

 winmostar チュートリアル

LAMMPS

散逸粒子動力学 (DPD)

V10.0.0

2020年3月2日

株式会社クロスアビリティ

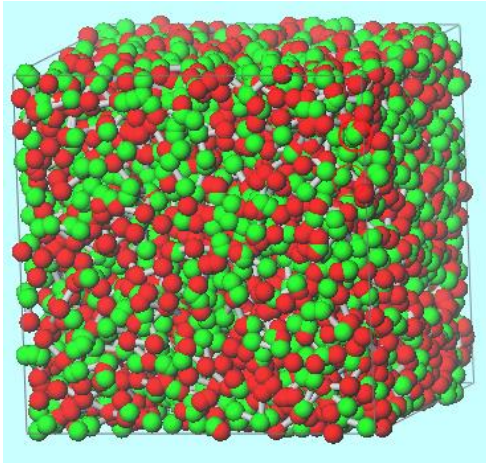
本書について

- 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。

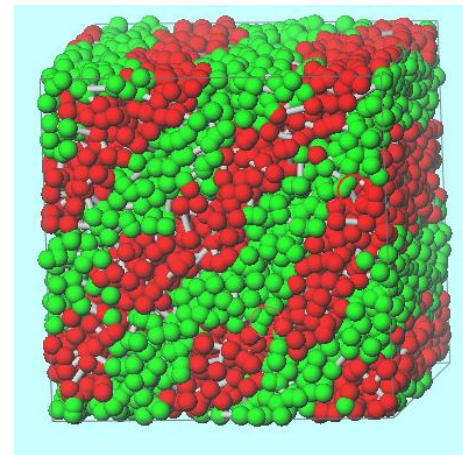
概要

- ジブロックコポリマーの相分離構造を、DPD法により予測する手順を示します。構造の定量的な評価方法の一つとしてここでは散乱関数を算出します。

参考文献: R. D. Groot and T. J. Madden, J. Chem. Phys, 108, 20, (1998), 8713.



初期構造



得られる構造

- ※ 全原子MDの構造にマッピングする方法を本資料最後の示しています。
- ※ DPDパラメータの算出方法はGromacsチュートリアルをご参照ください。

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。

(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。

[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）](#)

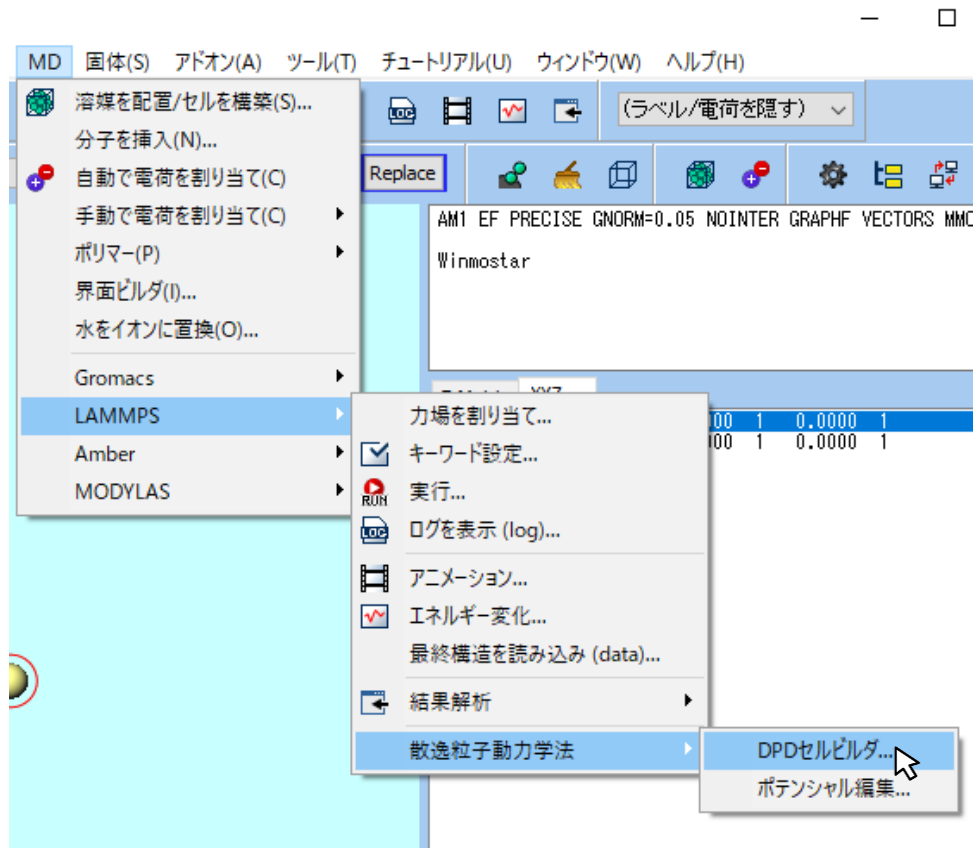
(7) WinmostarをインストールしたWindows PC（ローカルマシン）上で使用するソルバを、以下のリンク先の手順でインストールします。

[GAMESS](#) [NWChem](#) [LAMMPS](#) [NAMD](#) [Quantum ESPRESSO](#) [FDMNES](#)

※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。

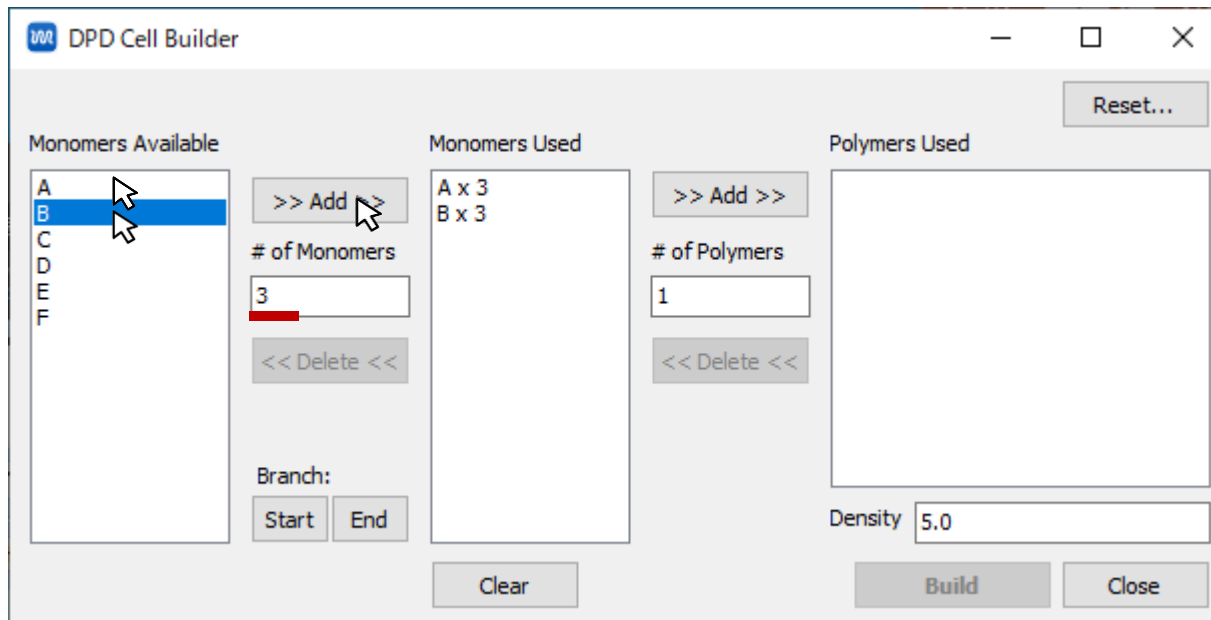
I. 初期座標の作成

MD | LAMMPS | 散逸粒子動力学法 | DPDセルビルダをクリックする。



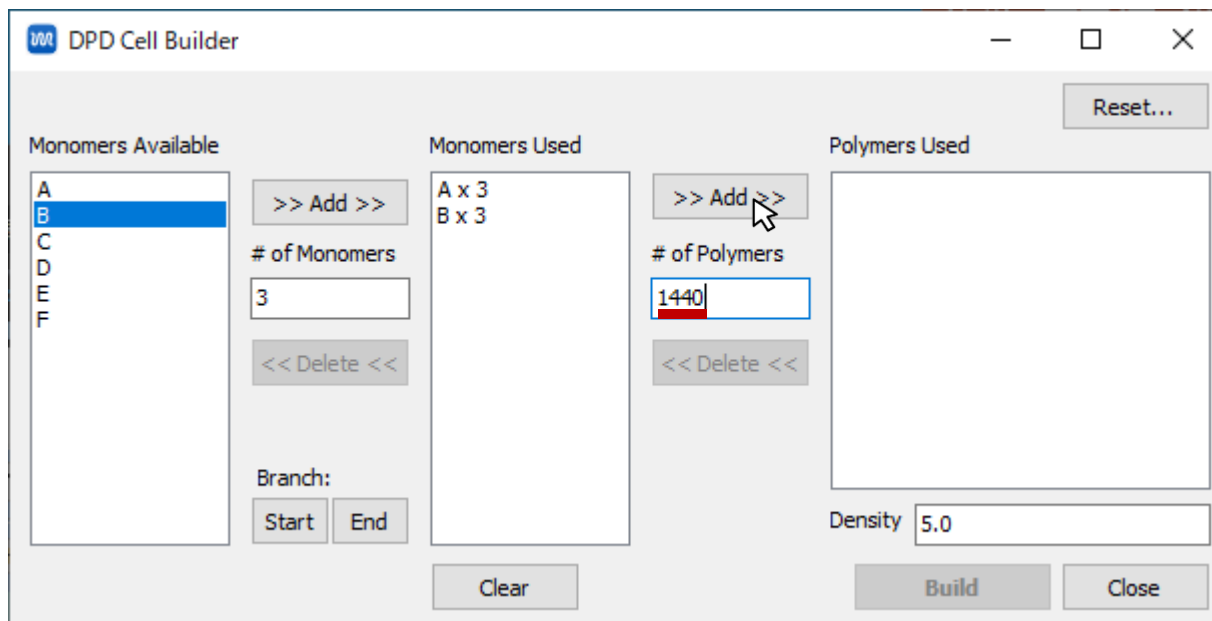
I. 初期座標の作成

1. **Monomers Available**の**A**を選択し、**# of Monomers**に**3**を入力して**Add**をクリックする。
2. 同様に**B**を選択し、**# of Monomers**に**3**を入力して**Add**をクリックする。



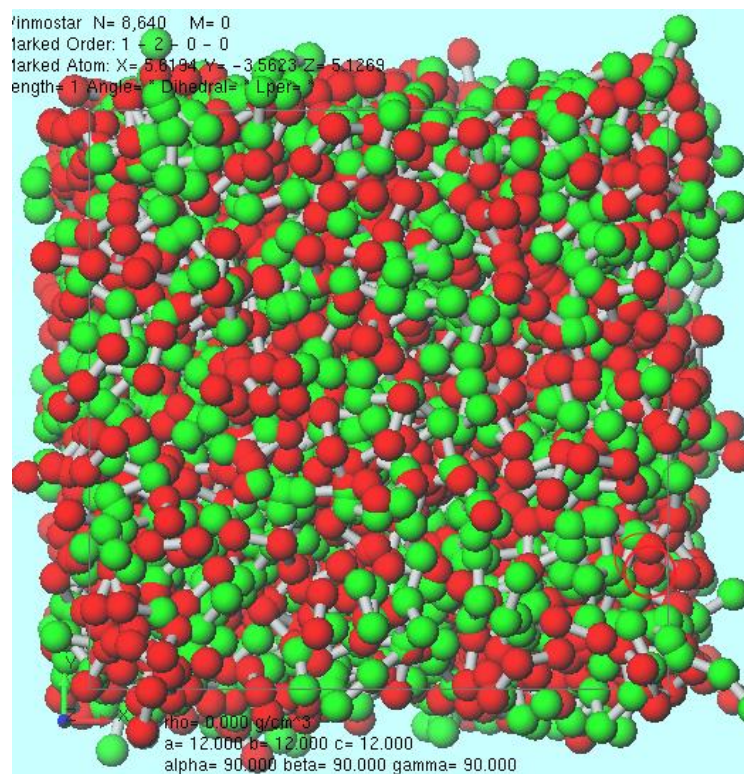
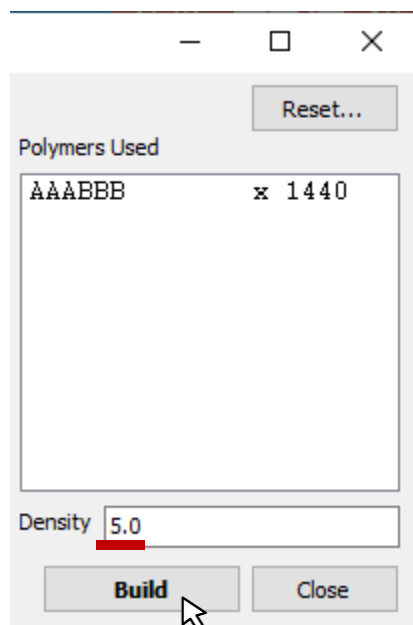
I. 初期座標の作成

of Polymersに1440を入力してAddをクリックする。



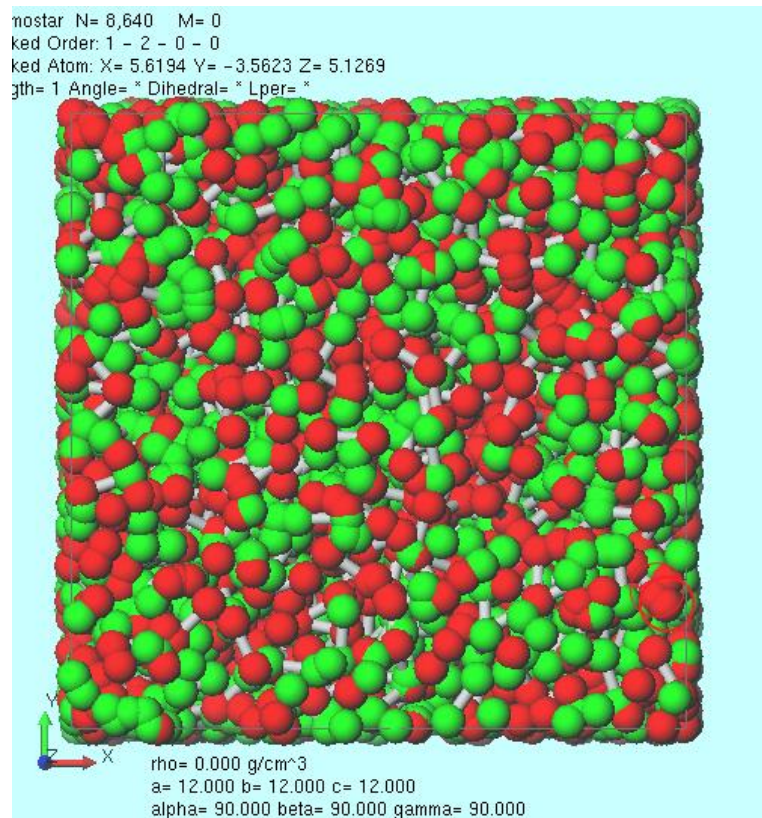
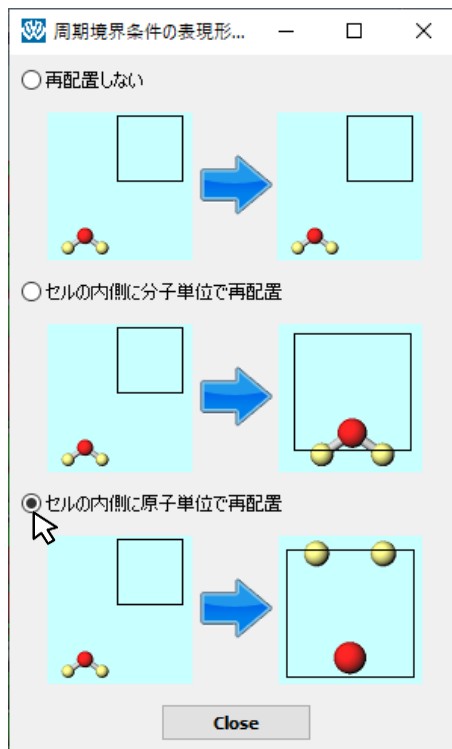
I. 初期座標の作成

Densityに5 (単位は無次元)を入力してBuildをクリックする。



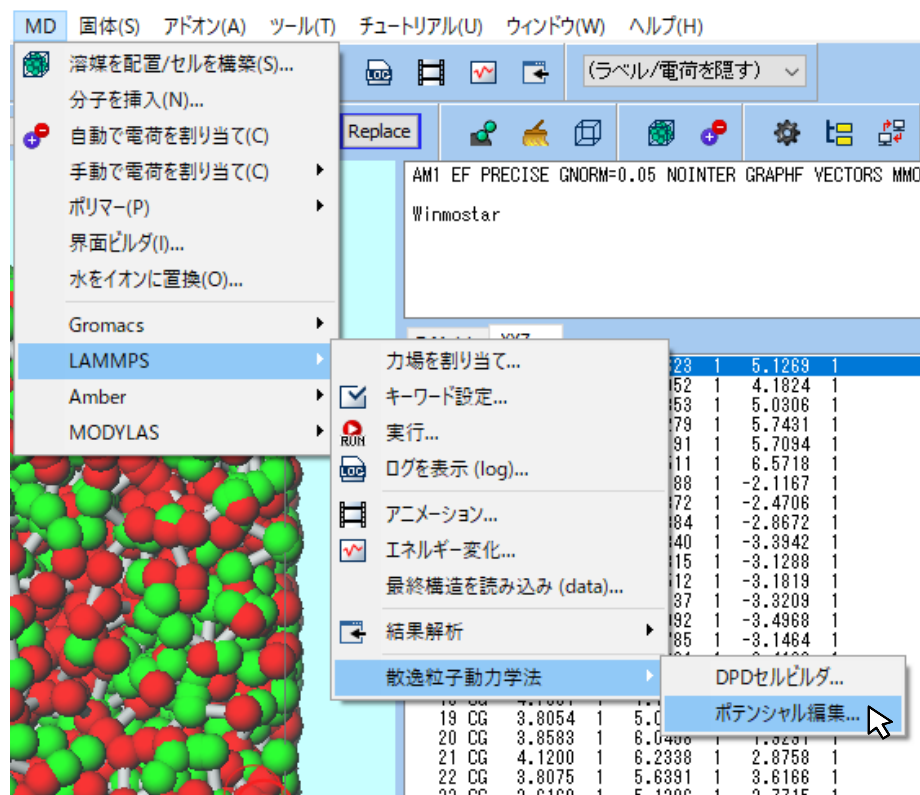
I. 初期座標の作成

表示 | 周期境界条件の表現形式 | 原子単位を選択すると、粒子A, Bの分布が見やすくなる。



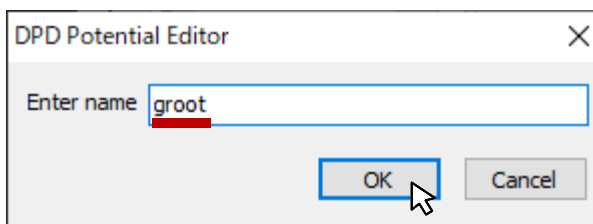
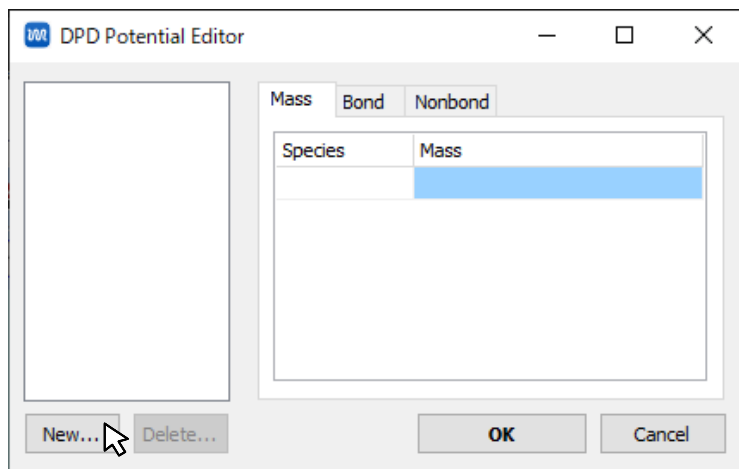
II. ポテンシャルの設定

MD | LAMMPS | 散逸粒子動力学 | ポテンシャル編集をクリックする。



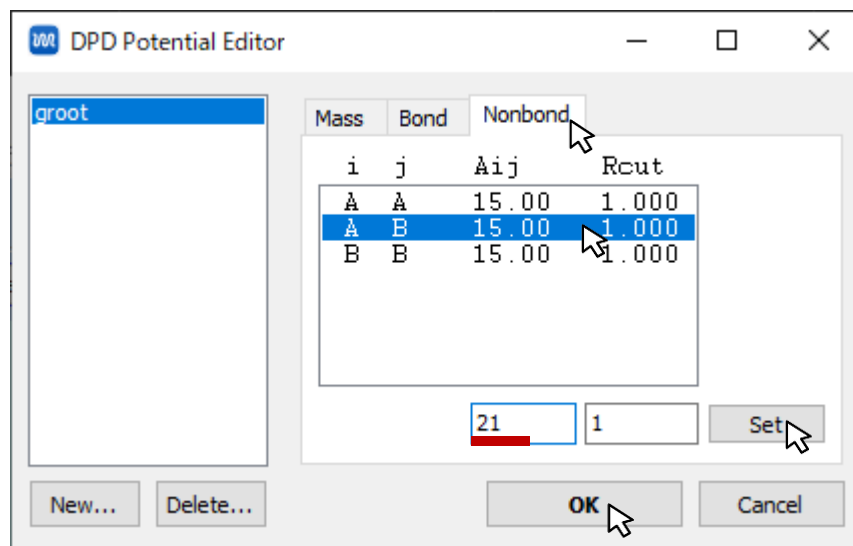
II. ポテンシャルの設定

1. **New**をクリックし、ポテンシャルファイルを新たに作成する。
2. **Enter name**で**groot**と入力し、**OK**をクリックする。



II. ポテンシャルの設定

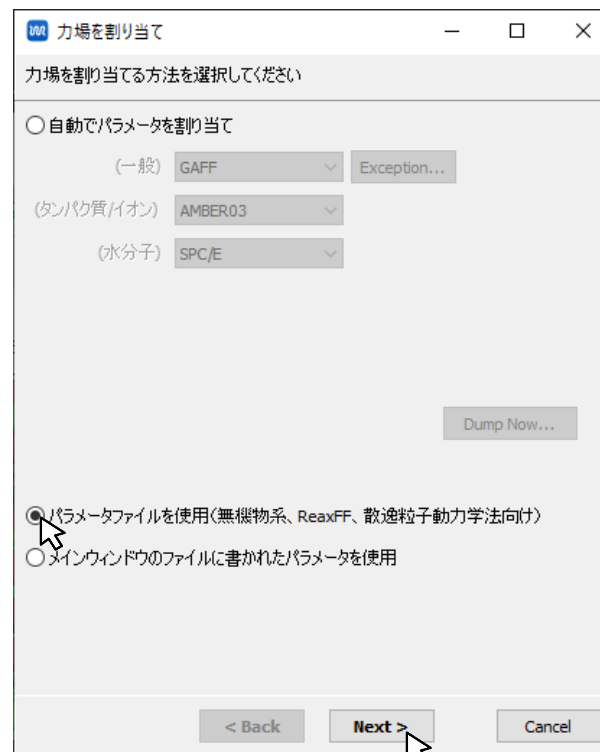
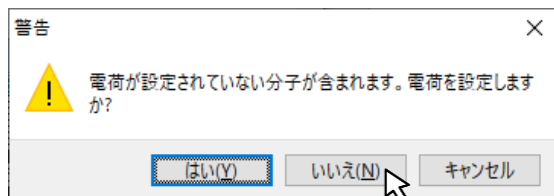
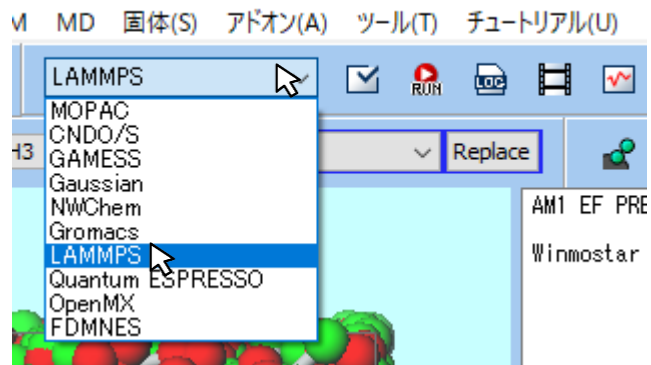
1. **Nonbond**タブを選び、リストから「**A B 15.00 1.00**」と表示された行をクリックする。
2. その下の左側のテキストボックスの値を**15**から**21**に変更し、**Set**をクリックする。
(**Aij**、**Rcut**ともに単位は無次元)
3. **OK**をクリックし、**DPD Potential Editor**を終了する



任意のモノマーについて**Aij**を決める方法は何通りかあるが、
例えば「Winmostar™ Gromacsチュートリアル 溶解度・ χ ・DPDパラメータの算出の方法がある。

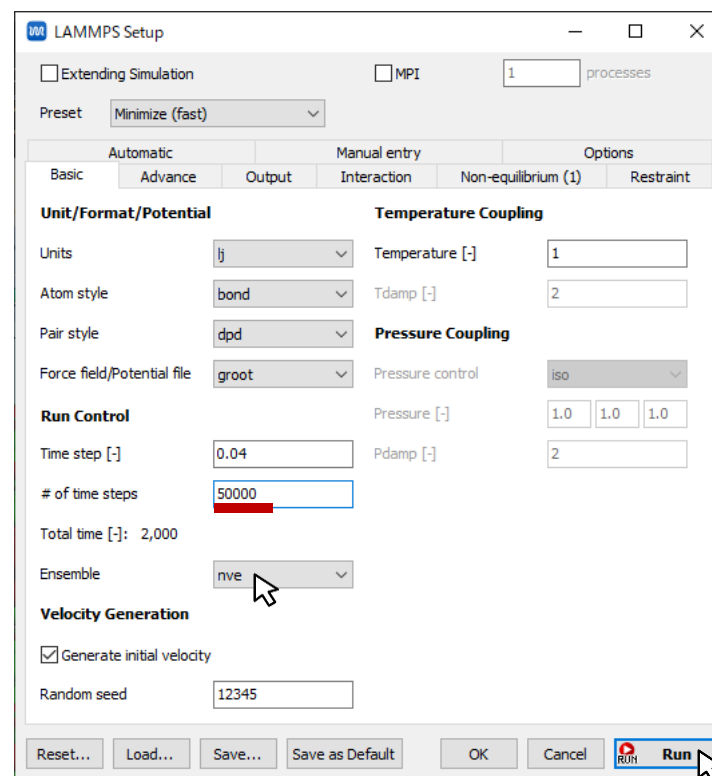
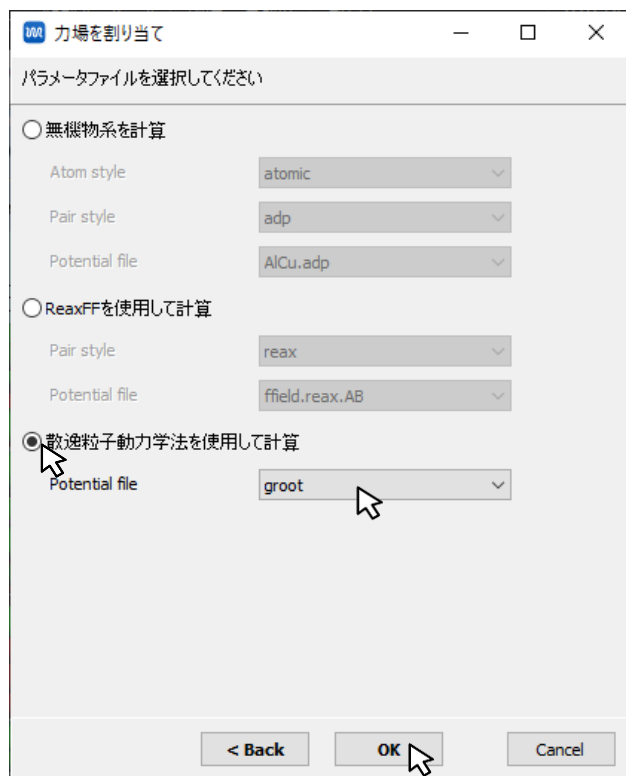
III. LAMMPSの設定

1. ソルバー一覧から**LAMMPS**を選択し、 (キーワード設定)をクリックする。
2. 警告が出るが**いいえ**を選択する。
3. パラメータファイルを使用を選択する。





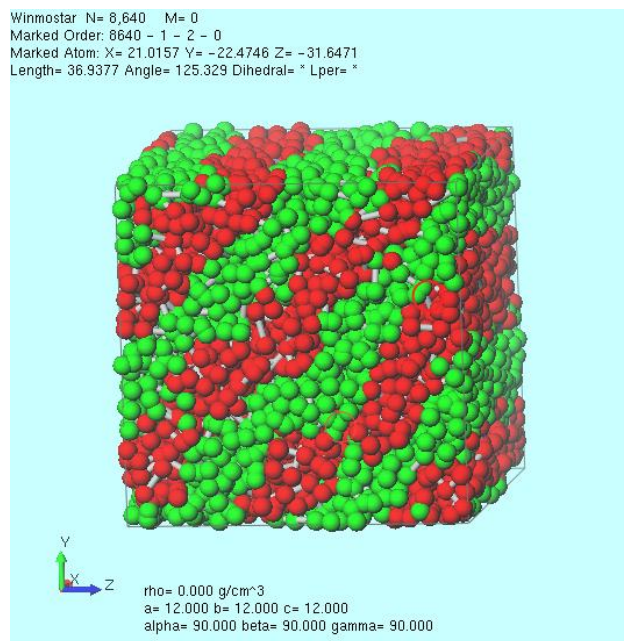
III. LAMMPSの設定

1. 散逸分子動力学法を使用して計算を選択し、Potential fileをgrootにする。
2. Ensembleをnveに変更し、# of Time Stepsを50000に変更する。
3. Runをクリックする。ファイル名は「dpd」とし、保存する。



IV. 結果の表示

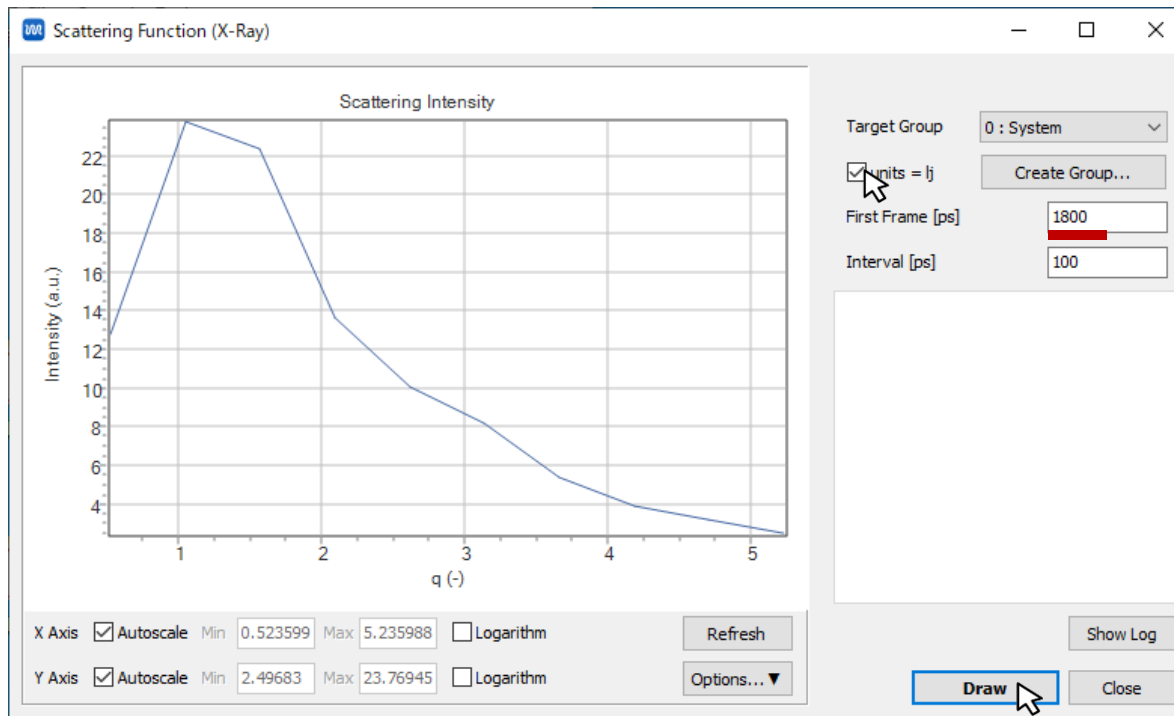
1.  (トラジェクトリ読み込み)をクリックし、デフォルトで選択されたファイルを開く。
2.  (再生)をクリックする。



ミクロ相分離を起こし、ラメラ相が表れていることが分かる。

IV. 結果の表示

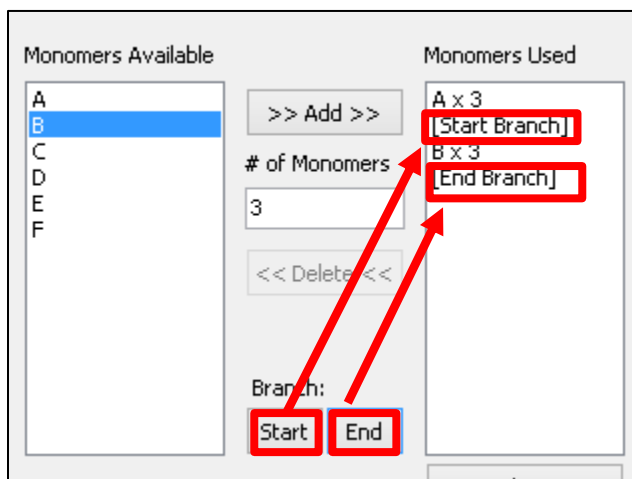
1.  (結果解析) | 散乱関数をクリックし、デフォルトで選択されたファイルを開く。
2. **units = lj**にチェックを入れ、**First Frame**に**1800**と入力する。
3. **Draw**をクリックすると散乱関数が表示される。



ピークが波数 $q=1 \sim 2$ 、すなわち、長さ $l=6.42 \sim 3.14$ 程度 ($l = 2\pi/q$) のところに現れている。これは実際に出現したラメラ構造の繰り返し単位に一致する。

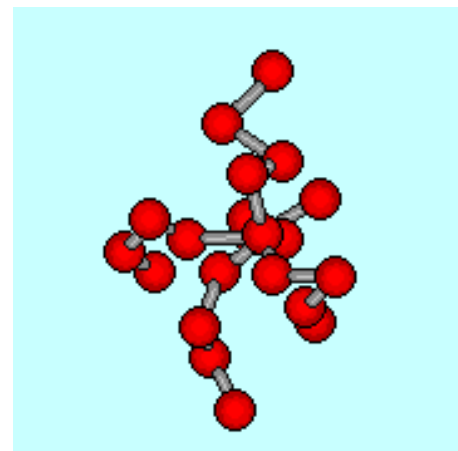
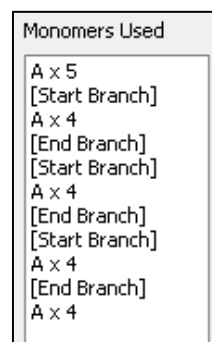
補足1: 分岐の作成

StartおよびEndにより分子に分岐 (Branch) を導入できる。

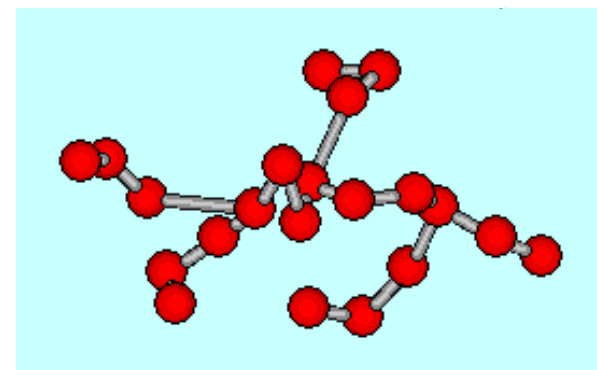
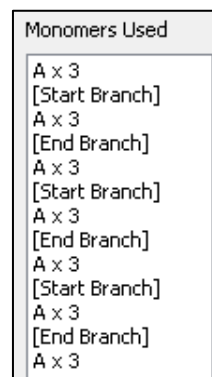


Start : 直前の粒子から分岐を発生
End : Startで開始した分岐を終了

例) 星形ポリマー



楕円形ポリマー



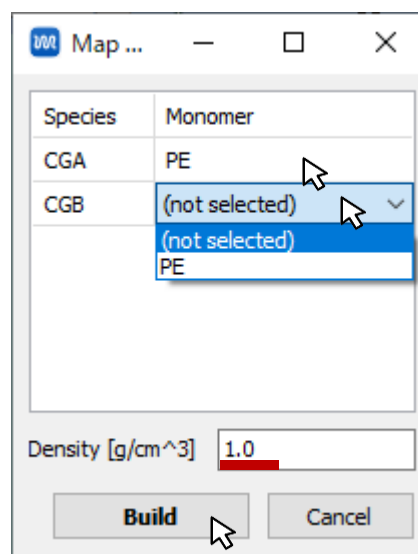
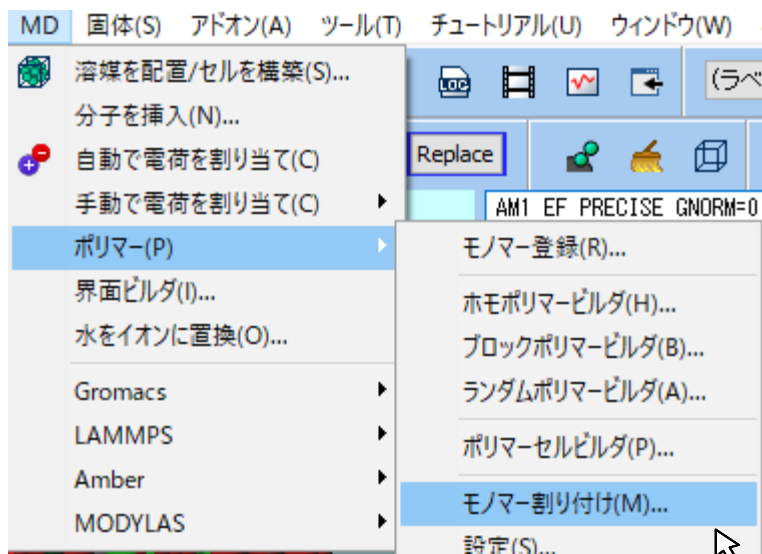
補足2: 古典MDの座標への変換

DPDで取得した粒子配置から、古典（全原子）MDの座標を取得したい場合は、**MD | ポリマー | モノマー割り付け**を選ぶ。

Monomer欄において、各粒子に対してどのモノマーを割り付けるか指定し、**Density**を指定した後、**Build**する。

モノマーは、**MD | ポリマー | モノマー登録**にて登録されている必要がある。

（詳細は「Winmostar™ LAMMPSチュートリアル ガラス転移温度（ポリマー）」を参照）
ただし、粒子数が多いほど変換に長い処理時間が必要となる。



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、基礎編チュートリアルについては[Winmostar基礎講習会](#)へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては[個別講習会](#)のご依頼をご検討ください。
- 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