

Winmostar - LAMMPS

Tutorial 2

アルカン分子系

V5.014

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2015/7/15

Contents

- I. LAMMPSの入手と設定
- II. 1分子(C_8H_{18})のモデリングとMOPAC計算
- III. 25分子系の作成
- IV. エネルギー最小化計算
- V. nvt(温度一定)計算
- VI. npt(温度／圧力一定)計算

I. LAMMPSの入手と設定

a. LAMMPSの入手

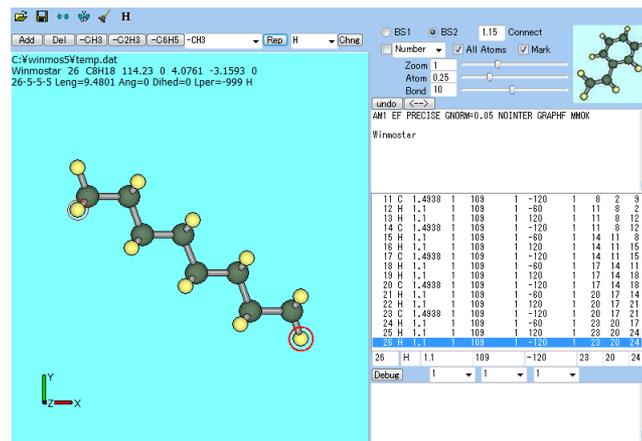
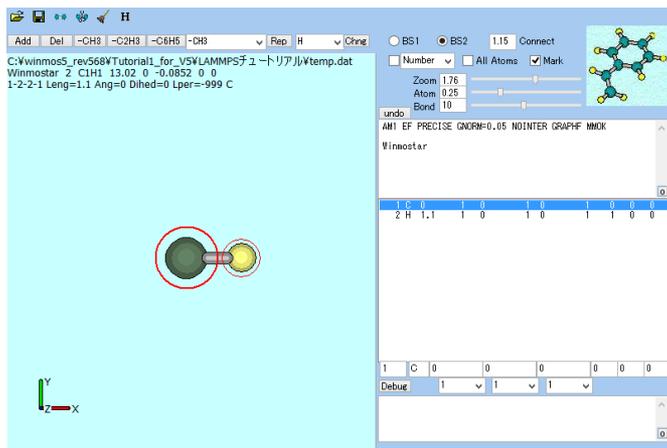
- ① サイトにアクセスする。<http://rpm.lammps.org/windows.html>
- ② OSに応じて[Latest version for 64-bit Windows] もしくは [Latest version for 32-bit Windows] をクリックしexeファイルを保存する。
- ③ 保存したexeファイルをダブルクリックし指示に従う。

b. MPICHの入手とインストール(LAMMPSの並列実行を行う場合のみ)

- ① サイトにアクセスする。<http://rpm.lammps.org/windows.html>
- ② OSに応じて[[mpich2-1.4.1p1-win-ia32.msi](#)]もしくは[[mpich2-1.4.1p1-win-x86-64.msi](#)]をクリックしmsiファイルをダウンロードする(拡張子の変更された場合は .msiに戻す)。
※ LAMMPSが32-bitであれば、MPICHも32-bitを選択する(64-bitの場合は64-bitを選択する)。
- ③ 保存したmsiファイルをダブルクリックし指示に従う。
- ④ スタートメニューなどから**コマンド プロンプトを管理者権限**で立ち上げる。
MPICHをインストールしたdirectoryに移動する。
(32 bitの場合)
c:¥> cd "c:¥Program Files (x86)¥MPICH¥bin"
(64 bitの場合)
c:¥> cd "c:¥Program Files¥MPICH¥bin"
- ⑤ MPICHのセットアップコマンド(smpd.exe)を実行する。

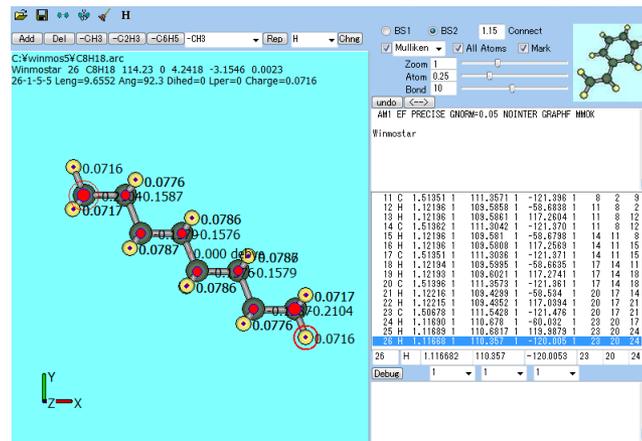
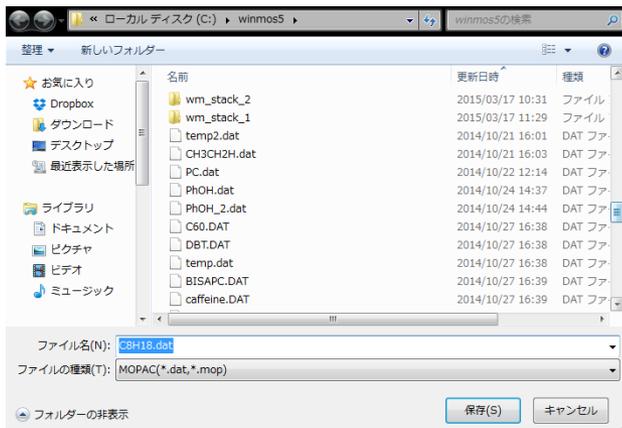
II. 1分子(C₈H₁₈)のモデリングとMOPAC計算

- CH₃を8回追加する



C₈H₁₈ として保存する。

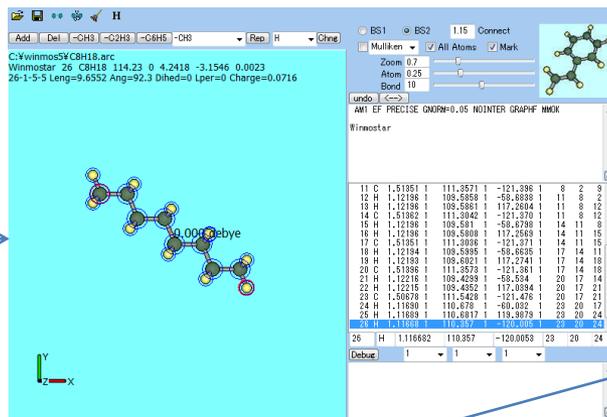
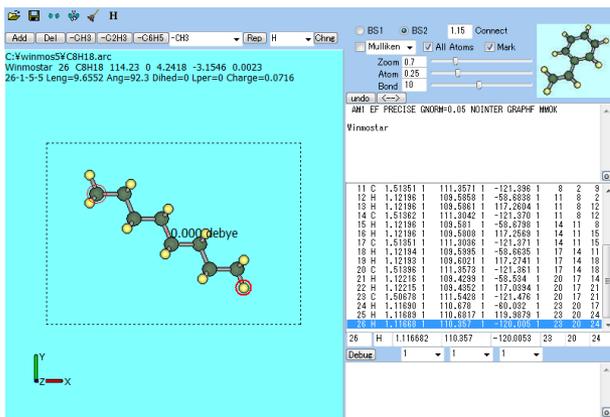
計算1のメニューからMOPACを起動し電荷を計算させる。*



* 本チュートリアルでは原子電荷として、簡易的にMOPAC計算によって得られるMulliken電荷を用いているが、RESP電荷やGAMESSなどのab-initio計算によって得られる電荷値を用いることが望ましい。

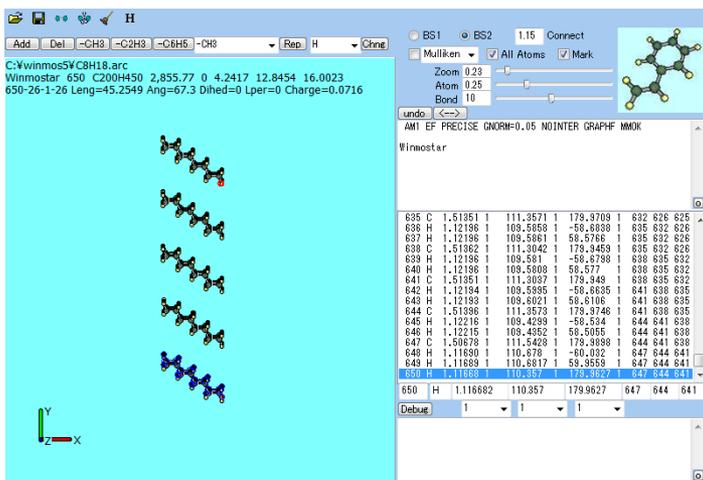
III. 25分子系の作成

Ctrl + 左クリックで分子全体を選択する

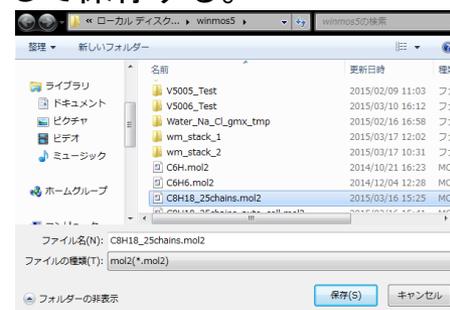


[編集]->[部分複製]により
25分子系を作成する。*

	X	Y	Z
Difference	5.0	8.0	8.0
Number	1	5	5
<input type="button" value="OK"/> <input type="button" value="Cancel"/>			



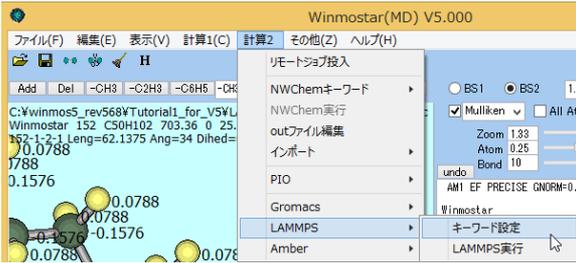
[ファイル]->[名前を付けて保存]画面でファイルの種類として mol2(*.mol2)を選択した後、C8H18_25chains.mol2として保存する。



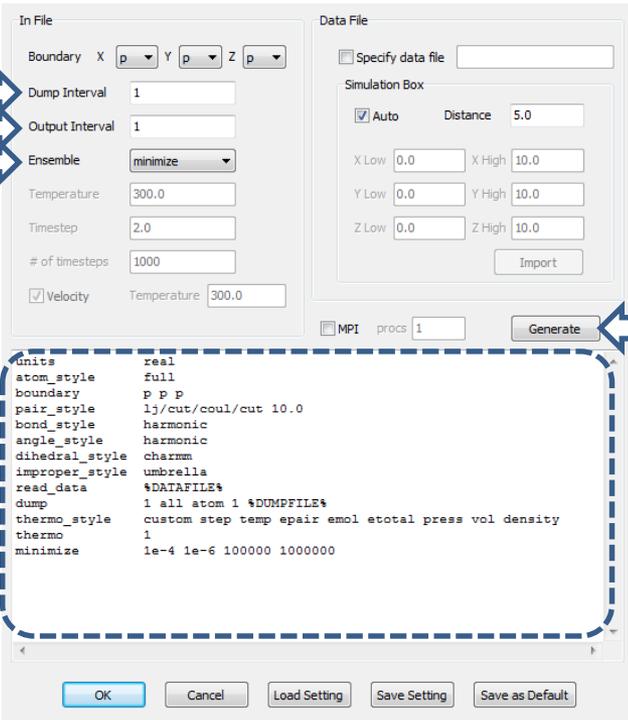
* ここでは、C₈H₁₈を8Åの間隔でY方向に5分子、Z方向に5分子複製し25分子系の初期構造を作成している。分子間隔を長めにするのが異常終了を避けるコツである。

IV. エネルギー最小化計算 「計算条件の設定」

LAMMPSキーワード設定画面を起動する



計算条件設定を行う



1ステップに変更
minimizeに変更

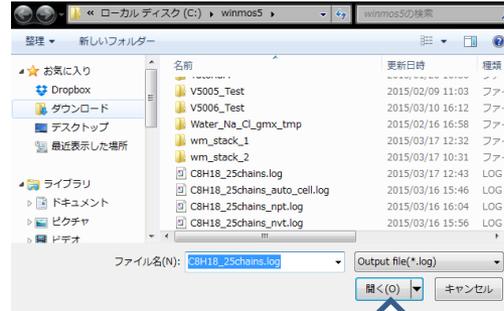
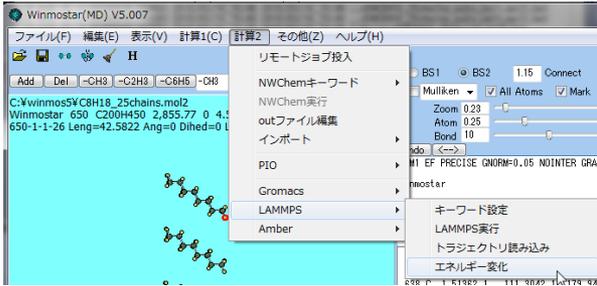
必要に応じて追加
修正する

LAMMPSを実行する



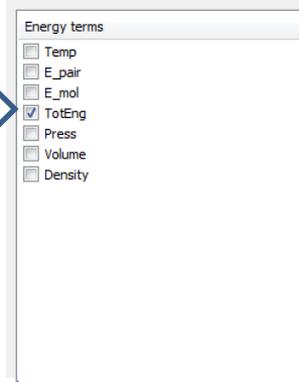
IV. エネルギー最小化計算 「エネルギー変化の確認」

LAMMPS エネルギー変化画面を起動する

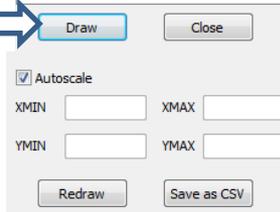


[開く]をクリックする

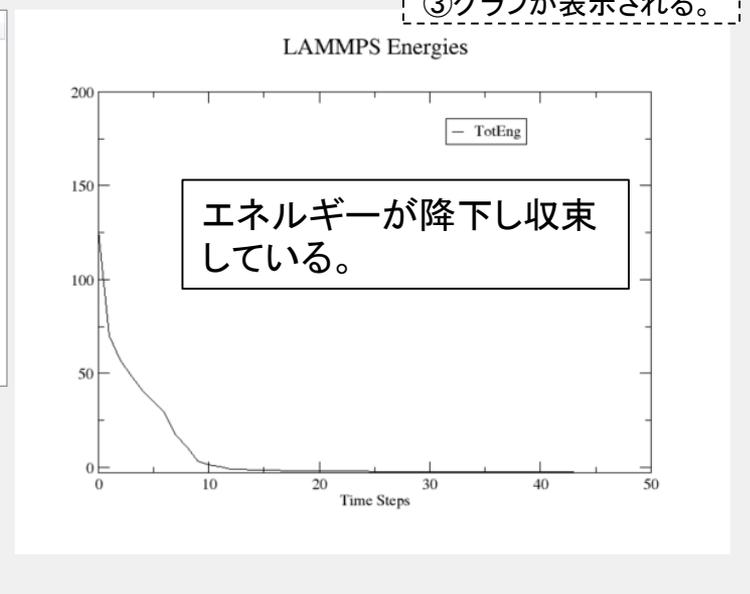
① [TotEng]にチェックを入れる



② Drawをクリックする

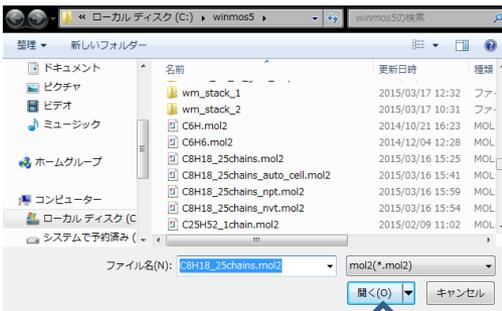
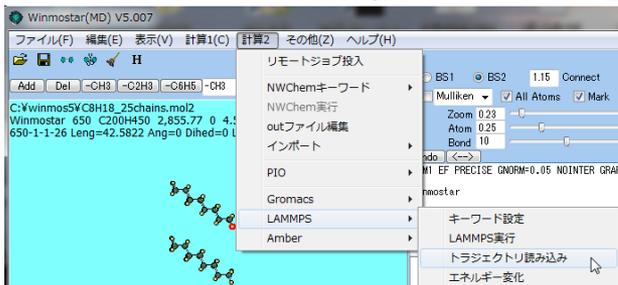


③ グラフが表示される。

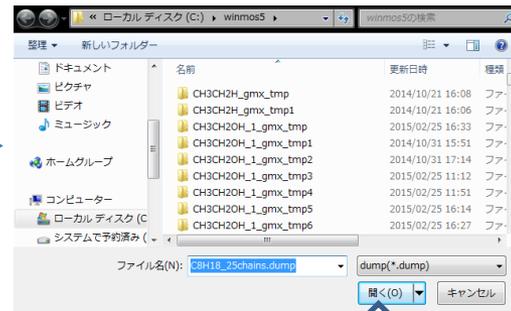


V. nvt(温度一定)計算 「計算条件の設定1」

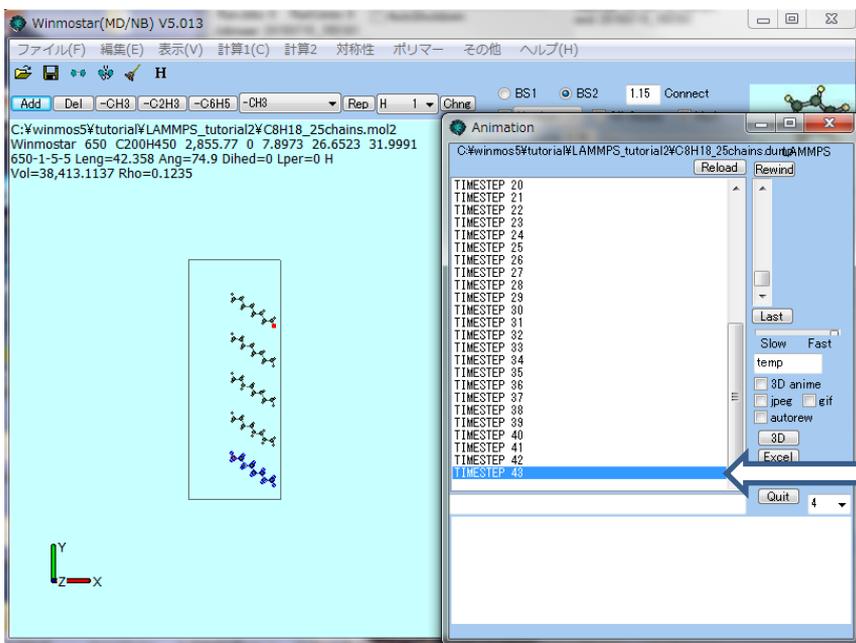
LAMMPS トrajectory読み込み画面を起動する



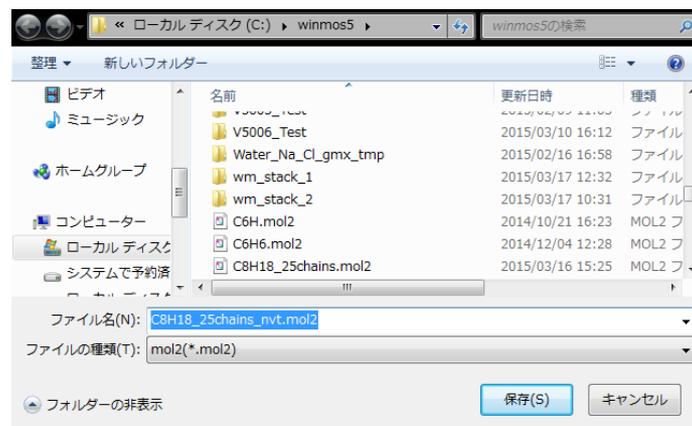
[開く]をクリックする



[開く]をクリックする



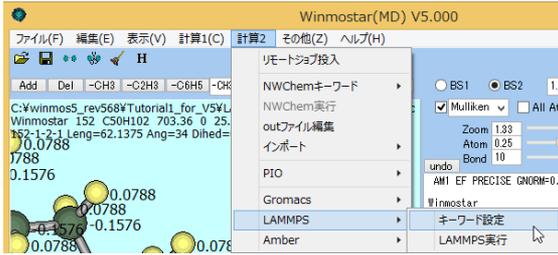
最終ステップ
(Timestep 43
をクリックする



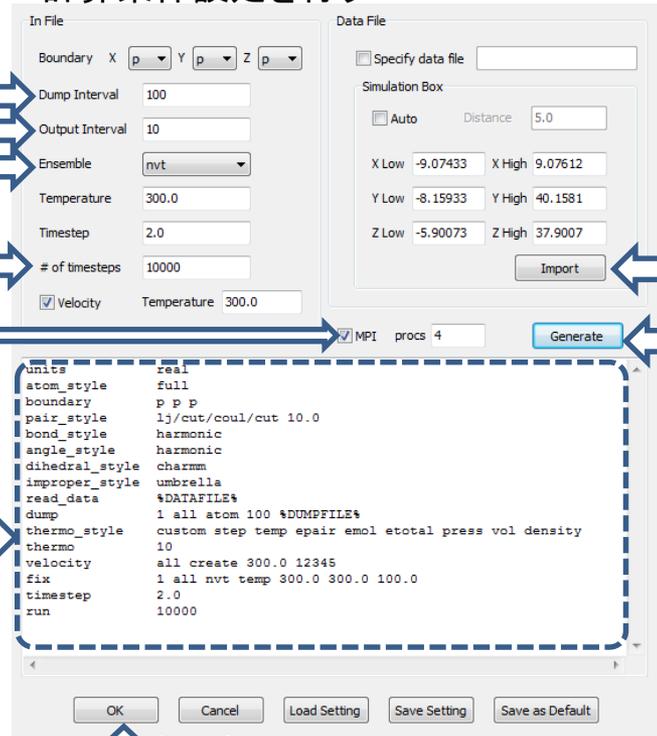
エネルギー極小化で得られた構造を
[ファイル]->[名前を付けて保存]画面で、
「C8H18_25chains_nvt.mol2」として
保存する。

V. nvt(温度一定)計算 「計算条件の設定2」

LAMMPSキーワード設定画面を起動する



計算条件設定を行う



100に変更
10に変更
nvtに変更

10000に変更

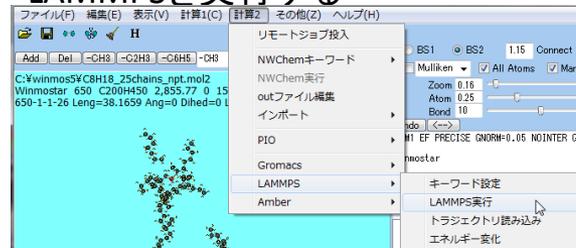
MPIにチェックを入れprocs
にCPUのcore数を設定

必要に応じて追加修正する

```

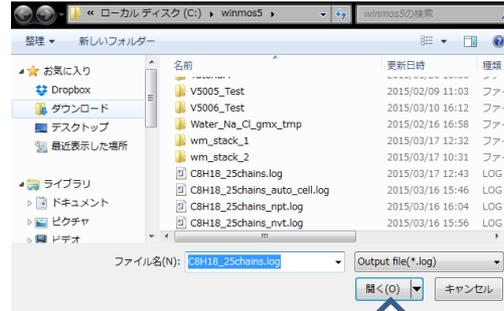
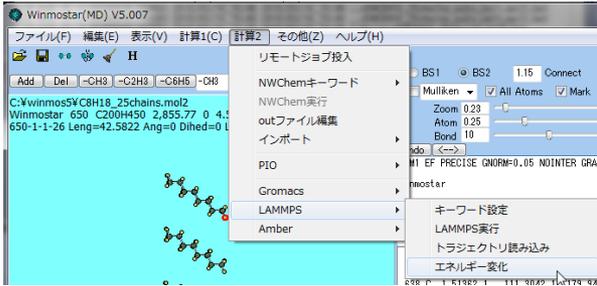
units          real
atom_style     full
boundary       p p p
pair_style     lj/cut/coul/cut 10.0
bond_style     harmonic
angle_style    harmonic
dihedral_style charmm
improper_style umbrella
read_data      %DATAFILE%
dump           1 all atom 100 %DUMPFILE%
thermo_style   custom step temp epair emol etotal press vol density
thermo         10
velocity       all create 300.0 12345
fix            1 all nvt temp 300.0 300.0 100.0
timestep       2.0
run            10000
    
```

↑ クリック
LAMMPSを実行する



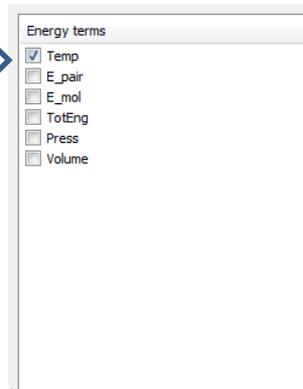
V. nvt(温度一定)計算 「温度変化の確認」

LAMMPS エネルギー変化画面を起動する



[開く]をクリックする

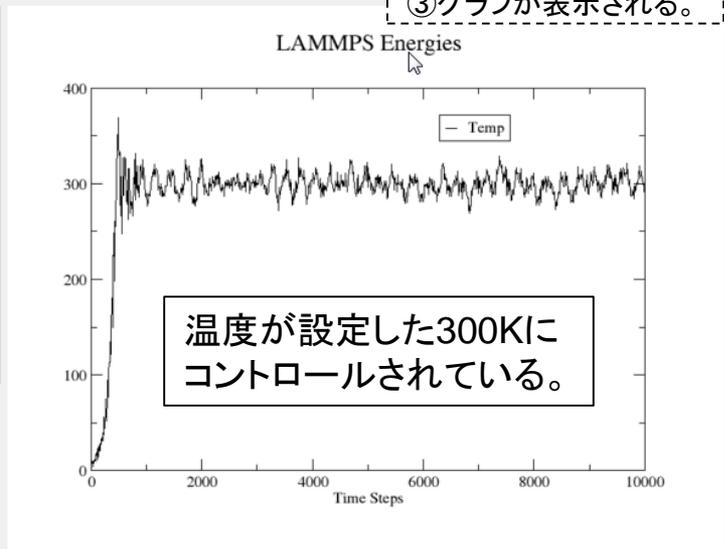
① [Temp]にチェックを入れる



② Drawをクリックする

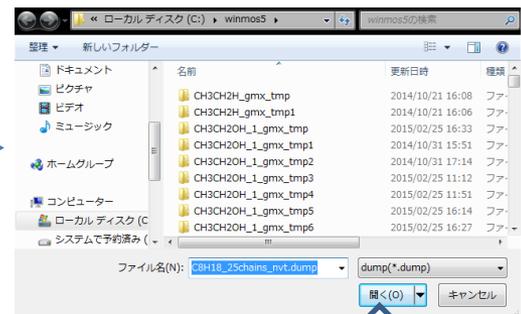
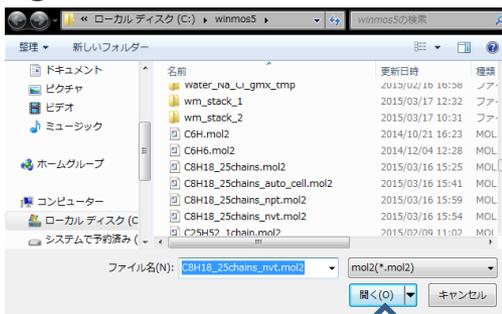
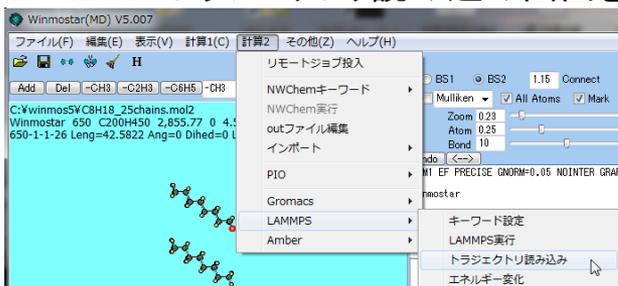


③ グラフが表示される。



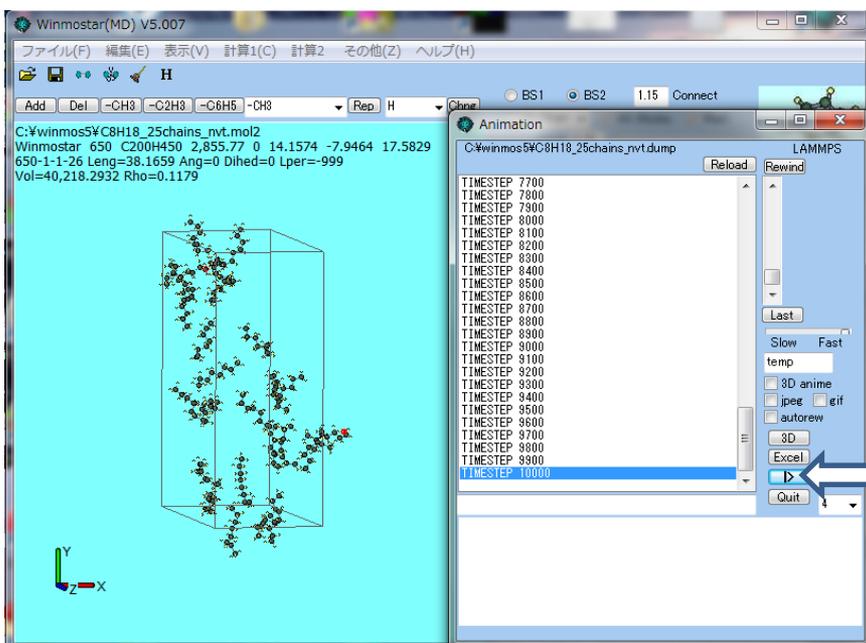
V. nvt(温度一定)計算 「トラジェクトリー表示」

LAMMPS トラジェクトリ読み込み画面を起動する



↑ [開く]をクリックする

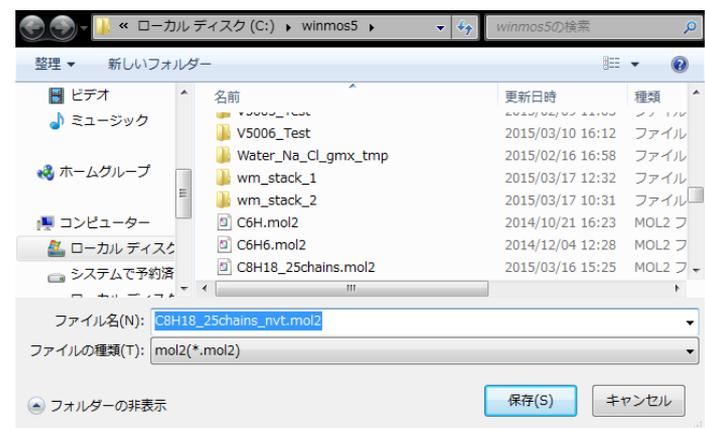
↑ [開く]をクリックする



最終ステップ
(TIMESTEP
10000)の構造を
表示させる



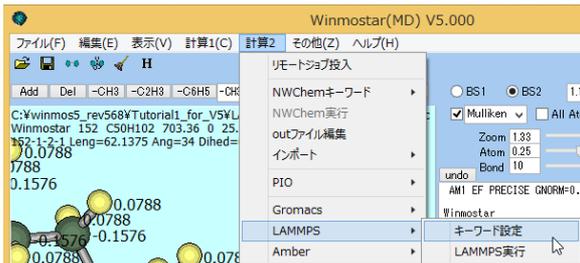
アニメーション
が始まる



nvtで得られた構造を[ファイル]->[名前を付けて保存]画面で、「C8H18_25chains_npt.mol2」として保存する。

VI. npt(温度／圧力一定)計算 「計算条件の設定」

LAMMPSキーワード設定画面を起動する



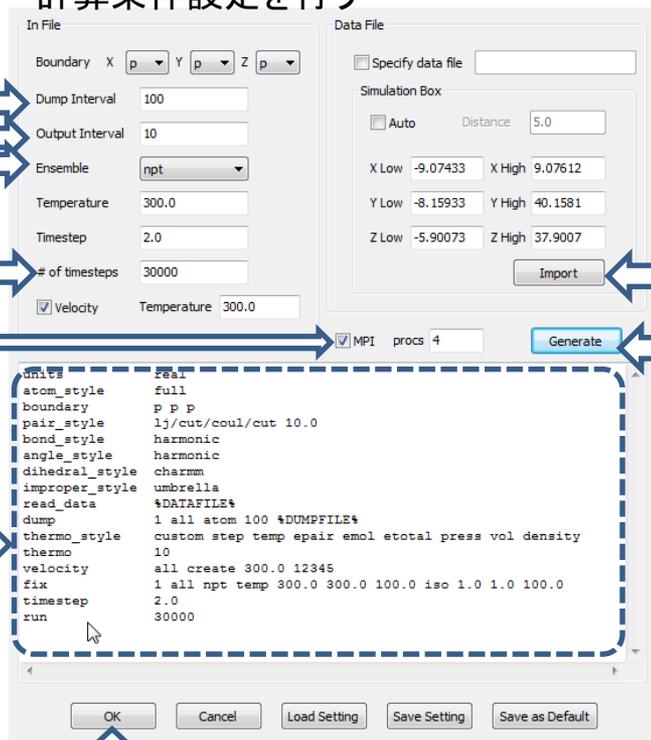
計算条件設定を行う

100に変更
10に変更
nptに変更

30000に変更

MPIにチェックを入れprocs
にCPUのcore数を設定

必要に応じて追加修正する

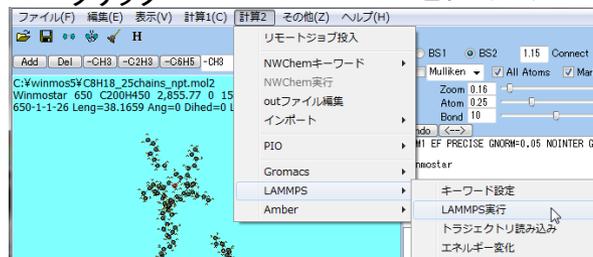


クリック

クリック

クリック

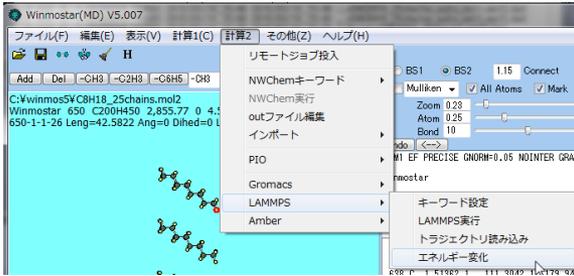
LAMMPSを実行する



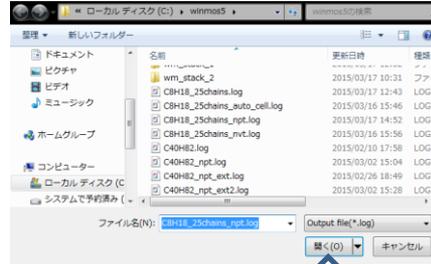
VI. npt (温度／圧力一定) 計算

「温度、体積、密度変化の確認」

LAMMPS エネルギー変化画面を起動する

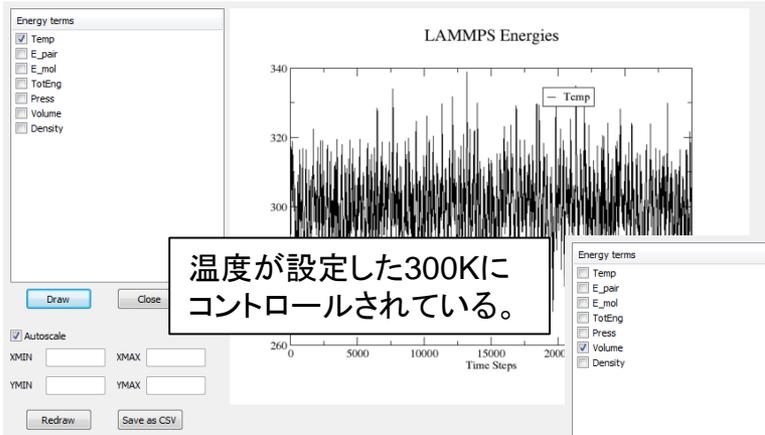


温度変化

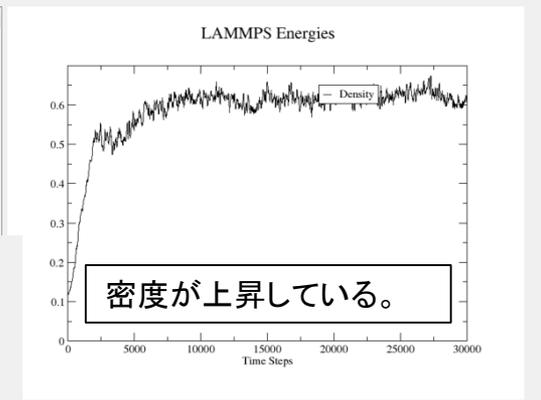
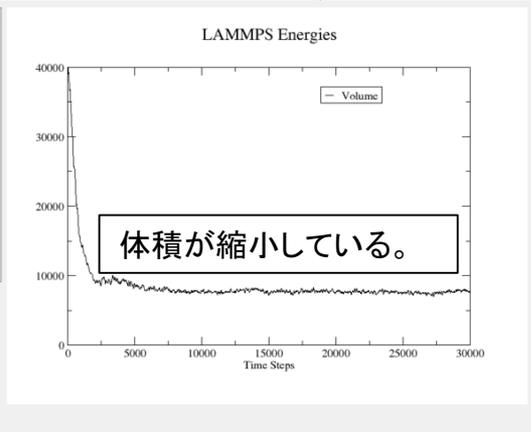


↑ [開く]をクリックする

密度変化

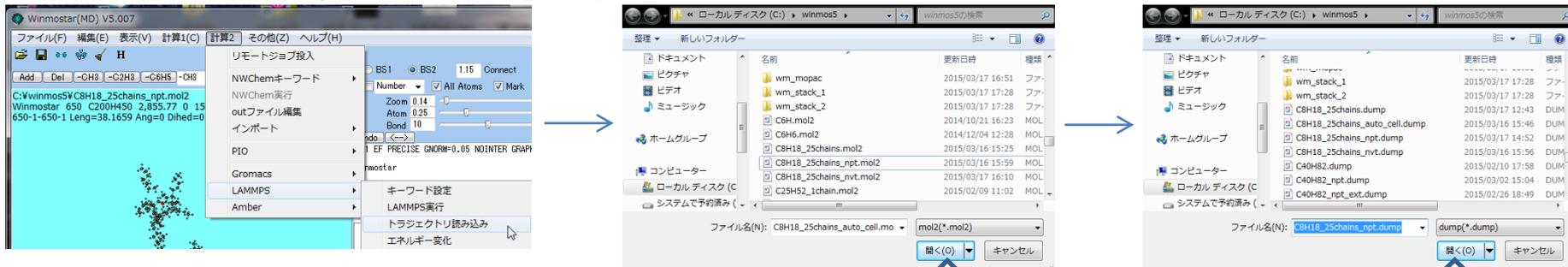


体積変化



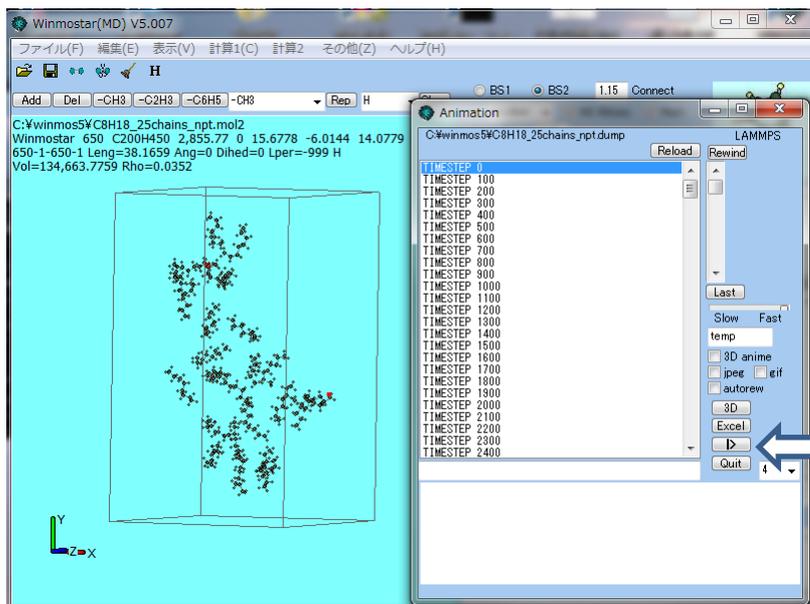
VI. npt(温度／圧力一定)計算 「トラジェクトリー表示」

LAMMPS トラジェクトリ読み込み画面を起動する

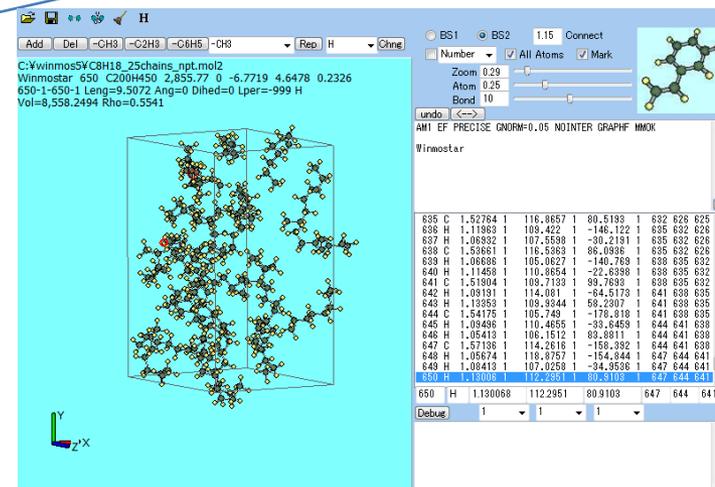


「開く」をクリックする

「開く」をクリックする



アニメーションが始まる



VI. npt(温度／圧力一定)計算 「トラジェクトリー表示」

① 3Dをクリックする

② 再生ボタンをクリックする

③ アニメーションが始まる

