

 winmostar チュートリアル

OpenMX

分子動力学編

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

1. メタン分子の分子動力学計算をごく短時間実行します。最初に300 Kで温度制御した状態で計算し、エネルギー、温度、アニメーションの可視化を行います。



注意点：

- バンド数、擬ポテンシャルの種類、カットオフエネルギーは計算結果に大きな影響を与えます。本チュートリアルではすぐに結果を取得できるように、精度を落とした設定を用います。
- 系のサイズも計算結果に影響を与えます。
- 平衡化に十分な時間をかけ、本計算も長時間実行することで再現性の高いデータを取得することができます。

動作環境設定

- 本機能を用いるためには、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Cygwinの設定手順に従いセットアップします。

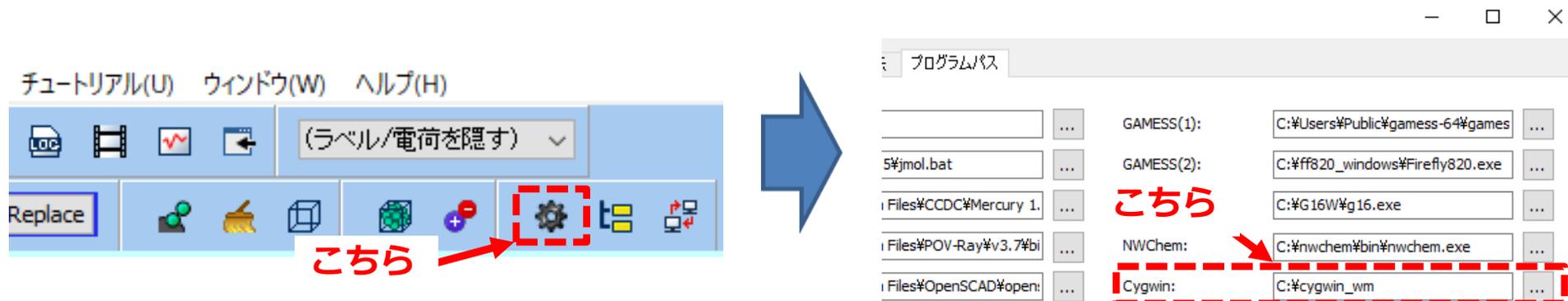
(6) 以下のいずれかのリンク先の手順でWinmostar用のCygwin環境 (cygwin_wmと呼びます) を構築します。

[ビルド済みのcygwin_wmをインストールする場合 \(推奨\)](#) ← **こちら**

[cygwin_wmをビルドする場合 \(非推奨、上級者向け\)](#)

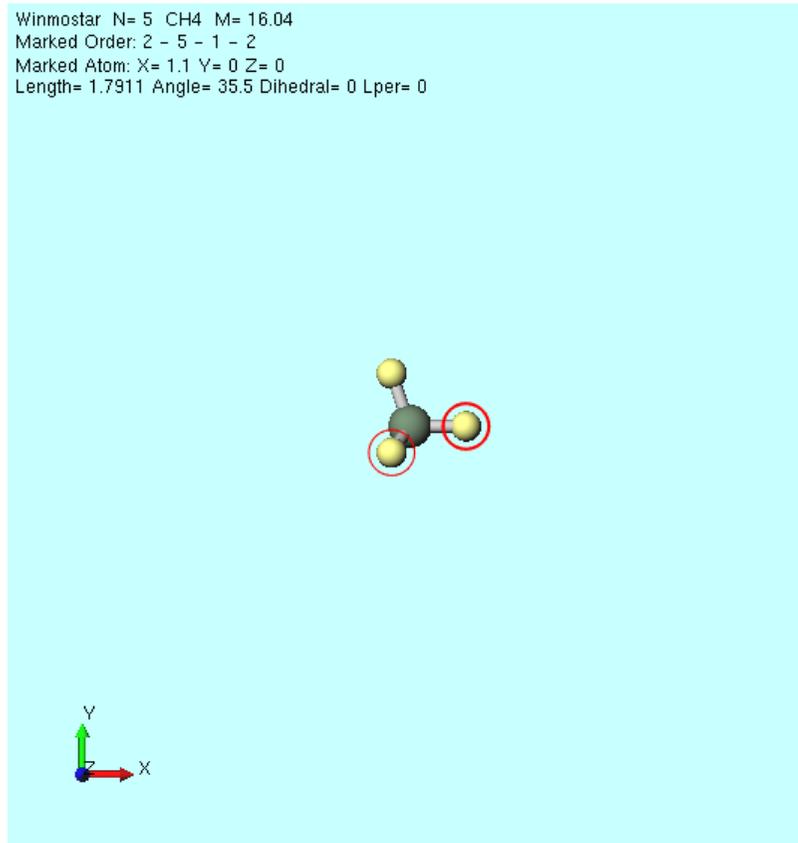
[Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合 \(ベータ版\)](#)

- デフォルトではC:¥直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」>「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



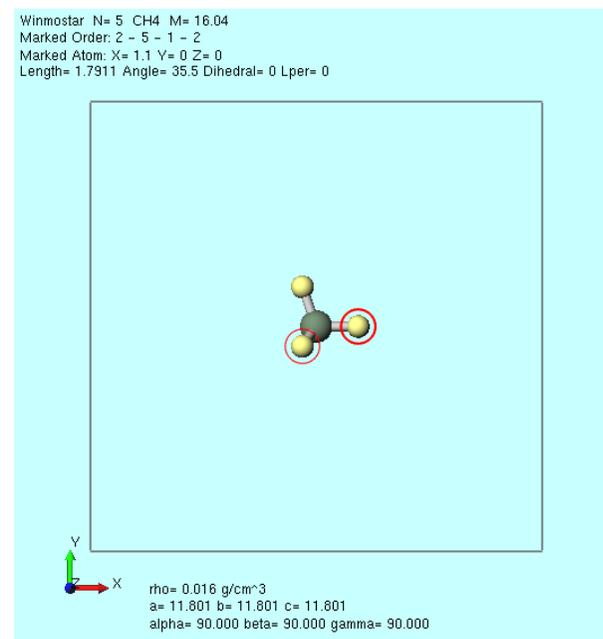
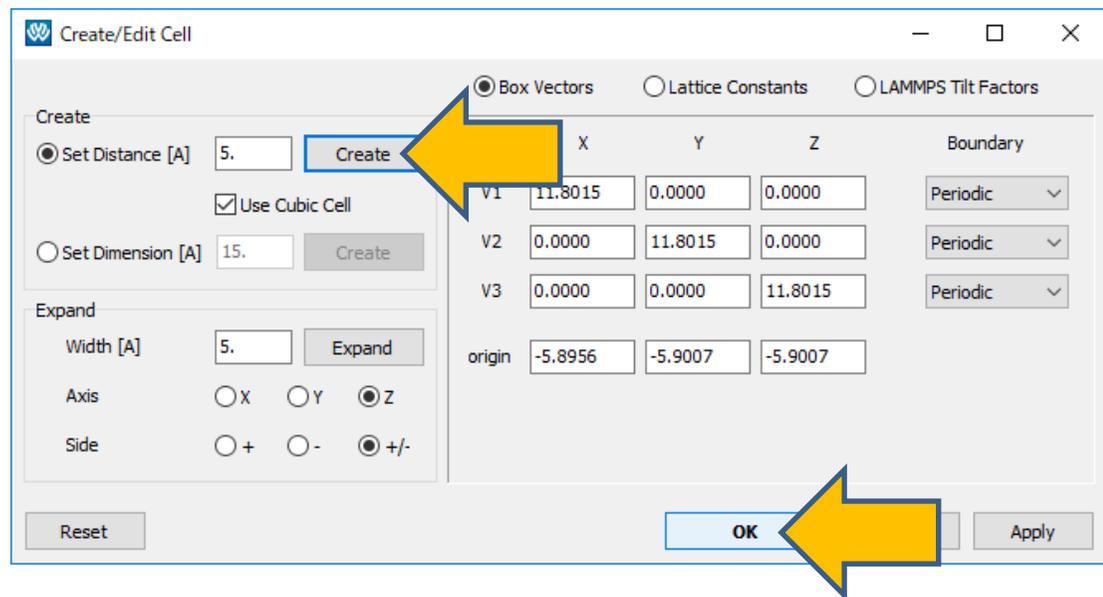
I. モデルの作成

1. **-CH3** (置換するフラグメントにCH3を選択ボタン) をクリックした後 **Replace** (フラグメントで置換ボタン) をクリックし、CH4分子をモデリングする。



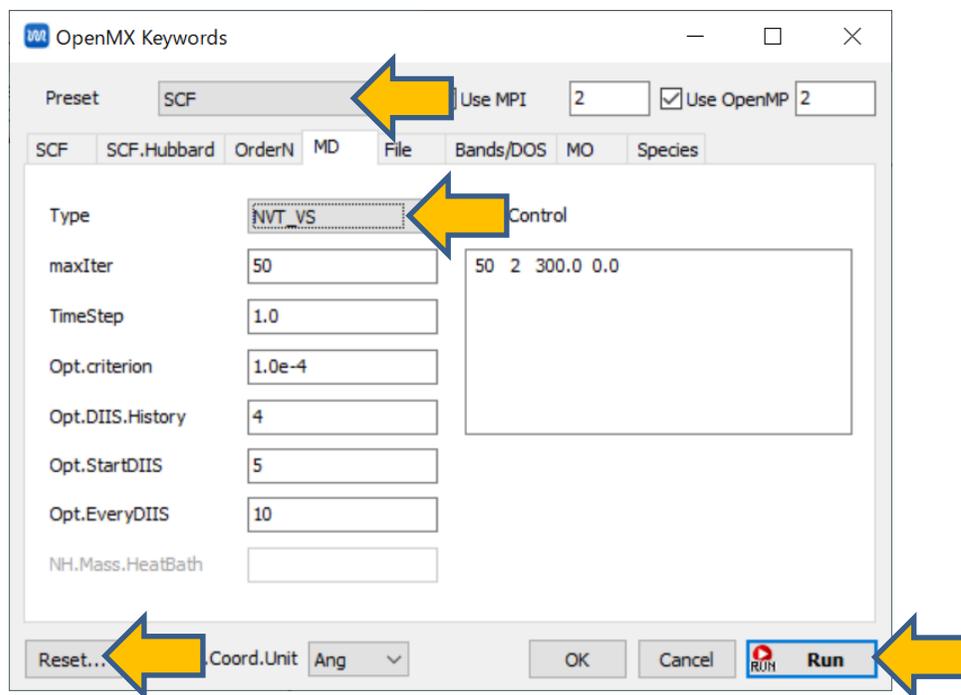
I. モデルの作成

1.  (セルを作成/編集)をクリックする。
2. **Create**をクリックし、**OK**をクリックすると、セルが作成される。



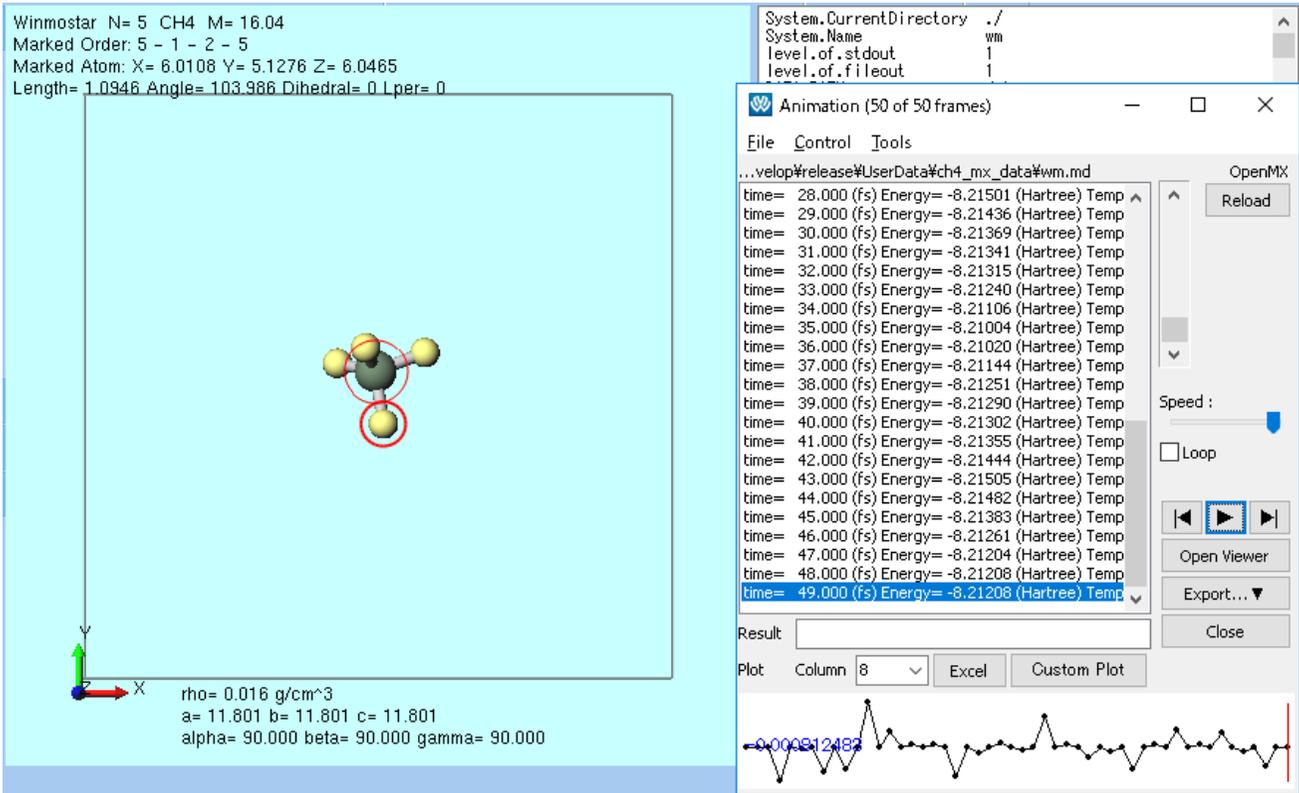
II. 温度制御付きの分子動力学計算

1. ソルバー一覧から**OpenMX**を選択する。
2. **(キーワード設定)**をクリックする。
3. **Reset**をクリックする。
4. **MD**タブにてTypeから**NVT_VS**を選択する。
5. **Run**ボタンをクリックし、ファイル名を**ch4.mxin**として保存すると計算が始まる。



II. 温度制御付きの分子動力学計算

1. 計算終了後、 (アニメーション) をクリックし、デフォルトで選ばれるファイルをクリックする。
2. Animationウィンドウの  (再生ボタン) をクリックすると、アニメーションがメインウィンドウに表示される。



The screenshot displays the Winmostar interface. The main window shows a 3D ball-and-stick model of a molecule (CH4) in a simulation box. The simulation parameters are as follows:

- Winmostar N= 5 CH4 M= 16.04
- Marked Order: 5 - 1 - 2 - 5
- Marked Atom: X= 6.0108 Y= 5.1276 Z= 6.0465
- Length= 1.0946 Angle= 103.986 Dihedral= 0 Lper= 0
- rho= 0.016 g/cm³
- a= 11.801 b= 11.801 c= 11.801
- alpha= 90.000 beta= 90.000 gamma= 90.000

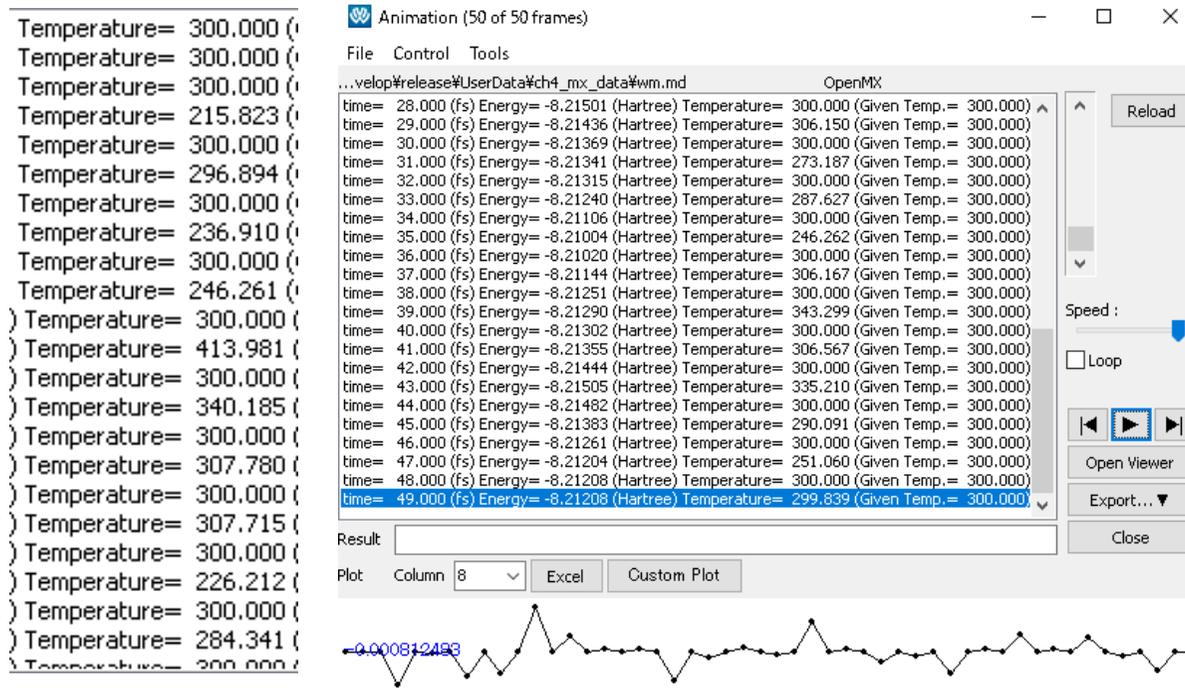
The Animation window (50 of 50 frames) is open, showing a list of simulation data points:

time=	(fs)	Energy=	(Hartree)	Temp
28.000	(fs)	-8.21501	(Hartree)	Temp
29.000	(fs)	-8.21436	(Hartree)	Temp
30.000	(fs)	-8.21369	(Hartree)	Temp
31.000	(fs)	-8.21341	(Hartree)	Temp
32.000	(fs)	-8.21315	(Hartree)	Temp
33.000	(fs)	-8.21240	(Hartree)	Temp
34.000	(fs)	-8.21106	(Hartree)	Temp
35.000	(fs)	-8.21004	(Hartree)	Temp
36.000	(fs)	-8.21020	(Hartree)	Temp
37.000	(fs)	-8.21144	(Hartree)	Temp
38.000	(fs)	-8.21251	(Hartree)	Temp
39.000	(fs)	-8.21290	(Hartree)	Temp
40.000	(fs)	-8.21302	(Hartree)	Temp
41.000	(fs)	-8.21355	(Hartree)	Temp
42.000	(fs)	-8.21444	(Hartree)	Temp
43.000	(fs)	-8.21505	(Hartree)	Temp
44.000	(fs)	-8.21482	(Hartree)	Temp
45.000	(fs)	-8.21383	(Hartree)	Temp
46.000	(fs)	-8.21261	(Hartree)	Temp
47.000	(fs)	-8.21204	(Hartree)	Temp
48.000	(fs)	-8.21208	(Hartree)	Temp
49.000	(fs)	-8.21208	(Hartree)	Temp

The animation control window includes a 'Reload' button, a 'Speed' slider, a 'Loop' checkbox, and playback controls (Previous, Play, Next). The 'Result' field is empty, and the 'Plot' section shows a graph of energy over time with a 'Column' dropdown set to '8' and buttons for 'Excel' and 'Custom Plot'.

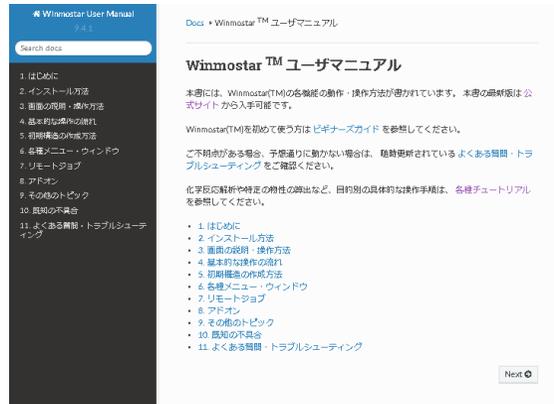
II. 温度制御つきの分子動力学計算

1. 値のリストを見やすくするため、**Animation**ウィンドウを横に広げる。
2. リストの8列目には**Temperature**（温度）が表示され、**300 K**前後で推移していることを確認する。
3. **Animation**ウィンドウ右下のプルダウンから**8**を選択すると、**Animation**ウィンドウ下部に温度の時間変化が表示される。



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