

Winmostar - LAMMPS Tutorial 3 ポリマーモデリング _{V5.012}

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2015/6/16



ポリマーモデリングツールとはポリマー系の分子動力学計算を行うための初期配置作成ツール群 である。計算対象は複数種、複数本のポリマーチェーンであり、得られる配置は直線針金的なポリ マーチェーン分子を並べたものでは無く、"ある程度"コンパクトに詰まった集合構造である。周期境 界条件としては、3次元周期境界と特定方向の壁(wall)の境界条件を任意選択できる。

①モノマー登録

Winmostarの従来モデリング機能により作成した分子(モノマー)を「モノマー登録」ツールによりHead 原子(水素原子)とTail原子 (水素原子)の情報を付加した"専用"ファイル(拡張子.wmo)として保存する。

②ポリマーチェーンビルダ

モノマーを単独、あるいは複数選択し、重合度、その他条件を指定することで、ホモポリマー鎖、ブロックポリマー鎖あるいはランダム ポリマー鎖を1本作成する。ホモポリマー作成時には立体規則性(isotactic, syndiotactic, atactic)と二つの結合様式(head-head型、 head-tail型)を選択することができる。ランダムポリマー作成時には出現確率を、ブロックポリマー作成時にはブロック数を設定する。 得られたポリマー鎖を"専用"ファイル(拡張子.wpo)として保存する。

③ポリマーセルビルダ

複数種のポリマーチェーンを選択し、各々の本数を指定することで、分子動力学計算のための初期配置を発生させる。密度を指定することでセルサイズを自動設定する。生成した複数分子の構造ファイルはmol2で出力されLAMMPSの入力データとなる。





Contents

環境設定 Ι. Ⅱ. モノマー登録 III. ポリマーチェーンビルダ IV. ポリマーセルビルダ V. LAMMPS実行1(温度一定MD) VI. LAMMPS実行2(温度/圧力一定MD)



. 環境設定

- LAMMPS及びcygwinの入手とセットアップ LAMMPSのサイトからLAMMPSを入手する。さらにX-abilityのサイトからcygwin_wmを入手し セットアップを実施する。詳細は以下のリンク先を参照のこと。 http://winmostar.com/jp/LAMMPS_install_manual_jp_win.pdf
- ② ポリマーツールの設定 [ポリマー]->[設定]画面(下図)で、必要に応じてモノマー用専用"ファイル(拡張子.wmo)と ポリマー鎖専用ファイル(拡張子.wpo)の格納フォルダを指定する(デフォルトのままでも良い)。





- ① Winmostarのモデリング機能によりモノマー分子をモデリングする(下図の例はスチレン)
- ② (必要に応じて事前にMOPACなどの電荷計算を行う)
- ③ Head原子、Tail原子をHead、Tailの順でクリックして選択する。
- ④ [ポリマー]->[モノマー登録]を立ち上げる。
- ⑤ [モノマー登録]画面でモノマー用専用"ファイル(拡張子.wmo)として保存する。





ホモポリマービルダ	ブロックポリマービルダ	ランダムポリマービルダ
😵 Homo Polymer Builder	Slock Polymer Builder	Random Polymer Builder
Polymer Name PS100	Polymer Name PS_PE100_PS	Polymer Name PE_PP_100R
Degree 100	Degree 102	Degree 100
Monomer List CH2	First Monomer Last Monomer	First Monomer Last Monomer
CHCH3CH2 PhCHCH2	PhCHCH2 PhCHCH2 PhCHCH2 P	CH2 CH2
	Internal Monomer List	Internal Monomer List
	CH2 Name Number	CHCH3CH2 Name Ratio
	CH2 100 Number 100	CH2 0.5 Ratio 0.5 CHCH3CH2 0.5
Display Delete	Add Display	Add Display
Tacticity 4 Head/Tail Configuration 5	Delete wmo File	Delete wmo File Sum of Ratio 1
Isotactic Isotactic Isotactic Isotactic		Definition of Ratio
Atactic Racemo Ratio	Build Close	Probability of Each Monomer
		Proportion in Total Monomers Build Close
6 Build Close		
① ポリマー鎖ファイル名を入力する	① ポリマー鎖ファイル名を入力する	① ポリマー鎖ファイル名を入力する
② 重合度を指定する。	② 先頭モノマーと末尾モノマーを指定する。	② 重合度を指定する。
(3) モノマーを選択する の Tracticityを選択する さらに Atacticの場合はうわ	③ 中間モノマーとモノマー数を指定する	(3) 先頭モノマーと末尾モノマーを指定する。
モ率*を指定する。	5 Buidをクリックするとポリマー鎖ファイルが生成す	⑤ AddをクリックしListに登録する。
⑤ Head to TailかHead to Head (Tail to Tail)を選	3	6 ③と④を繰り返す
訳する。 ⑥ Buidをクリックするとポリマー鎖ファイルが生成する		⑦ Buidをクリックするとボリマー鎖ファイルが生成する。
		* Probability of Each Monomer: 発生頻度
* ラセモ率: 0 (Isotactic) ~ 1.0 (Syndiotactic)	以降、ホモボリマーを例に説明する	Proportion in Total Monomers:存在率
2013/6/16 Copy	right (C) 2015 X-Ability Co., Ltd. All rights reserve	ed. 6



ポリ	マー	その他	へルプ(H)	
	モノマ	マー登録		
	ポリマ	マーチェー	・ンビルダ	•
	ポリマ	マーセルビ	ルダ	
	設定			45

Amorphous Cell Bu	ilder					x
Box Configurration						
Density [g/cm^3]	0.5	1	Periodic	Boundary Cond	lition	2
X-Axis Length	55.7185]	V)	c		
Y-Axis Length	55.7185]	V 1	r		
Z-Axis Length	55.7185]	V 2	2		
Cubic Cell						
Polymers Available				Polymers Use	d	
PE100 PE_chain_Iso				Name	Number	
Polyethylene_1 Polypropylene_1		>> Add >	> (4)	PS100	5	
Polyslylene_Ata0 Polyslylene_HtoH		Number				
Polyslylene_Iso Polyslylene_Syn Polystylene_1	5					
PS100 PS100C	- C	< Delete				
	< <u>-</u>	< Delete -	<u> </u>			
Display Dele	te		(6)	Build	Clos	se
				-	_	

50 Jan Jan -	·			·= • 🕜		
↓ タウンロード ^	名前	更新日時	種類	サイズ		
■ テスクトッフ 10 最近表示した場所 目	4	食素条件に一致する項	目はありません。			
🔚 ライブラリ						
■ ドキュメント						
🔄 ピクチャ						
📑 ビデオ						
🎝 ミュージック						
-	•			•		
ファイル名(N): PS_10	0chain_5mol.mol2			-		
ファイルの種類(T): MOL2	(*.mol2)			•		
● ノオルターの非表示						
 フォルターの非表示 ① 密度に0.5と ③ 用加培用条件	入力する。Cu	bic Cellにチ	ェックを入れ	る。もしくはン	【軸長さ/Y軟	由長さを指定す
 Элид - орнал 密度に0.5と 周期境界条 新生日本日本日本日本日本日本日本日本日本日本日本日本日本日本日本日本日本日本日本	入力する。Cu 件*を設定する ポリマー鎖名:	bic Cellにチ る。 を選択した	·ェックを入れ 数をNumba	る。 もしくはご	【軸長さ/Y軟	も長さを指定す
 ・ ・ ・	入力する。Cu 件*を設定する ポリマー鎖名: クレ右リストに	bic Cellにチ る。 を選択し、本語	・エックを入れ 数をNumbe	る。もしくはX rに入力する	【軸長さ∕Y軟 。	も長さを指定す
 ・ ・ ・	入力する。Cu 件*を設定する ポリマー鎖名: クし右リストに て③と④を繰	bic Cellにチ る。 を選択し、本 反映させる。 り返す)	·ェックを入れ 数をNumbe	る。もしくは、 rに入力する	【軸長さ∕Y車 。	由長さを指定す
 ・ ・ ・	入力する。Cu 件*を設定する ポリマー鎖名 クし右リストに て③と④を繰 ックし「名前を行	bic Cellにチ る。 を選択し、本 を選択し、本 り返す) けけて保存 !!	・エックを入れ 数をNumbe ウインドウで	る。もしくはご rに入力する ファイル名(1	X軸長さ/Y軌 。 空S 100chain	由長さを指定す 5mol)を入っ
 アオルターの非表示 1 密度に0.5と 2 周期境界条件 3 左リストから ④ Addをクリック ⑤ Buildをクリック ⑦ [保存]をクリ 	入力する。Cu 件*を設定する ポリマー鎖名 クし右リストに て③と④を繰 ックし「名前を{ ックすると処理	bic Cellにチ る。 を選択し、本 反映させる。 り返す) 付けて保存」 しが開始する	・エックを入れ 数をNumbe ウインドウで 。処理には問	る。もしくは2 rに入力する ファイル名(I	《軸長さ/Y朝 。 PS_100chain 場合がある。	h長さを指定す _5mol)を入; 得られたアモ

₩X-Ability V. LAMMPS実行1(温度一定MD)

wwmmds videntAnnual viden		Q LAMMPS Setup	
Boundary X p V p Z p Specify data f Dump Interval 500 Dump Interval 500 Temperature 300.0 Temperature 300.0 Temperature 300.0 V low 0.0 Z low 0.0 V low 0.0 Z low 0.0 V low 0.0 Z low 0.0 V low 0.0 V low 0.0 Z low	: winmos5 • UsersManual • 4 ₂ UsersManualの検索 の	In File	Data File
P 100 June / 100 Jun	(メント A 名前 T 更	Boundary X p	▼ Y p ▼ Z p ▼
P = 100 dain_smo_mix.mol2	PS_100chain_5mol.mol2 20	Dump Interval 5	500 Simulation Box
-7 -7 -7 -7 <td>1 III PS_100chain_5mol_mix.mol2 20 ージック</td> <td>Bung Incivia B</td> <td>Auto</td>	1 III PS_100chain_5mol_mix.mol2 20 ージック	Bung Incivia B	Auto
Prezze Preze Prezze Prezze	=	Output Interval 5	;00
7-7 7		Ensemble n	X Low 0.0
7.7.201 299(3),	-9-	Temperature 3	300.0 Y Low 0.0
<pre>stature process product process product process product process process</pre>	りルディスクロート アネがタン	Timesten	2.0 Ziow 0.0
<pre># of timesteps 50000 # (0) # # * ZZU # * * * * ZZU # * * * ZZU # * * * * ZZU # * * * * * * * * * * * * * * * * * * *</pre>		Thirdstep 2	2.000 0.0
WHYLOY ##7202b WHYLOY ##7202b WHYLOY ##1022b WHYLOY #WOT ##1022b ##1022b ##1022b ##102b ##102b ##102b		# of timesteps 5	j0000
RAMERY 15:007 RE(V) IFRIC IFRIC <td>開く(0) ▼ キャンセル</td> <td>Velocity Te</td> <td>emperature 300.0</td>	開く(0) ▼ キャンセル	Velocity Te	emperature 300.0
BR(V) HB1(C) HB2 AUV- 40/B AUV	MD/POLYMER) V5.007		MPI procs 4
Image: State of the state	識(E) 表示(V) 計算1(C) 計算2 ポリマー その他 ヘルプ(H)		
Number 20100000 20000000000000000000000000000	CH3 -C2H3 -C6H5 -CH3 - Rep. H - Chne BS1 BS2 1.15 Connect	atom_style	full
1	versManual¥PS_100chain_5mol.mol2 C4000H4010_52.085.84_054.370726.4378_61.4986	boundary pair style	ppp li/cut/coul/cut 10.0
urds_0 < C> urds_0 < C> urds_0 < C> C> Urds urds_0 < C> C> Urds C> urds_0 < C> C> Urds C> Urds C> urds_0 < C> C> Urds C> Urds C> Urds Urds Urds Urds Urds <td>2 Leng=70.9826 Ang=144.6 Dihed=221.628 Lper=10.877 H Bond 10 C PM</td> <td>bond_style</td> <td>harmonic</td>	2 Leng=70.9826 Ang=144.6 Dihed=221.628 Lper=10.877 H Bond 10 C PM	bond_style	harmonic
Winnoter Winnoter 1000000000000000000000000000000000000	ANT EF PRECISE GNORH=0.05 NOINTER GRAPHF WHOK	angle_style	harmonic
785 C 5365 1 15.4101 700 70 700 70 700 70 785 C 5365 1 15.4101 700 70 700 70 700 70 785 C 5365 1 15.4101 700 70 700 70 700 70 785 C 5365 1 15.4101 700 70 700 70 700 70 785 C 5365 1 15.400 1 100 700 70 700 70 700 70 785 C 15.800 1 12.1201 86,700 70 700 70 700 70 700 70 785 C 15.800 1 12.1201 86,700 70 700 70 700 70 700 70 700 70 700 70 785 C 15.800 1 12.1201 86,700 70 700 700 70 700 70 <td>Vinnostar</td> <td>improper_style</td> <td>umbrella</td>	Vinnostar	improper_style	umbrella
Cump 1 all atom 500 * DUMPFILY Table 1 0 a		read_data	SDATAFILES
1 1	7995 C 1.53951 1 113.4161 1 -70.129 1 799478797	thermo style	custom step temp epair emol etotal pre
 	7997 H 1.08308 1 108.1634 1 43.1135 1 739473737 7398 C 1.33468 1 119.8353 1 -113.630 1 739473947	thermo	500
0000 C 1 100001 120.584 0 4.645 100072857886 0000 C 1 100001 120.584 0 1.645 10007857886 0000 C 1 100001 120.586 0 1.0586 1 0587887 0000 C 1 100001 120.586 0 1.0586 1 0587887 0000 H 100001 100.587 1727.2727 0000 H 100001 100.587 17	7939 C 1.38500 1 121.2527 1 66.7328 1 79367987 8000 C 1.38931 1 120.5886 1 178.9172 1 798979867 8000 C 1.38989 1 120.5177 1 -179.251 1 799879967	velocity	all create 300.0 12345 1 all nvt temp 300.0 300.0 100.0
Image: Second and Sec	8002 C 1.38811 1 120.1584 1 0.495 1 800073937 8003 H 1.01908 1 120.8096 1 -0.7562 1 739373967 8004 H 1.01908 1 129.8096 1 -0.7562 1 739373967	timestep	2.0
1 1	8005 H 1.01986 1 120.916 1 0.8664 1 799879967 8006 H 1.01994 1 119.8903 1 -179.341 1 80079397 9007 H 1.01994 1 119.8903 1 -179.341 1 80079907	run	50000
Bit Control Contro Control Control	0007 ff 1.01353 f 120.1435 f 1-13.357 f 000280007 0008 ff 1.08831 f 110.8855 f -46.4887 f 738573847 8008 ff 1.08811 1 110.857 f 74.32 f 738578947		
5 OK Cancel Load Setting Save Setting	8010 H 1.090015 108.9254 1 -185.755 1 7995 7994 8010 H 1.090015 108.9254 1 -165.7558 7995 7994	•	
3 ³ OK Cancel Load Setting Save Setting			
	den and a second se	(5) ок	Cancel Load Setting Save Setting

- ① Winmostarで[ファイル]->[開く]画面で、拡張子として.mol2を選択しポリマーツールで作成した.mol2ファイル(PS_100chain_5mol)を開く。
- ② 構造がWinmostarのモデリングウインドウに表示される。
- ③ [計算2]->[LAMMPS]->[キーワード設定]画面を開き[Import]をクリックする。
- ④ 右図のとおりに温度一定(nvt)の計算条件を設定し[Generate]をクリックする。
- ⑤ [OK]をクリックする。
- ⑥ [計算2]->[LAMMPS]->[LAMMPS実行]を選択し、LAMMPSを起動する。





2013/6/16

\mathbf{X} -Ability VI. LAMMPS実行2(温度/圧力一定MD)



Copyright (C) 2015 X-Ability Co., Ltd. All rights reserved.

3

4

X-Ability

1

温度



体積



2



 ① [計算2]->[LAMMPS]->[エネルギー変化]で温度変化、体積変化、全エネルギー変化を表示 させ、計算が正常に終了しているか確認する。
 ② [計算2]->[LAMMPS]->[トラジェクトリ読み込み]で計算が正常に終了しているか確認する。

2013/6/16



