算（およびその他の一部の処理）を実行する場合は、以下のいずれかのリンク先の手順でCygwinの環境を構築します。

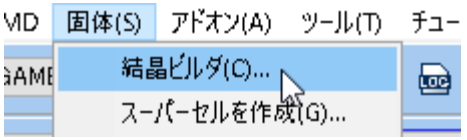
ビルド済みのcygwin_wmをインストールする場合（推奨）

cygwin_wmをビルドする場合（非推奨、上級者向け）

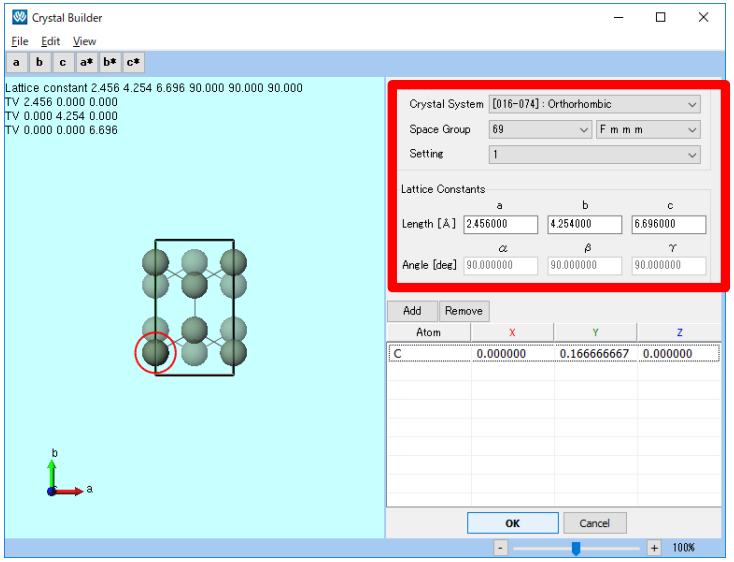
Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合（ベータ版）

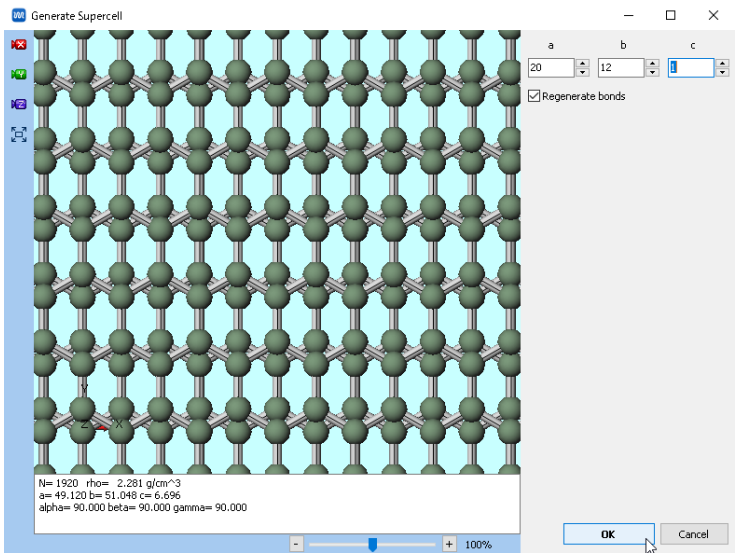
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 系の作成



1. **固体 | 結晶ビルダ**をクリックする。
2. 下図（左）のように**Orthorhombic 69 Fmmm**、a=**2.456** Å、b=**4.254** Å、c=**6.696** Å、
   (0.0, 0.166666667, 0.0)に**C**原子が置かれた結晶を作成し、OKをクリックする。
3. **固体 | スーパーセルを作成**をクリックする。
4. **20×12×1**のスーパーセルを作成し、**OK**をクリックする。
5. (名前を付けて保存)をクリックし、**graphene.cif**として保存する。

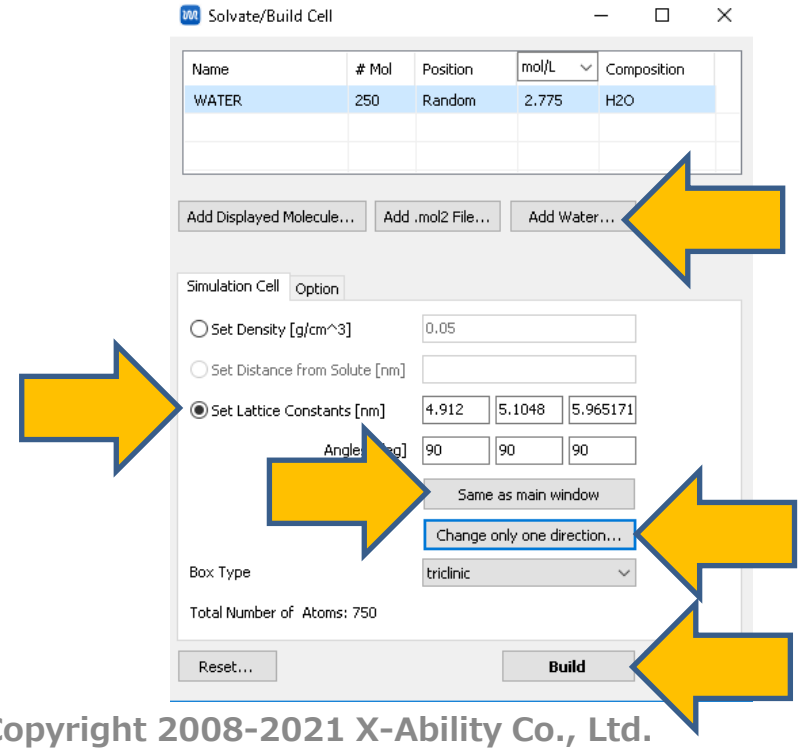




Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 系の作成

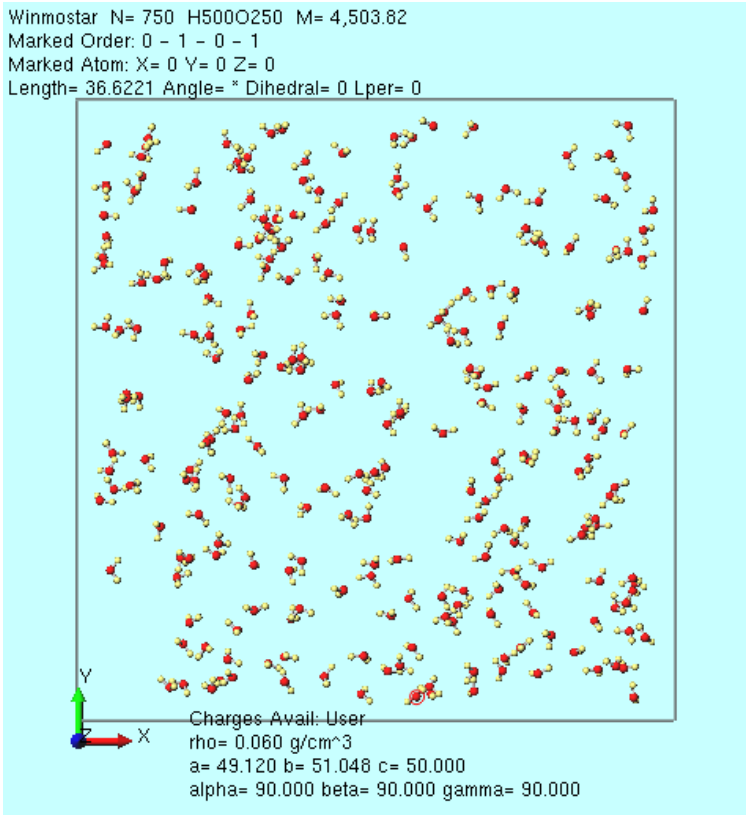
1. (**溶媒を配置/セルを構築**)をクリックする。
2. **Add Water**をクリックし、**250**と入力して**OK**をクリックする。
3. **Set Lattice Constants**にチェックを入れ、**Same as main window**をクリックする。
4. **Change only one direction**をクリックし、**Select direction**ではそのまま**OK**をクリックし、**Enter density**で「0.05」と入力し**OK**をクリックする。
5. **Build**をクリックする。

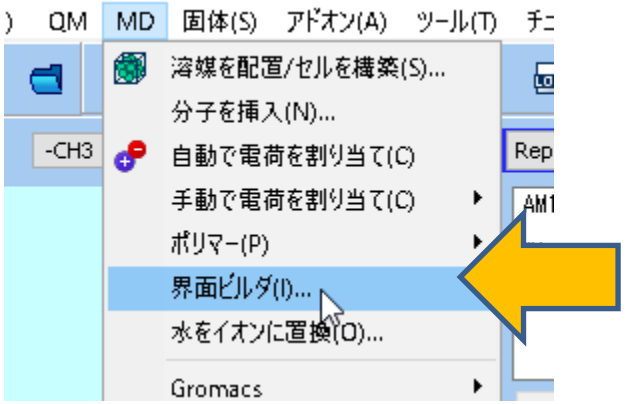


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 系の作成

1. 水が配置された系が表示される。
2. **MD | 界面ビルダ**をクリックする。

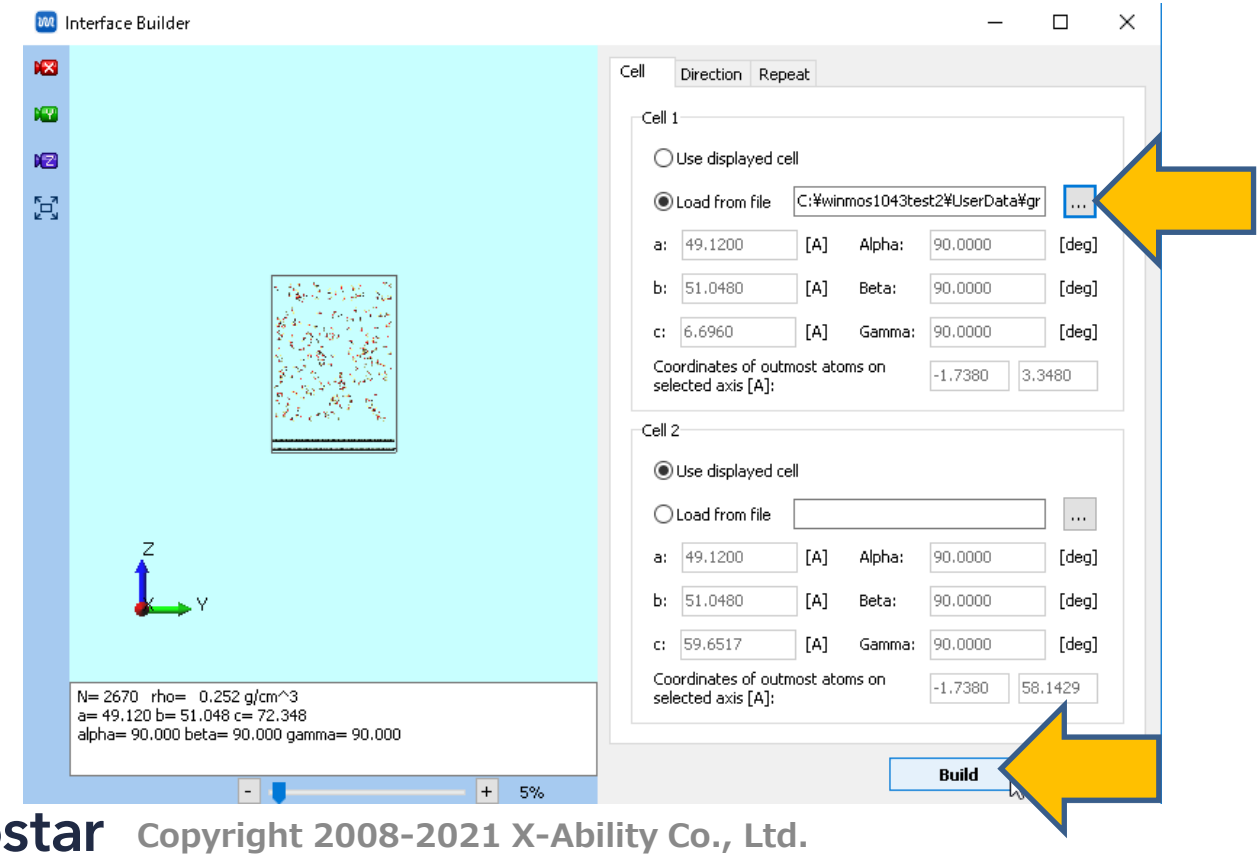




Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 系の作成

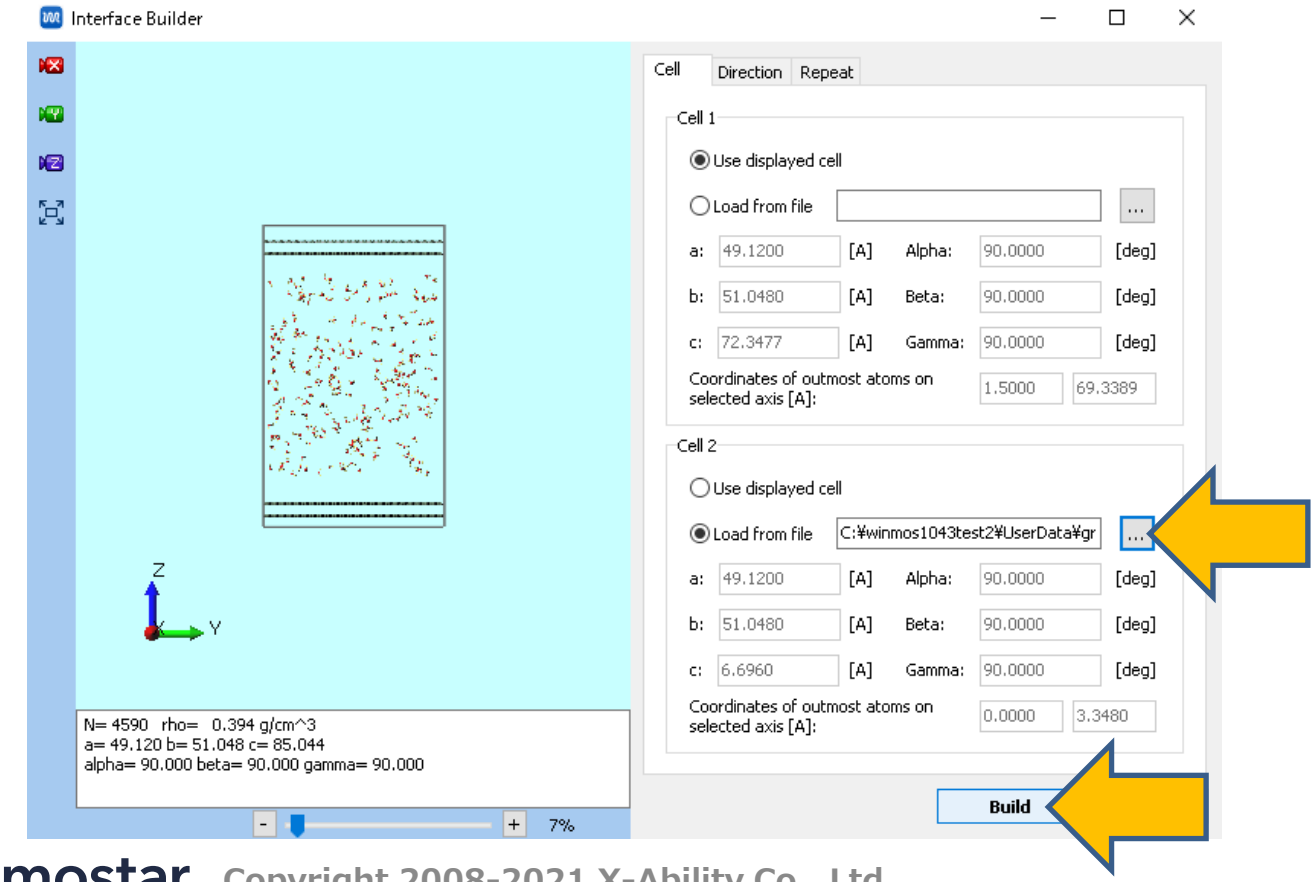
1. 以下のように、グラフェン–水の界面を作成する。
2. **Cell 1**の…ボタンをクリックし、**graphene.cif**を選択する。
3. **Build**をクリックする。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 系の作成

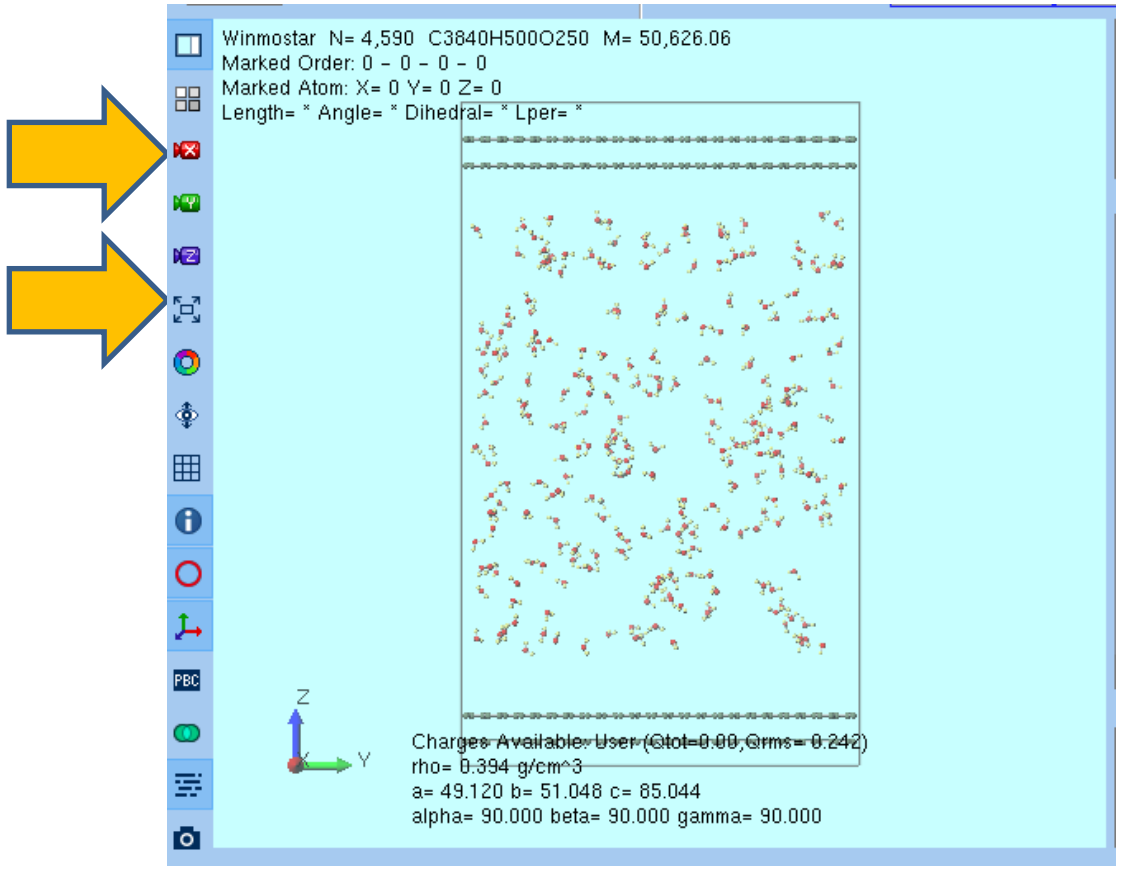
1. 再びMD｜界面ビルダをクリックする。
2. **Cell 1**は変更せず、**Cell 2**の…ボタンをクリックし**graphene.cif**を選択する。
3. **Build**をクリックする。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 系の作成

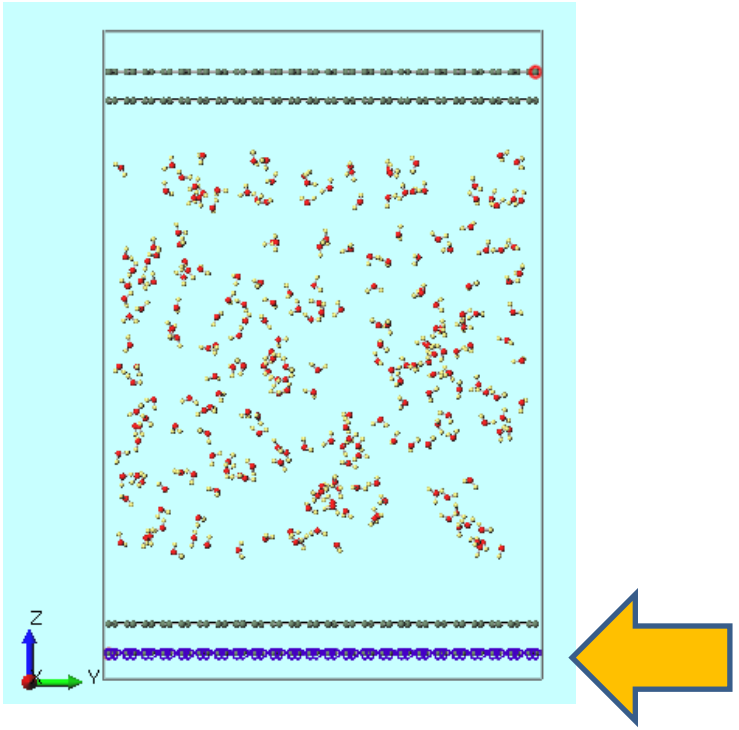
1. (**X軸方向から表示**) をクリックする。
2. (**ウィンドウに合わせる**) をクリックする。
3. グラフェンに水の相が挟まれている様子が分かる。

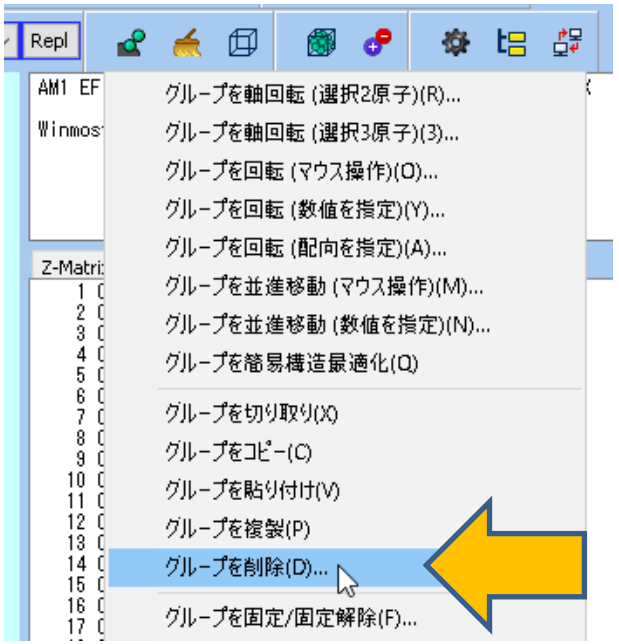


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 系の作成

1. Ctrl+ドラッグで、下のグラフェン2層のうち下の1層を選択する。文字情報に原子が隠れて操作しづらい場合は、Shift＋ドラッグで視点を平行移動させる。
2. (**グループ編集**) | **グループを削除**を選択する。
3. **Delete**をクリックする。

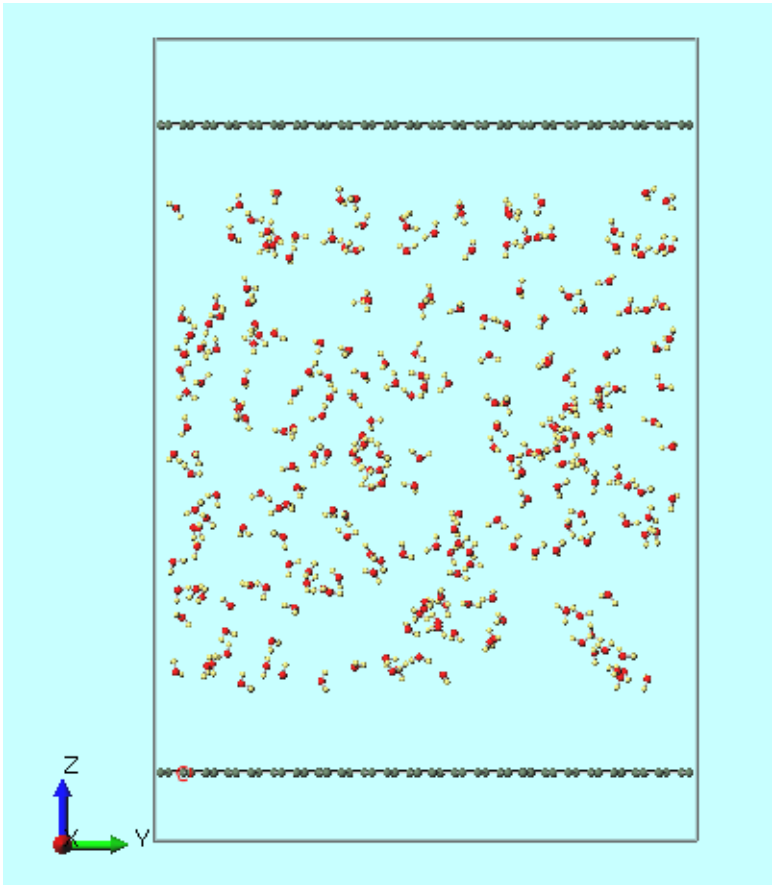




Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 系の作成

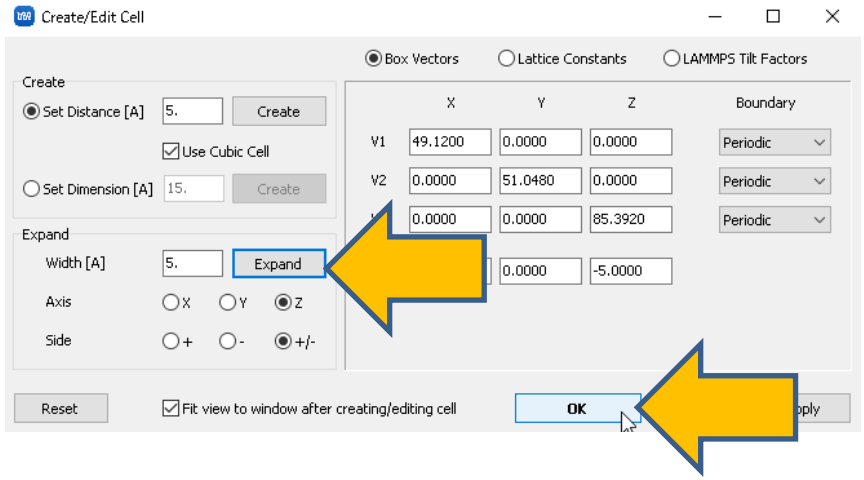
1. 同様にして、上のグラフェン2層のうちの上の1層も削除する。
2. (**セルを作成/編集**) | **手動でセルを編集**を選択する。

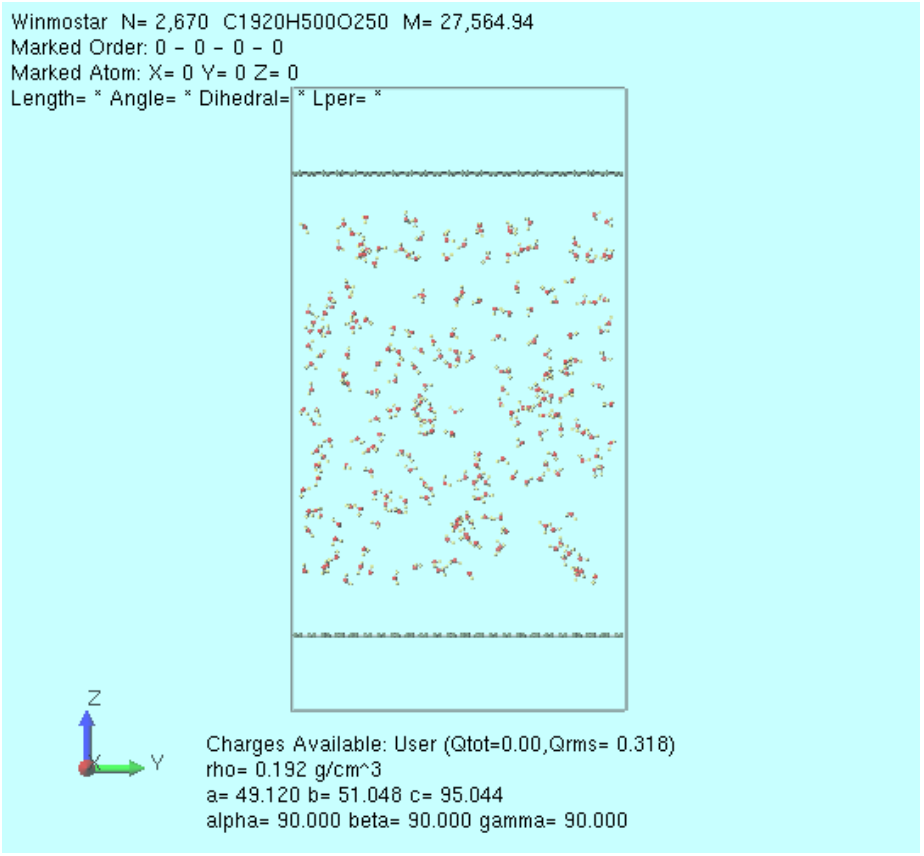


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 系の作成

1. **Expand**をクリックする。
2. **OK**をクリックする。

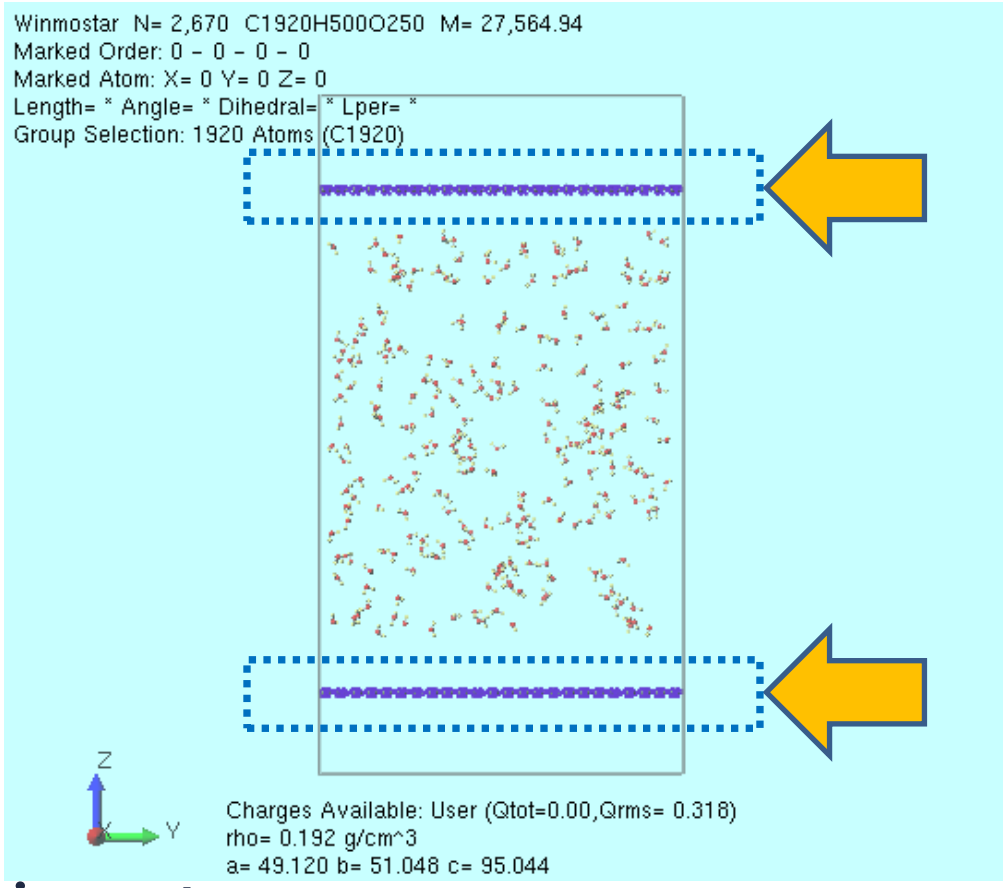


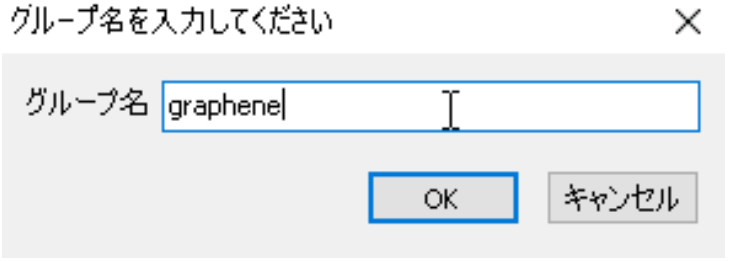


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 平衡化計算

1. 分子表示エリアにて上下のグラフェンをどちらもCtrl+ドラッグで囲いグループ選択（青色）された状態にする。
2. **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**OK**を押す。

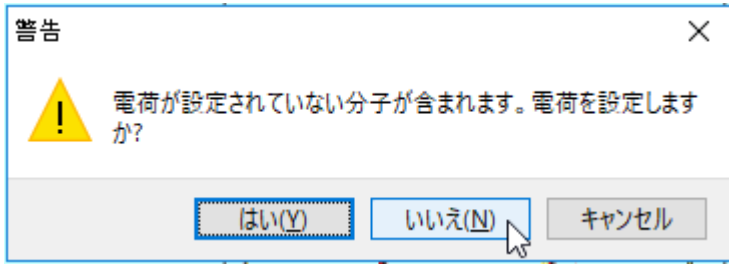


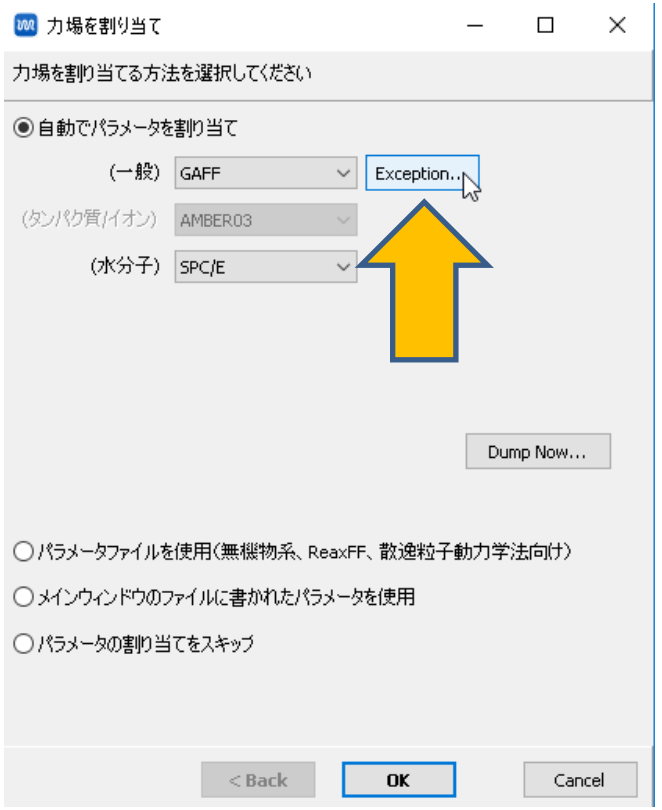


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 平衡化計算

1. **ソルバー覧**から**LAMMPS**を選択し、 (**キーワード設定**)をクリックする。
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**ボタンを押す。
3. **力場を割り当て**ウィンドウが開いたら、**Exception**ボタンを押す。

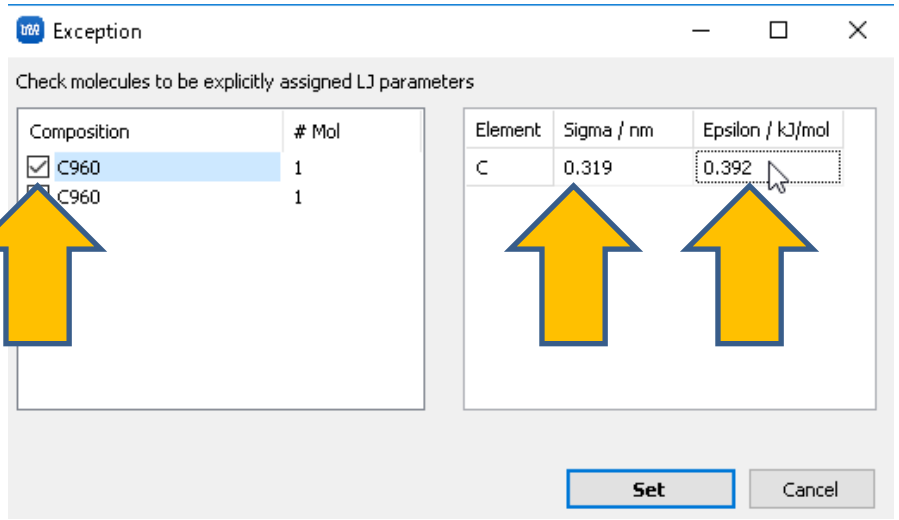


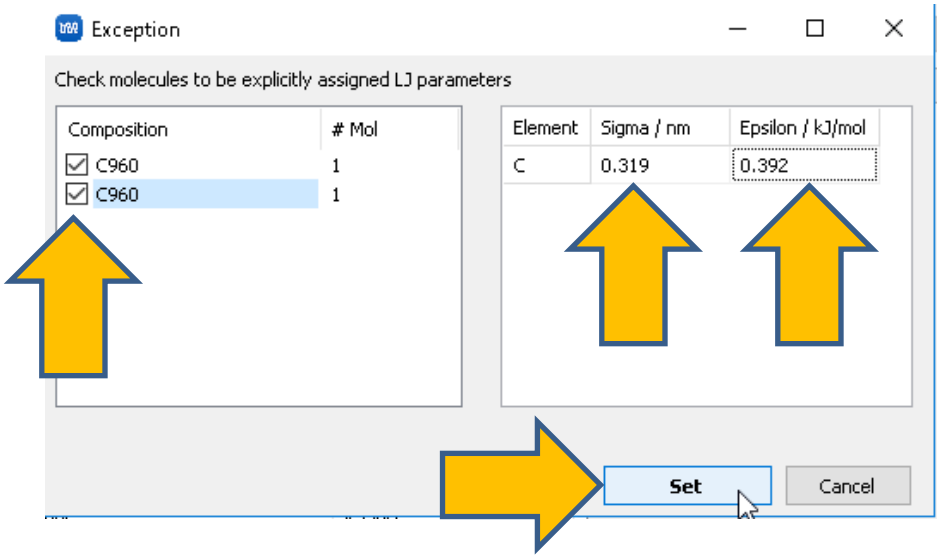


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 平衡化計算

1. **Exception**ウインドウの左側の1つ目の**C960**にチェックを入れ、右側の欄に「**0.319**」、「**0.392**」と入力する。（J. Phys. Chem. B, 107. 1345-1352, (2003).より）
2. 同様に2つ目の**C960**にチェックを入れ、右側の欄に「**0.319**」、「**0.392**」と入力する。
3. **Set**をクリックする。

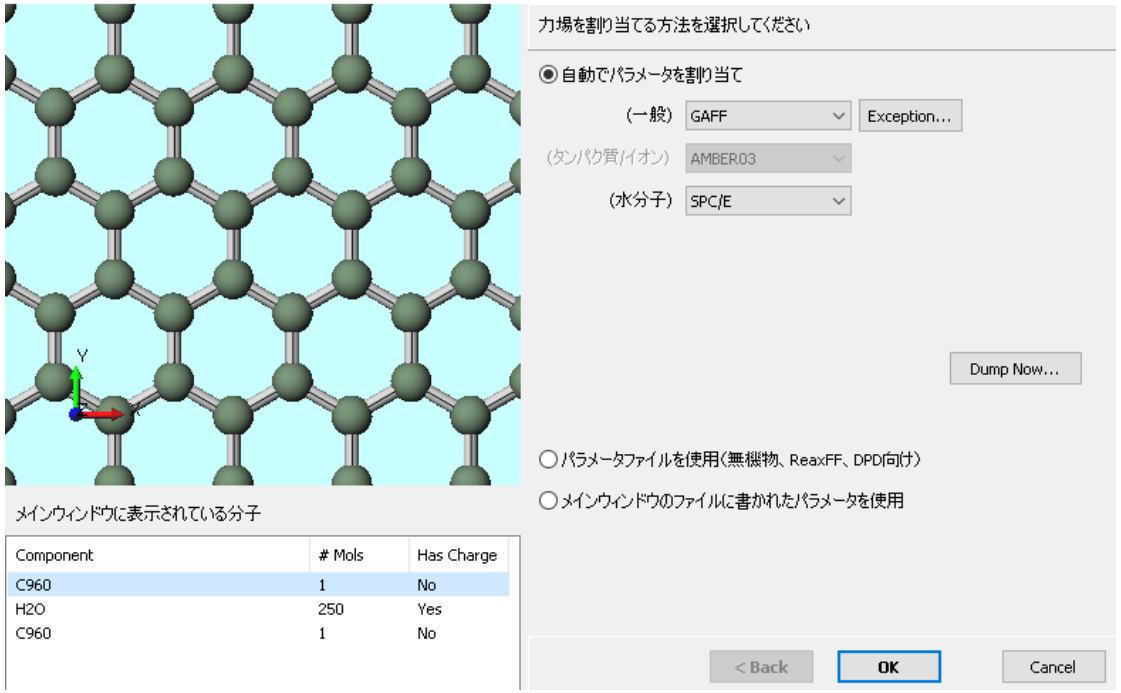


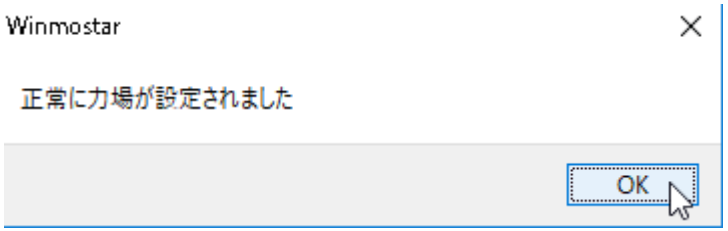


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 平衡化計算

1. **力場を割り当て**ウィンドウに戻ったら**OK**ボタンを押す。
2. 「**正常に力場が設定されました**」と表示されたら**OK**ボタンをおす。

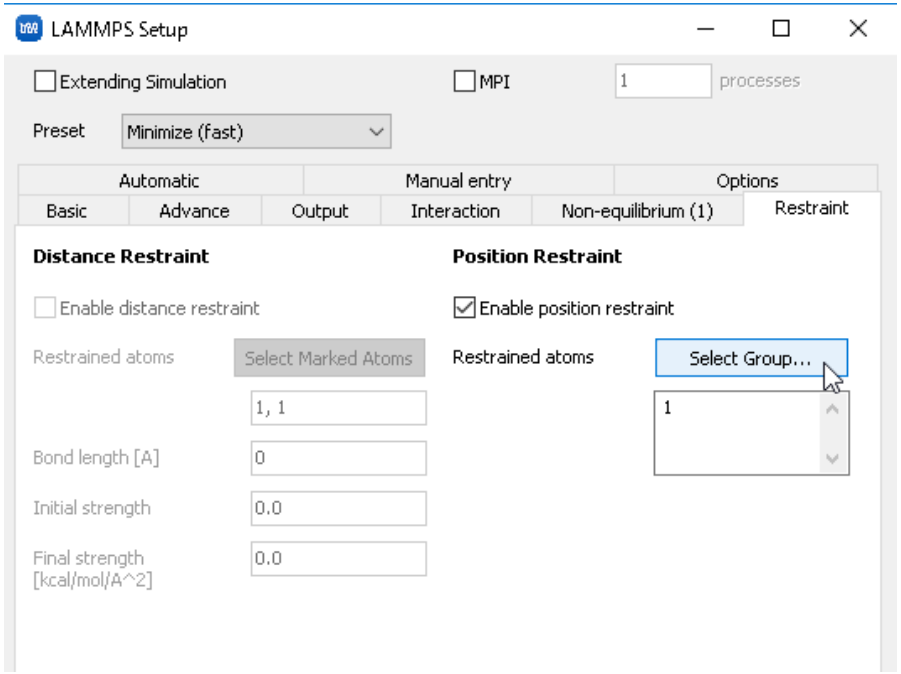


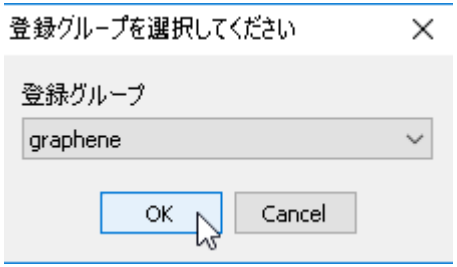


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 平衡化計算

1. **Reset**をクリックする。
2. **Preset**に**Minimize (fast)**を選択する。
3. **Restraint**タブの**Enable position restraint**にチェックを入れ、**Restrained atoms**の**Select Group**ボタンをクリックする。
4. **登録グループを選択してください**ウィンドウで、「**graphene**」を選択し**OK**を押す。

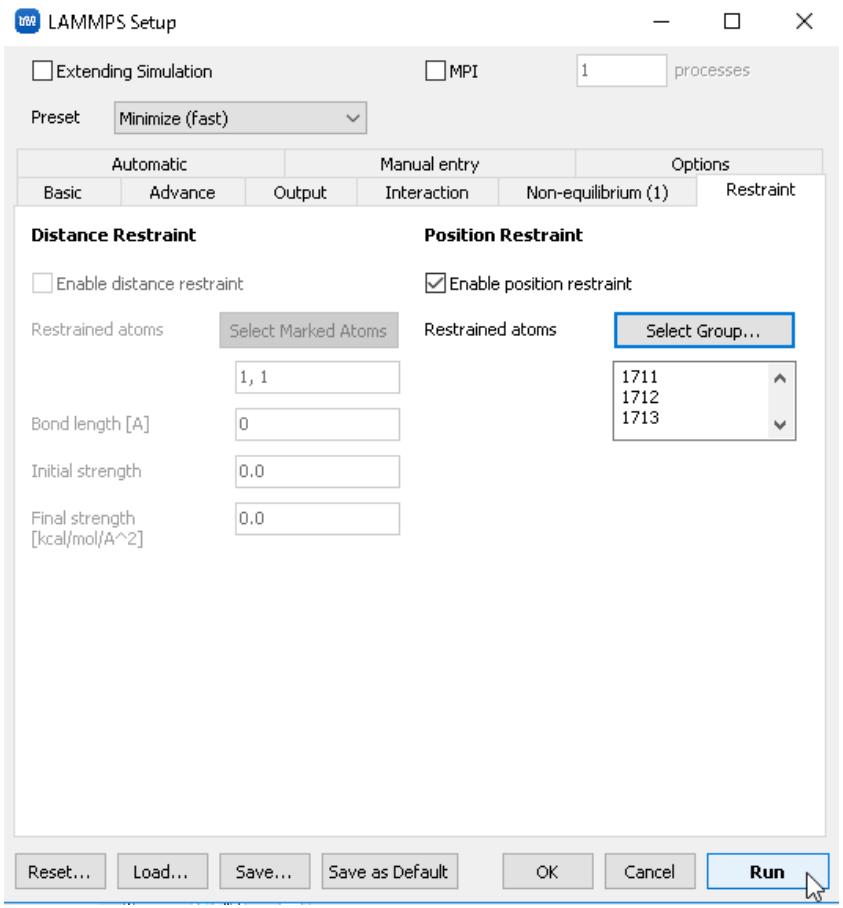




Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 平衡化計算

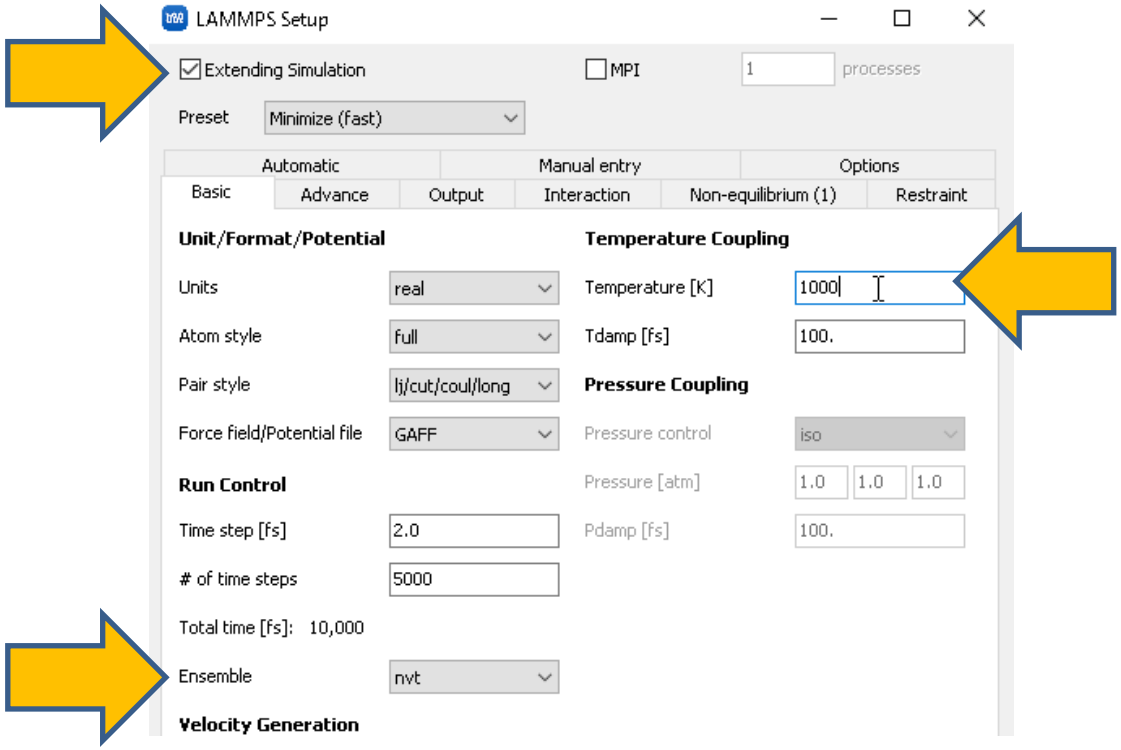
1. **LAMMPS** **Setup**ウィンドウに戻ったら、**Run**をクリックする。保存時のファイル名は「**gwg**」とする。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 平衡化計算

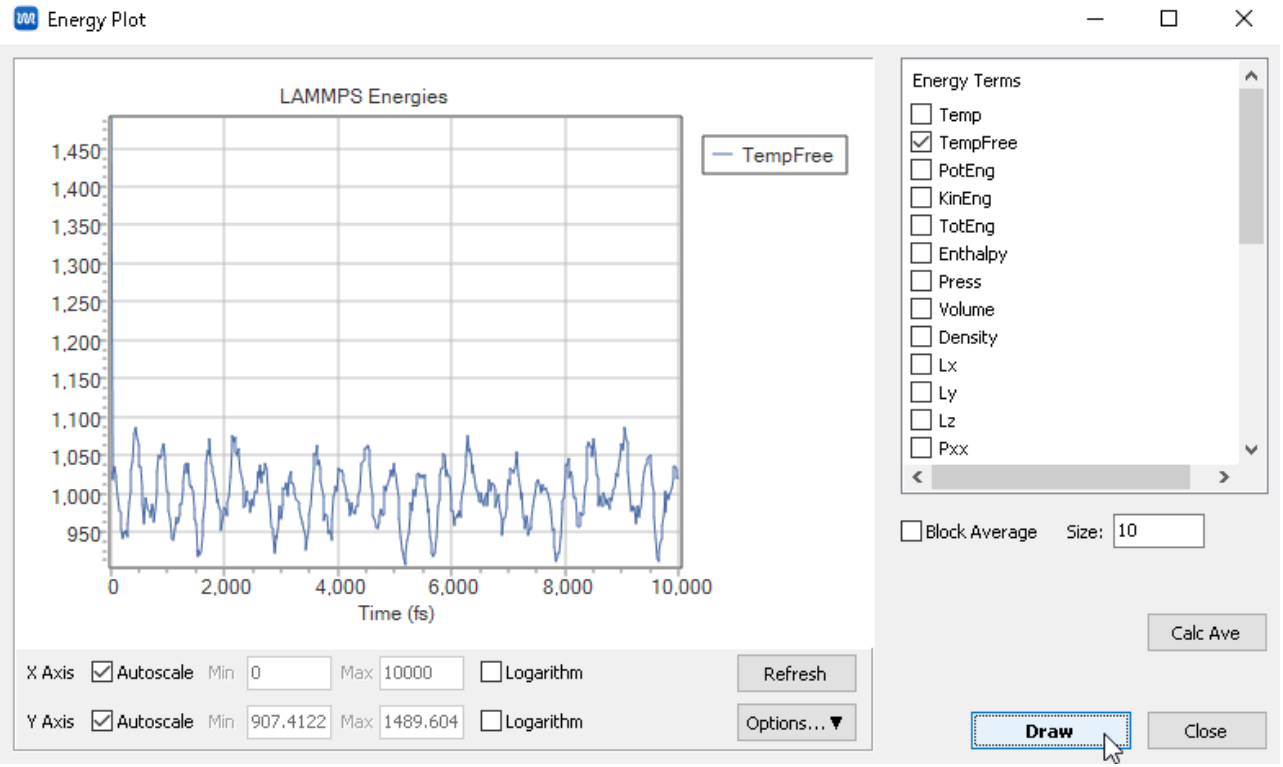
1. 計算終了後、 (**キーワード設定**)をクリックする。
2. **Extending Simulation**にチェックを入れる。
3. **Basic**タブの**Ensemble**に**nvt**を選択し、**Temperature**を**1000**とする。
4. **Run**をクリックする。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 平衡化計算

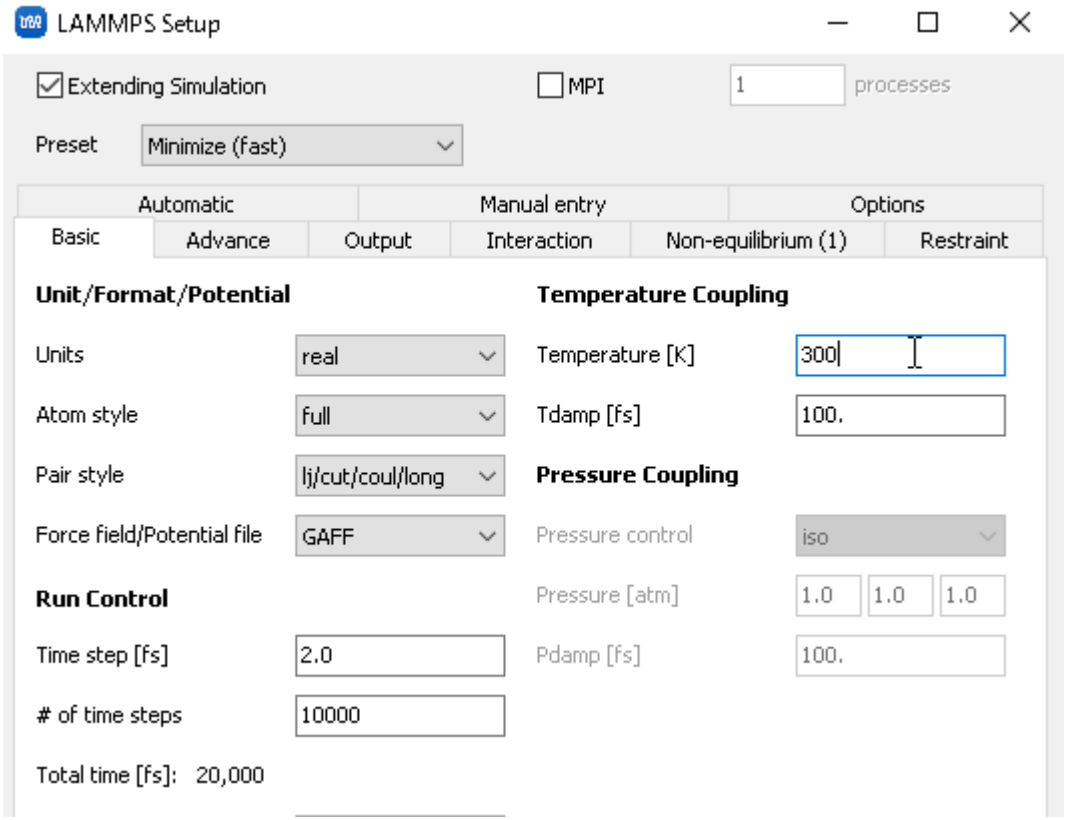
1. 計算終了後、 (**エネルギー変化**)をクリックし、デフォルトで選択されるファイルを開く。
2. **Energy** **Terms**から**TempFree**にチェックを入れて**Draw**ボタンをクリックする。TempFreeはPosition Restraintが設定されていない原子のみで計算した温度である。グラフより、それらの原子の温度が設定温度（1000 K）に制御されていることを確認する。
3. **Close**ボタン



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.本計算

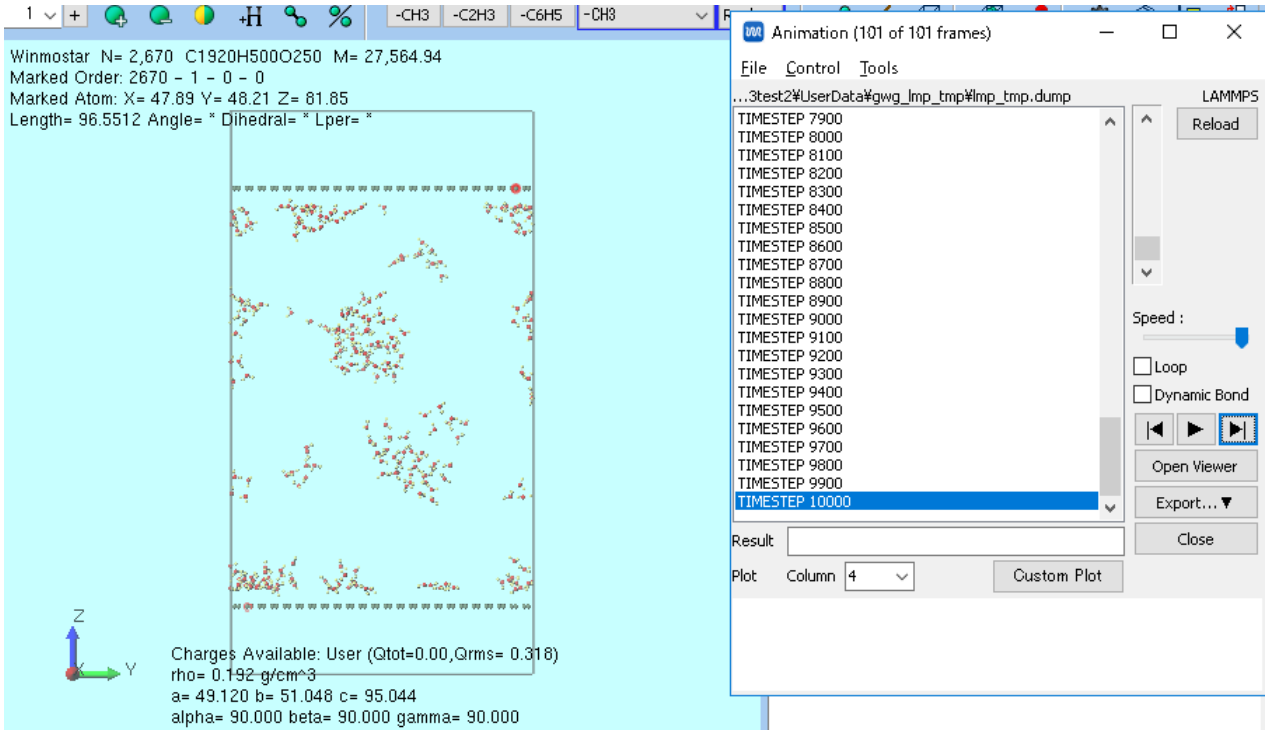
1. (**キーワード設定**)をクリックする。
2. **# of Time Steps**を**10000**とし、**Generate initial velocity**のチェックを外し、**Temperature**を**300**に変更する。
3. **Run**をクリックする。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.本計算

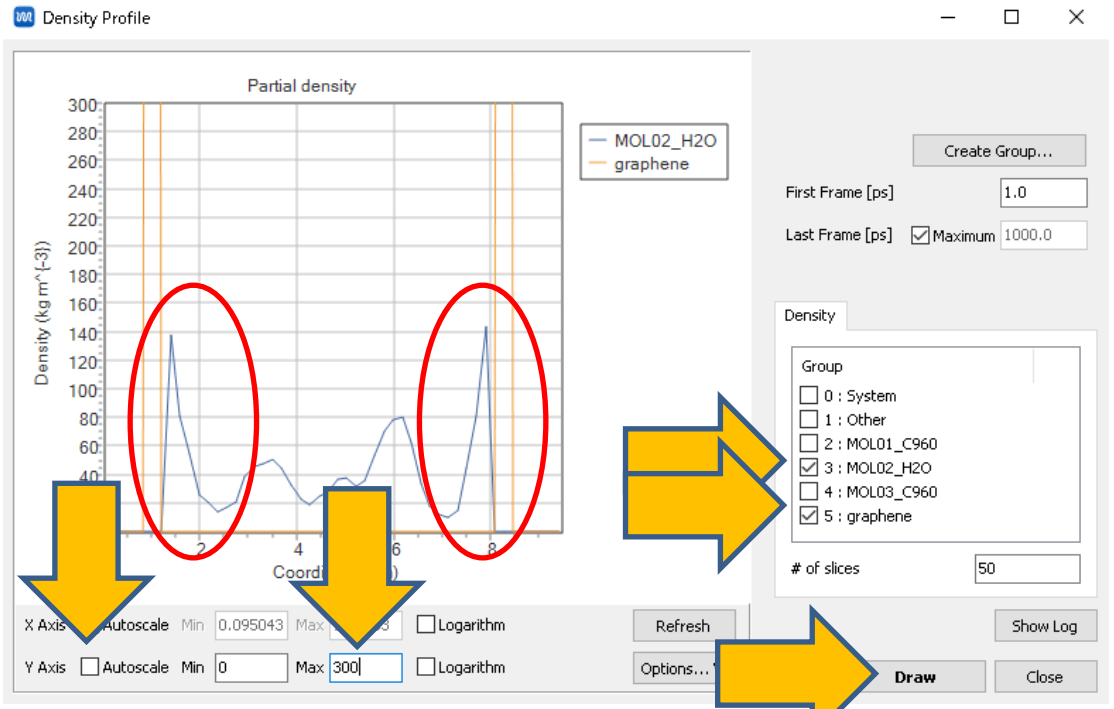
1. 計算終了後、 (**トラジェクトリ読み込み**)をクリックし、デフォルトで選択されるファイルを開く。（合計2つ）
2. (**X軸方向から表示**)と (**ウィンドウに合わせる**)をクリックする。
3. **Animation**ウィンドウの (**再生**)をクリックすると、冷却により水分子が凝集し、一部はグラフェンに吸着している様子が分かる。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.本計算

1. メインウィンドウに戻り、 (**結果解析**)|**密度分布**をクリックし、デフォルトで選択されるファイルを開く。（合計5つ）
2. **Group**で「**3: MOL02_H2O**」と「**5: graphene**」にチェックを入れ**Draw**ボタンをクリックする。
3. グラフ下部の**Y AxisのAutoscale**のチェックを外し、**Max**を「300」に変更すると、グラフェンに一部の水分子が吸着しながら凝集している様子（下図赤枠）が確認できる。



Copyright 2008-2021 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 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.