M 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

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



- 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<u>ユーザマニュアル</u>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。
 - <u>Winmostar基礎講習会</u>: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<u>よくある質問</u>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。



• 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

- 本機能を用いるためには、GAMESS、LAMMPSとCygwinのセットアップが必要です。
- <u>https://winmostar.com/jp/installation/</u>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) 以下のいずれかのリンク先の手順でWinmostar用のCygwin環境(cygwin_wmと呼びま す)を構築します。

<u>ビルド済みのcygwin wmをインストールする場合</u>(推奨) <u>cygwin wmをビルドする場合</u>(非推奨、上級者向け) <u>Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合</u>(ベータ版)

(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。

<u>GAMESS</u><u>NWChem</u><u>LAMMPS</u><u>NAMD</u><u>Quantum ESPRESSO</u><u>FDMNES</u> ※Gromacs, Amber, MODYLAS, OpenMXは前の手順でインストールするcygwin_wmに含まれます。

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-CYCLEPENTYL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、 メインウイ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O8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**08**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** </br>
- 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ウインドウで、Easy Setupボタンをクリックする。
- 5. Easy SetupウインドウでHF/6-31G*、Method: RESPと設定しOKをクリックする。
- 6. GAMESS SetupウインドウでRunをクリックする。
- 7. 「**PC_resp.inp**」として保存する。





Easy Setup	×
Program	
GAMESS	◯ Firefly
HF	✓ 6-31G* ~
Charge	✓ Multiplicity ✓
Solvent	~
Method	
Optimize	
	Raman
	RESP/ESP
⊖ cis	TS (SADPOINT)
	FORWARD
IFREEZ	Bond 🗸
Reset befo	re applying changes

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B5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F9を選択する。
- 6. 元素を変更ボタン をクリックする。

🚾 * - Winmostar (PREMIUM) V10.0.8
ファイル(F) 編集(E) 選択(L) 表示(V) 半経 ヘルプ(H)
H 1 A H 3
CH4 M= 16.04 Li 3 Be 4 0 Y= 0 Z= 0
C 6 C e= 35.5 Dihedral= * L

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

 Winmostar (PREMIUM) V10.0.8
 ファイル(F) 編集(E) 選択(L) 表示(V) 半経験QM(P) ヘルプ(H)



II-2. BF₄-アニオンの電荷計算

- 1. **簡易構造最適化ボタン** <u><</u> 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ウイン ドウで、Easy Setupボタンをクリックする。 Easy Setup × X

QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(T) チュート

▶ キーワード設定...

キーワード読み込み…

品 (1) GAMESS実行...

Winnes 100 ログを表示 (out/log)...

(2) GAMESS実行...

punchファイルから読み込み

 \sum

Easy SetupウインドウでHF/6-31G*、
 Charge: -1、Method: RESPと設定しOKをクリックする。

GAMESS

SMASH

Gaussian 🕨

NWChem

•

AM1 EF

4. GAMESS SetupウインドウでRunをクリックする。

QM(P)

4

%

5. 「**BF4_resp.inp**」として保存する。

	Easy Setup	×
	Program	
	GAMESS	○ Firefly
	HF	×/6-31G* ~
	Charge -1	Multiplicity ~
	Solvent	~
	Method	
リアル	Optimize	
		ORaman
		RESP/ESP
•	⊖ cis	
		WARD
46	IFREEZ Bond	\sim
	Reset before appl	ying changes
		Cancel

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。



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 Q をクリックする。警告が出るがはいをクリックする。
- 3. メインウイ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。表示されたウインドウの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。

🔓 🚽 • 📑 • 🞜 🖻 🔛 🧕 🗉	MD 固体(S) アドオン(A) ツール(T) チュートリアル(U) ウィンドウ(V) 2010 2010 2010 2010 2010 2010 2010 201	N M Assign C — 🗆 🗙
► 0 H M= 1.01	分子を挿入(N) ● 自動で電荷を割り当て(C) Replace	Atom Type Charge
$\begin{array}{c c c c c c c c c c c c c c c c c c c $	手動で電荷を割り当て(C) Acpypeを使用(A)	
B 5 V Dihedral= * Lper= *	ポリマー(P) マニュアル入力(M) 界面ビルダ(I) 水をイオンに置換(O)	
Na 11 Mg 12 AI 13 Si 14 P 15 S 16 GCI 17 Ar 18	Gromacs	
K 19	MODILAS	OK N Cancel

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。
- 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。

🚾 Solvate/Build (Cell			-		×
Name	# Mol	Position	mol/L	∼ Com	position	
Add Displayed Mole	ecule Add	.mol2 File.	Add W	/ater	Del	ete
Add mol2 file						×
Enter # of mole	ecules 10					
				ок 🖓	с	ancel

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

Name	# Mol	Position	mol/L	~ (Composition	
Li.mol2	10	Random	0.897	L	i	
BF4_resp.mol2	10	Random	0.897	E	3F4	
PC_resp.mol2	100	Random	8.972	(C4H6O3	
Opuon						
Set Density [g/cm^3] Set Distance from Solu	ite [nm]	2.6452	2 6452	2 645	2	
Set Density [g/cm^3] Set Distance from Solu Set Lattice Constants Angle	ite [nm] [nm] es [deg]	1.0 2.6452 90.0	2.6452	2.645	2	
Set Density [g/cm^3] Set Distance from Solu Set Lattice Constants Angle	ite [nm] [nm] es [deg]	1.0 2.6452 90.0 Sam	2.6452 90.0 e as main w	2.645 90.0	2	
Set Density [g/cm^3] Set Distance from Solu Set Lattice Constants Angle Box Type	ite [nm] [nm] es [deg]	1.0 2.6452 90.0 Sam	2.6452 90.0 e as main w	2.645 90.0	2	

13

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. ソルバー覧でLAMMPSを選択し、 [1] (キーワード設定) をクリックする。
- 2. 力場を割り当てウインドウが開いたら、 **Dreiding**を選択し、右下の**OK**ボタンを押す。黒い ターミナルウイ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。

	GAMESS 🗸 🗸	
	MOPAC	
1	CNDO/S	ľ
	GAMESS	
	Gaussian	
	NWChem	l
	Gromacs	ł
	LAMMPS	l
	Quantum ESPRESSOV	ł
	OpenMX	
	FDMNES	
		l

🚾 力場を割り当て			-		\times
力場を割り当てる方法	まを選択してください)			
●自動でパラメータを	割り当て				
(一般)	Dreiding	> V Excep	tion		
(タンパク質/イオン)	AMBER03	~			
(水分子)	SPC/E	\sim			
			Du	mp Now	
○ パラメータファイルを	使用〈無機物系、	ReaxFF、散逸	粒子動力学	法向け〉	
○ メインウィンドウのフ	ァイルに書かれたノ	ラメータを使用			
	< Back	ОК	N	Cano	el

V. 電解液のMD計算(エネルギー極小化)

- 1. LAMMPS Setupウインドウ左下のResetボタンを押し、警告ダイアログではいボタンをクリックする。
- 2. ウインドウ右下の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。

Time step [fs]	2.0	Pdamp [fs]	100.						
# of time steps	5000								
Total time [fs]: N/A									
Ensemble	minimize \checkmark								
Velocity Generation									
Generate initial velocit	ty				- [OK	- and	0	Dun .
Random seed	12345				l	UK	ancei	RUN	
Reset 📐 Load	Save Save as D	OF OK	Cancel RUM	Run					

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 s	etup					—		\times	
Extending Simulation				MPI		1	pro	cesses	
Preset NPT (fast)									
Automatic				ual entry			Opti	ions	
Basic	Advanced	Output	Int	teraction	Non-e	quilibriu	um (1)	Restra	int
Unit/Format/Potential				Tempera	ture Cou	ıpling			
Units	Units real		\sim	 Temperature [K] 		300.0			
Atom style		full	\sim	✓ Tdamp [fs]		100.			
Pair style		lj/cut/coul/long	\sim	Pressure	Coupline	g			
Force field/Po	tential file	Dreiding	\sim	Pressure o	ontrol		iso		~
Run Control	I			Pressure [atm]		1.0 1	.0 1.0	
Time step [fs]		2.0		Pdamp [fs]]		100.		
# of time step	S	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。



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 グでデフェ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。





• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>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