

Winmostar - LAMMPS

Tutorial 4

界面ビルダ

V5.012

株式会社クロスアビリティ

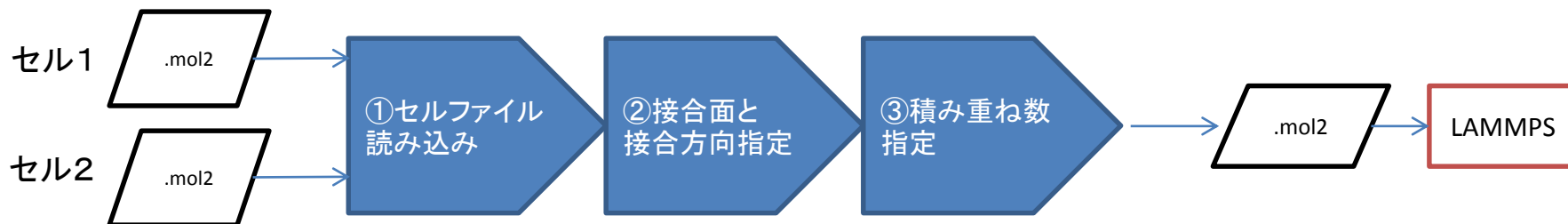
question@winmostar.com

2015/6/18

界面ビルダ概要

『界面ビルダ』は分子動力学計算を行うための初期配置作成ツールの一つである。本チュートリアルではポリマーを題材としているが対象となる系は分子から成る液体や無機／金属結晶界面、固固界面、固液界面、液液界面などであってもよい。周期境界条件での整合性を担保するために、貼り合わせる各々のセルはMD計算によって緩和された構造のものを用いることを基本とする。接合面の形状は両者で合同でなければならないが自動調整機能を付加する。

- ① 接合用セルを作製
ポリマーセルビルダを用いでモデリングを行いLAMMPSによるMDを実行する。
- ② 作成するセルファイル読込
①で得られた2つの.mol2ファイル(セル1、セル2)をそれぞれ指定する。
- ③ 接合面と 接合方向指定
接合面(ab面、bc面、ca面)と接合方向(どちらの面を界面とするか)を指定する。
- ④ 積み重ね数指定
接合面の積み重ね数、およびセル1、セル2各々の積層数を指定する。



Contents

- I. 環境設定
- II. ポリマーセルビルダを用いた接合用セルの作製
- III. 界面ビルダーの呼び出し
- IV. MDセル選択
- V. 接合方向と接合面の指定
- VI. 各セルの積層数と間隔指定
- VII. LAMMPS実行1 (minimize)
- VIII. LAMMPS実行2 (温度一定MD)
- IX. LAMMPS実行3 (温度・圧力一定MD)
- X. 3D表示 (温度・圧力一定MD)

I. 環境設定

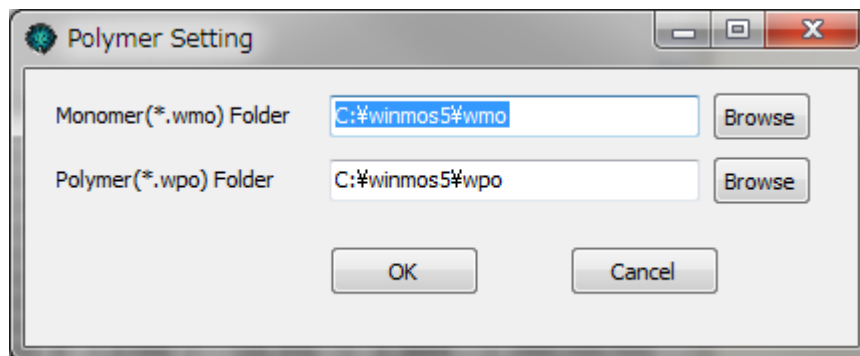
① LAMMPS及びcygwinの入手とセットアップ

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 ポリマータールの設定

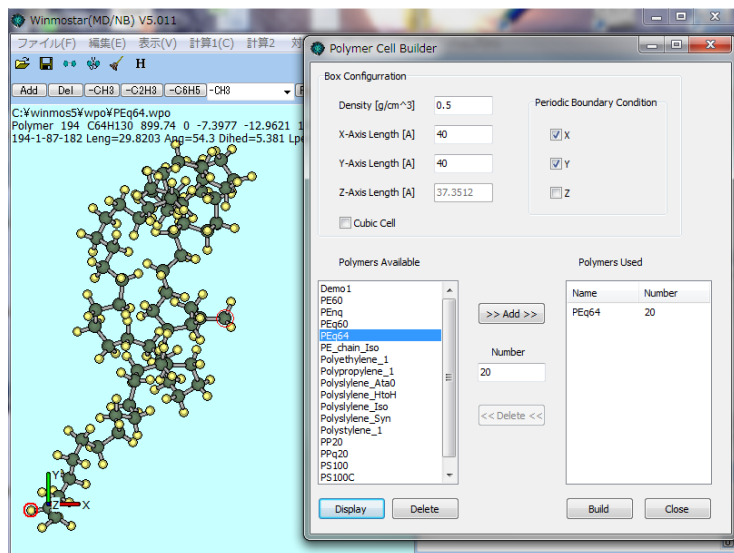
[ポリマー]->[設定]画面(下図)で、必要に応じてモノマー用専用”ファイル(拡張子.wmo)とポリマー鎖専用ファイル(拡張子 .wpo)の格納フォルダを指定する(デフォルトのままでも良い)。



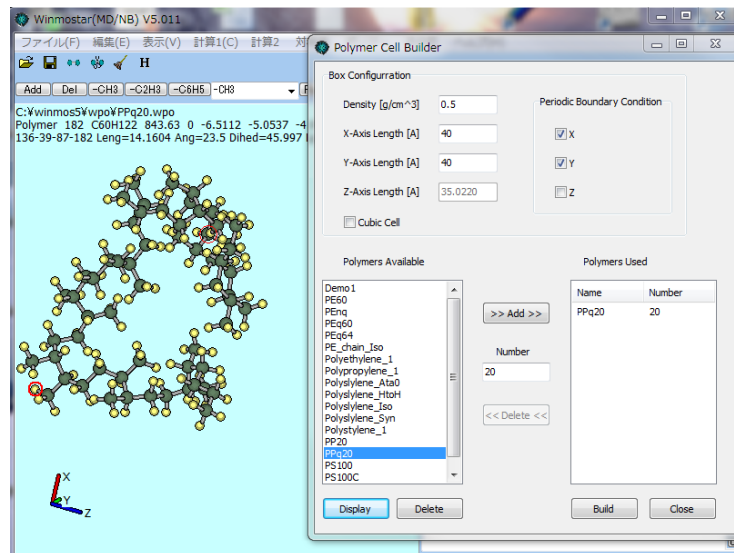
II. ポリマーセルビルダを用いた接合用セルの作製

- ポリマーツールを用いてPE鎖からなるセルとPP鎖からなるセルの2つを作成する。
ポリマーモデリング機能を活用したLAMMPSポリマーチュートリアル参照のこと。

PE鎖



PP鎖

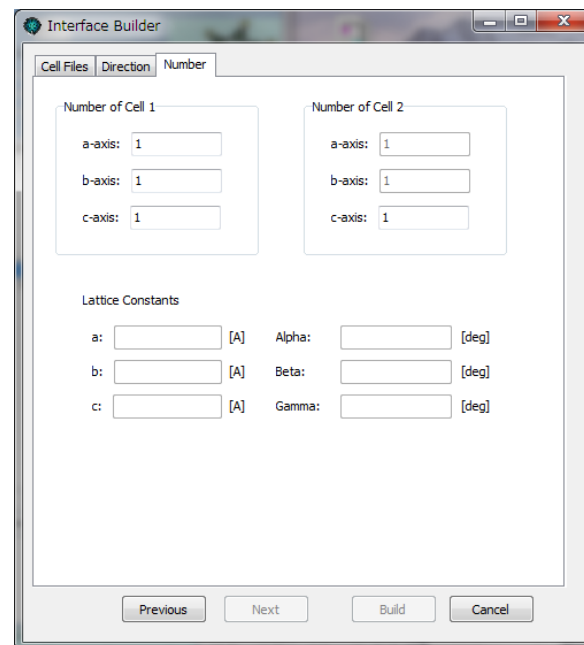
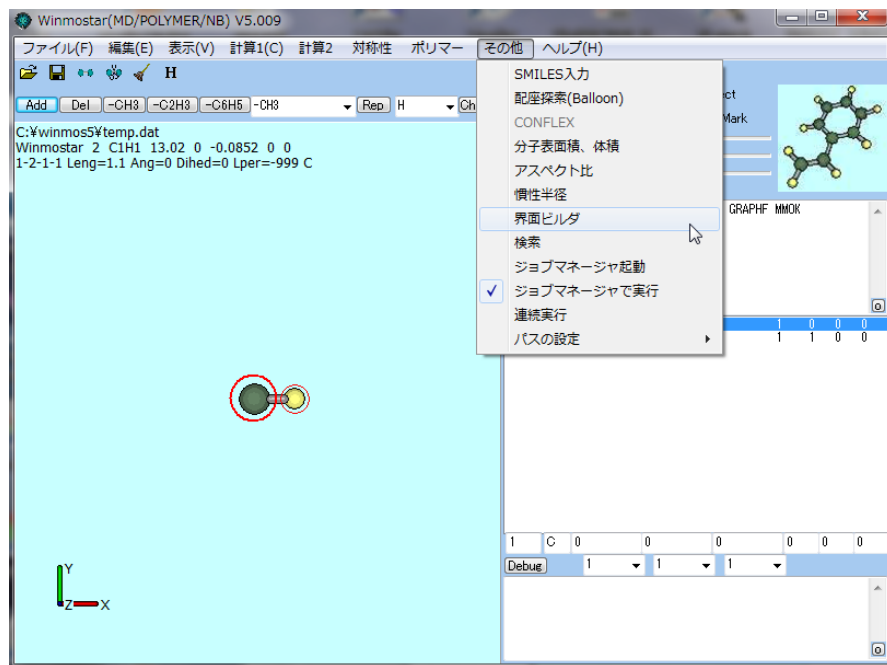


- [モノマー登録]機能を用いて電荷情報を有するポリエチレンモノマー(ファイル名:PEq)を登録する。
- [ホモポリマービルダ]を用いて64量体のPE鎖を作成し登録する(PEq64)。
- 密度を0.5としX-Axis LengthとY-Axis Lengthを40Åに設定する。
- 周期境界条件のZのチェックを外す*。
- 左リストからポリマー鎖名PEq64を選択しNumberに20と入力する。
- Addをクリックし右リストに反映させる。
- Buildをクリックし「名前を付けて保存」ウインドウでファイル名を入力する(PEq64_20zw)。
- [保存]をクリックすると処理を開始する。得られたアモルファス構造はLAMMPS用の.mol2として保存される。
- PEと同様にポリプロピレンモノマーを登録し(PPq)、20量体のPP鎖を作成し登録する(PPq20)。
- PEと同様にNumberに20と入力しアモルファス構造を作成し保存する(PPq20_20zw)。

* チェックあり: チェックを入れた方向の周期境界条件下で配置する。チェックなし: チェックを入れた方向の壁内に収まるように配置する。

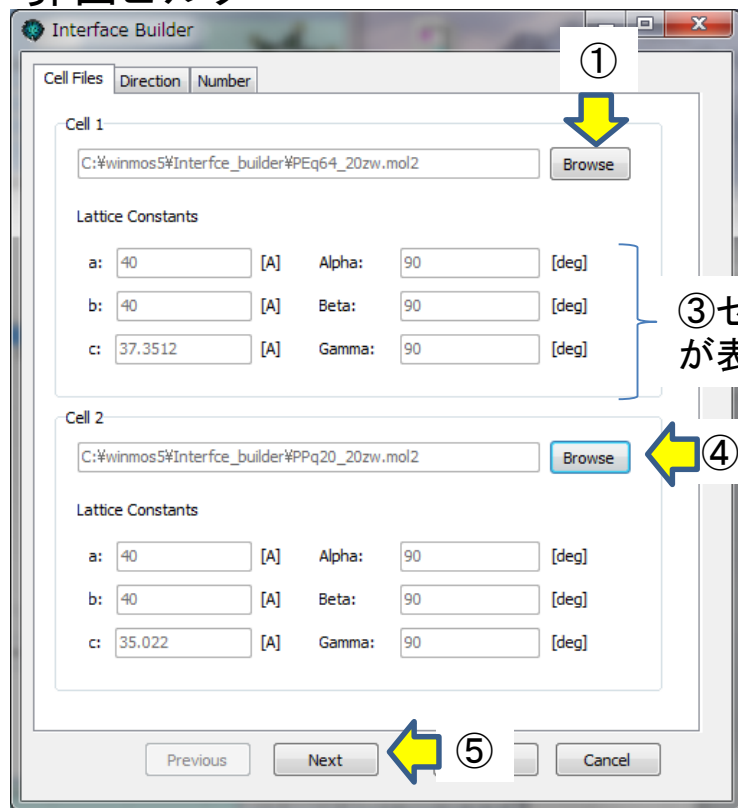
III. 界面ビルダーの呼び出し

- Winmostar最初のメインメニューから[その他]→[界面ビルダ]を呼び出す。

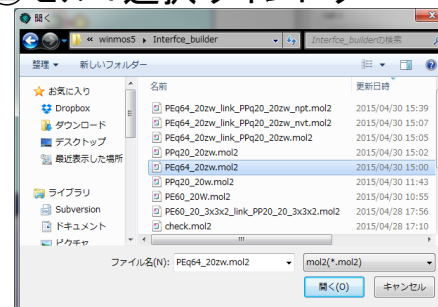


IV. MDセル選択

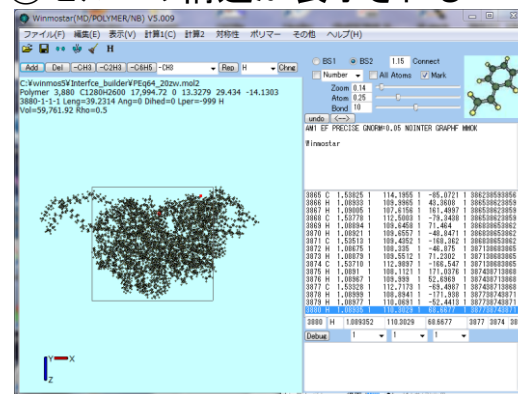
界面ビルダ



②セル1選択ウィンドウ

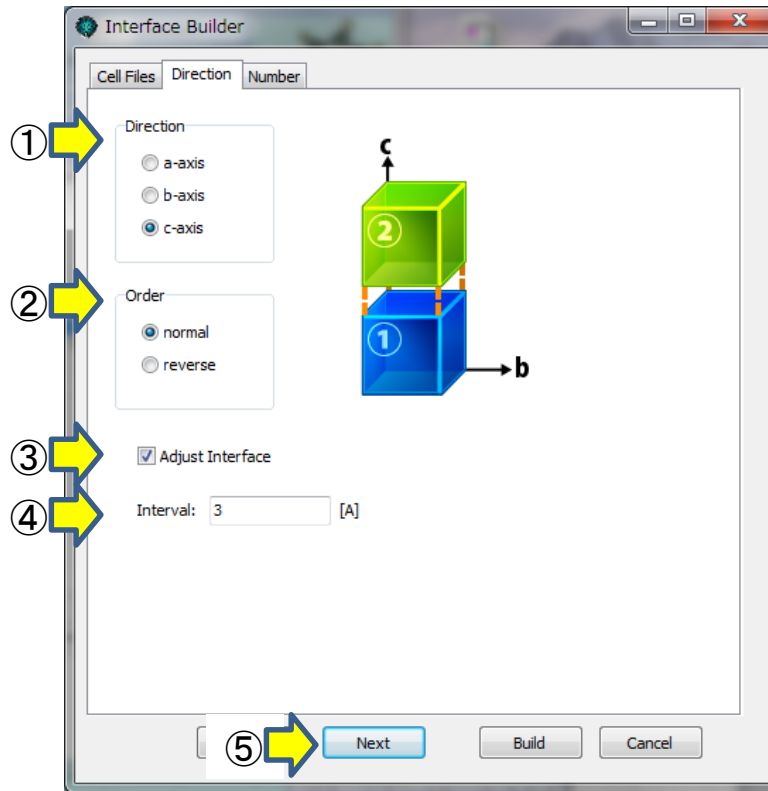


③セル1の構造が表示される



- ① セル1の[Browse]をクリックする。
- ② PEセルのファイル (PEq64_20zw.mol2)を選択する。
- ③ セル1のセル定数が表示され、Winostarのモデリング画面にセル1の構造が表示される。
- ④ セル2の[Browse]をクリックし、PPセルのファイル (PPq20_20zw.mol2)についてセル1と同様に①②③の操作を行う。
- ⑤ [Next]をクリックする(次スライド)。

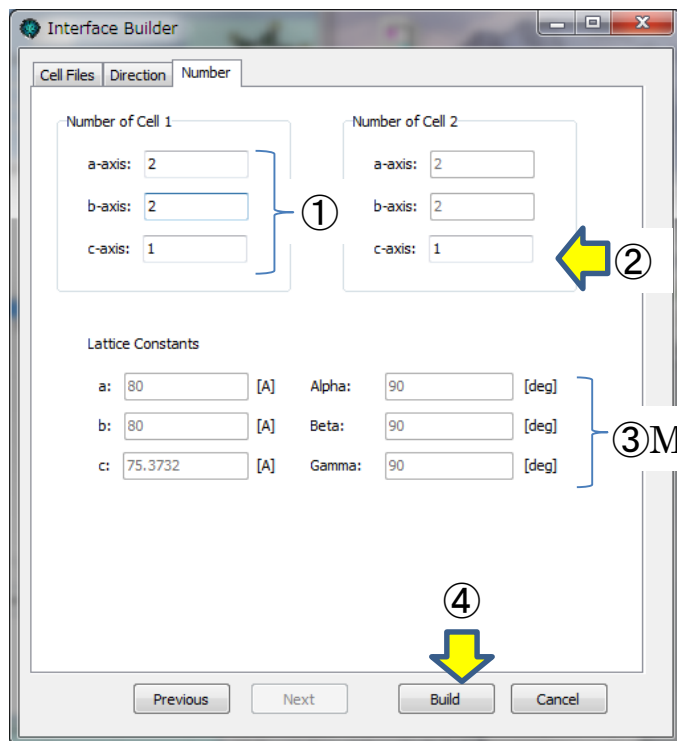
V. 接合方向と接合面の指定



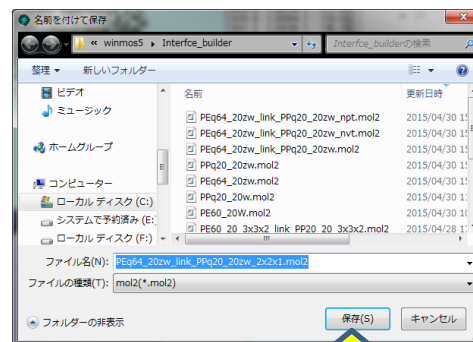
- ① Directionで貼り合わせる方向をc-axisに指定する。
- ② Orderで貼り合わせる面を選択する。
- ③ 接合面が完全一致していない場合はAdjust Interfaceにチェックを入れる。
- ④ Interval貼り合わせる2つのセルの間隔を3Åに設定する。
- ⑤ [Next]をクリックする(次スライド)。

VI. 各セルの積層数と間隔指定

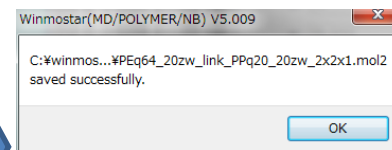
界面ビルダ



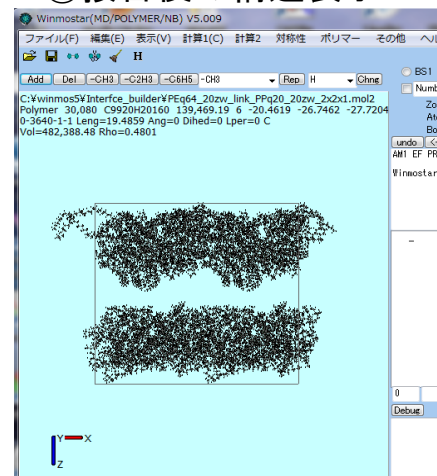
④接合後のファイル名を入力



⑤正常終了メッセージ



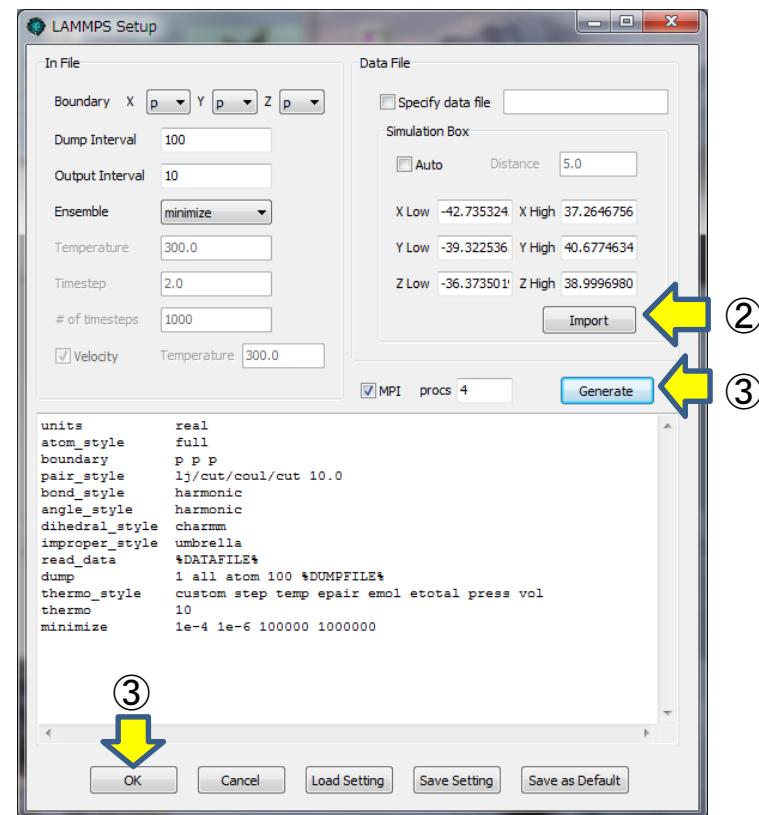
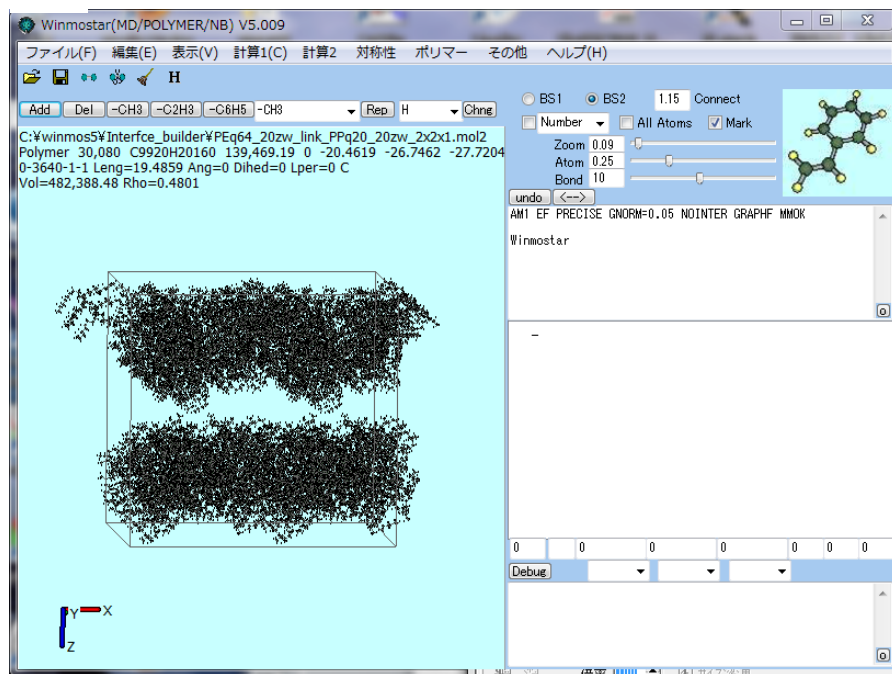
⑥接合後の構造表示



- ① Number of Cell 1のa-axis, b-axis, c-axisにそれぞれ積み重ね数を入力する。
- ② Number of Cell 2に積み重ね数を入力する。なお指定した積層方向に応じて指定可能な軸は変化する。
- ③ Lattice Constantsにセル定数が表示される。
- ④ [Build]をクリックし、接合後のファイル名(PEq64_20zw_link_PPq20_20zw_2x2x1)を入力する。
- ⑤ [保存]をクリックすると接合が実行され、正常終了した旨のメッセージウインドウが表示される。[OK]をクリックする。
- ⑥ Winostarのモデリング画面に接合後の構造が表示される。

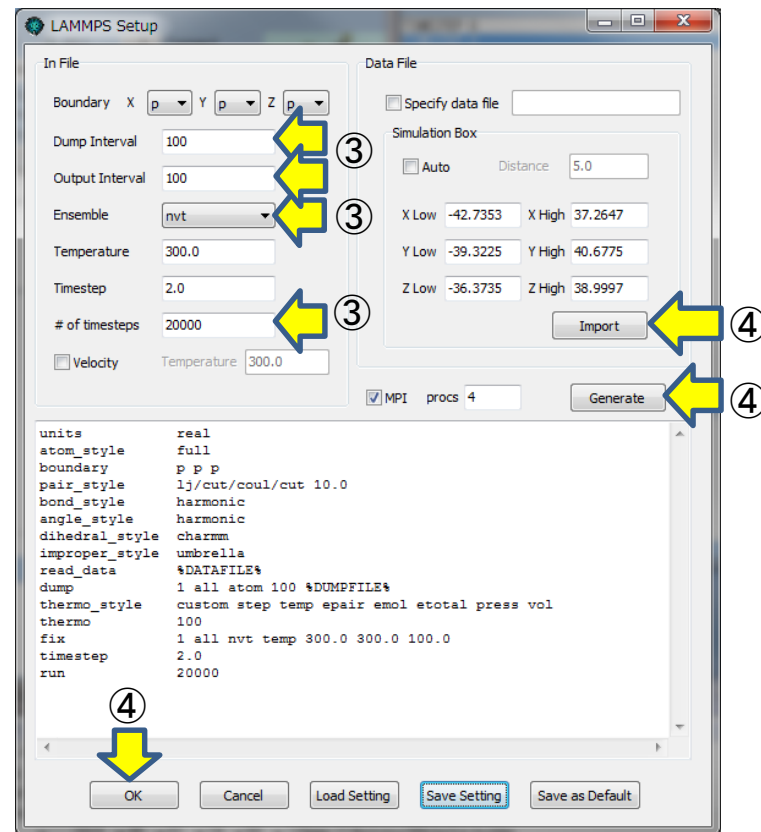
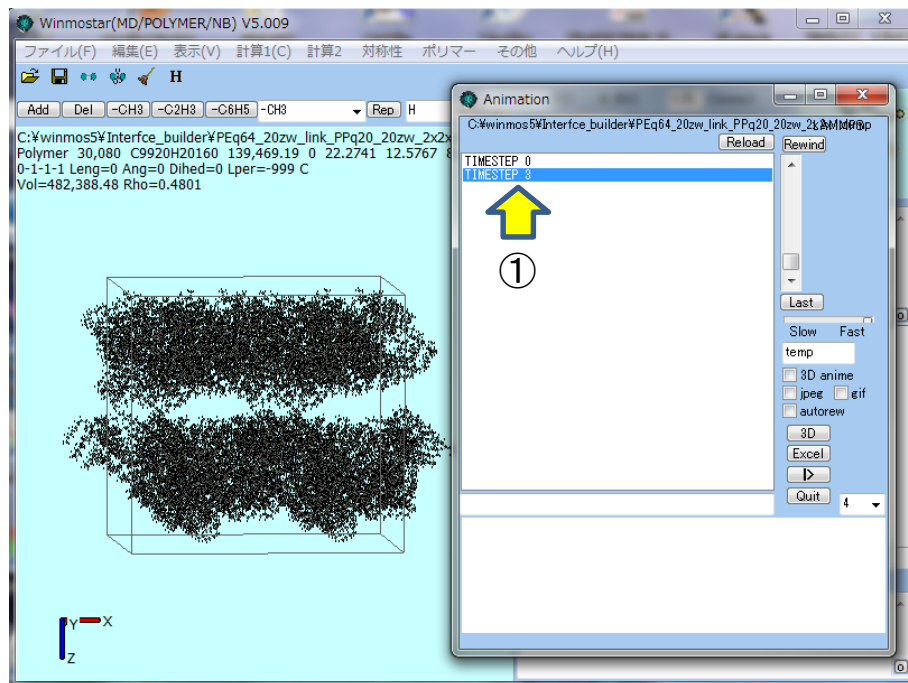
VII. LAMMPS実行1 (minimize)

①



- ① Winmostarで[ファイル]->[開く]画面で、拡張子として.mol2を選択し界面ビルダで作成した.mol2ファイルを開く。
- ② [計算2]->[LAMMPS]->[キーワード設定]画面を開き、[Import]をクリックしてセル情報を反映させる。また必要に応じてMPIにチェックを入れprocを指定する。
- ③ [Generate]をクリックした後、[OK]をクリックし->[キーワード設定]画面を閉じる。
- ④ [計算2]->[LAMMPS]->[LAMMPS実行]を選択し、LAMMPSを起動する。
- ⑤ [計算2]->[LAMMPS]->[エネルギー変化]で計算が正常に終了しているか確認する。

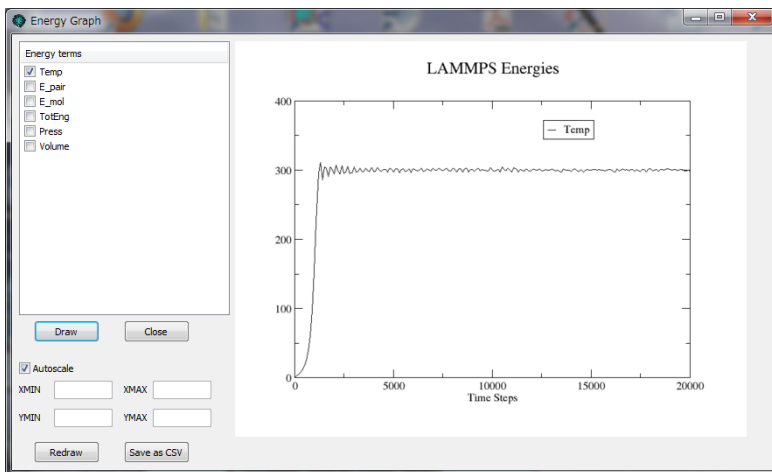
VIII. LAMMPS実行2(温度一定MD)



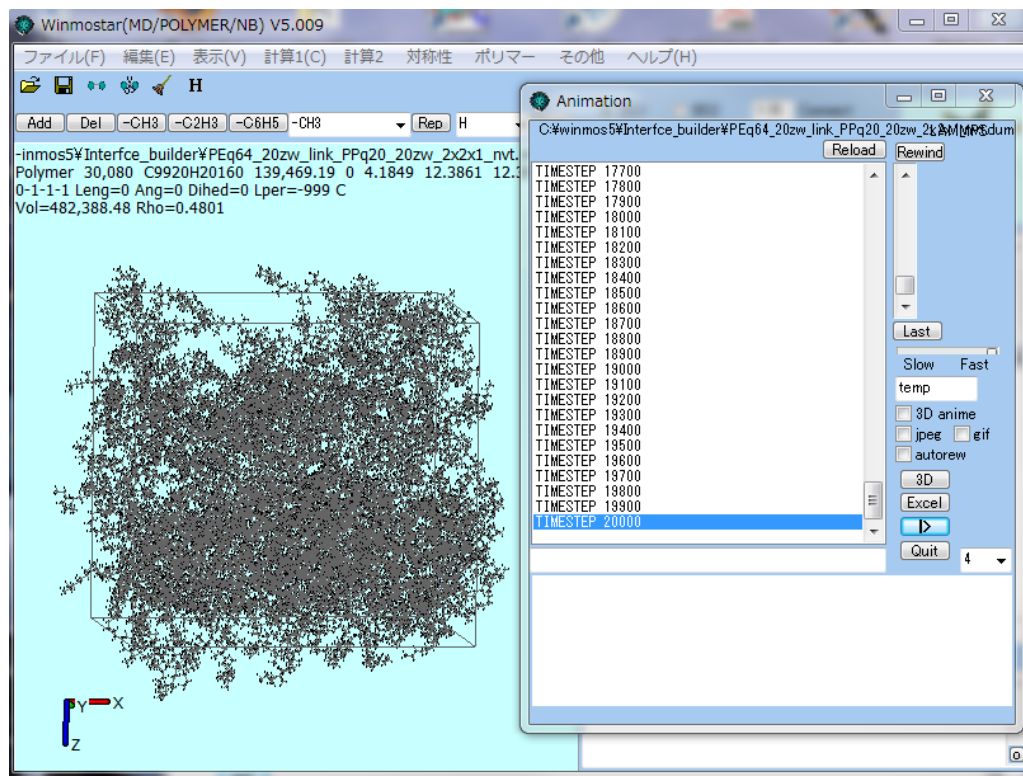
- ① [計算2]->[LAMMPS]->[トラジェクトリ読み込み]画面を開き、minimize結果の最終ステップの構造を表示させる。
- ② [ファイル]->[名前を付けて保存]で、拡張子選択で.mol2を選択し別名でファイルを保存する。
- ③ [計算2]->[LAMMPS]->[キーワード設定]画面を開き、Ensembleにnvtを選択し# of timestepsに20000と設定する。またOutput Intervalを調整する。
- ④ [Import]をクリックしてセル情報を反映させ、[Generate]をクリックした後、[OK]をクリックしキーワード設定画面を閉じる。
- ⑤ [計算2]->[LAMMPS]->[LAMMPS実行]を選択し、LAMMPSを起動する。

エネルギー変化の確認(温度一定MD)

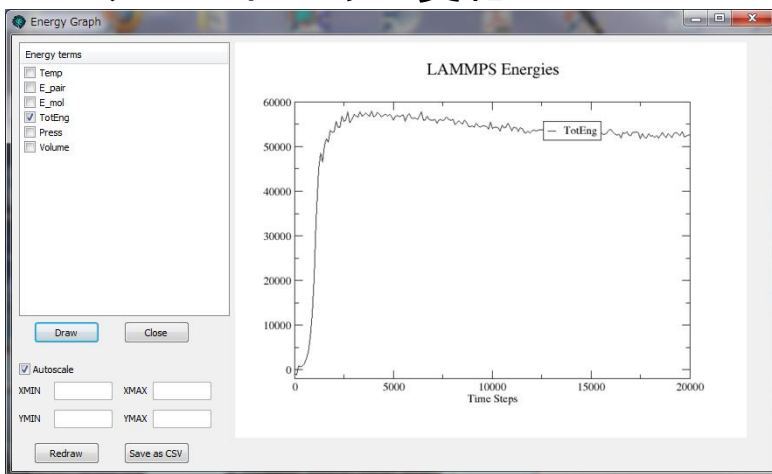
温度変化



トラジェクトリ

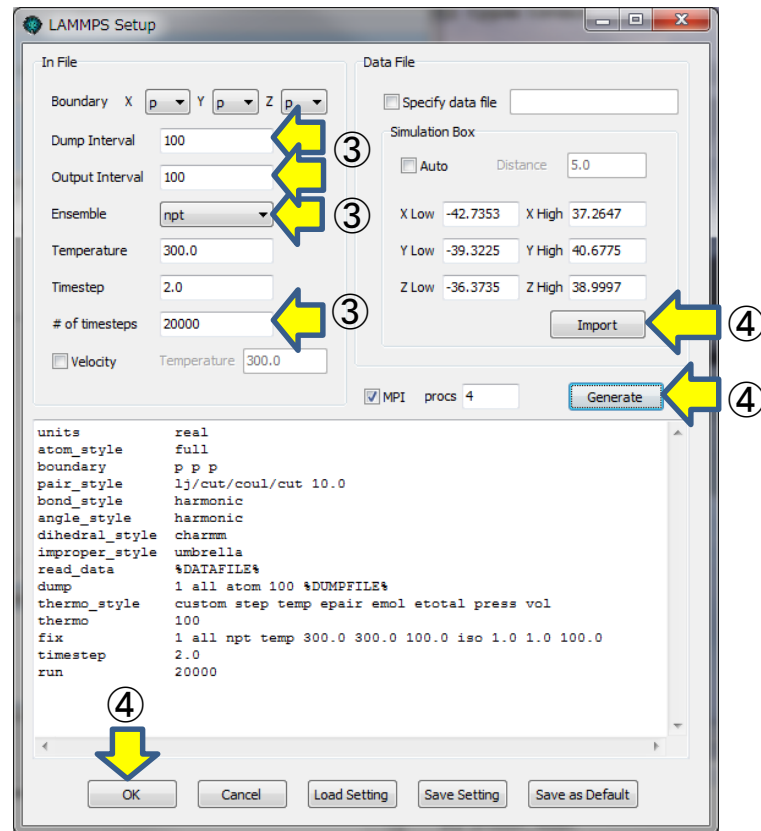
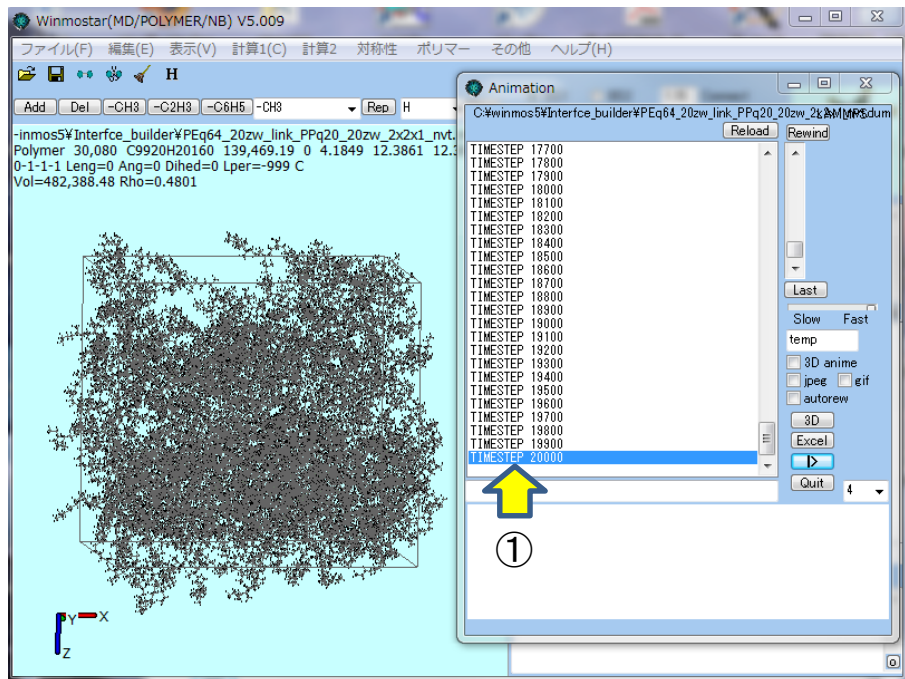


トータルエネルギー変化



- ① [計算2]->[LAMMPS]->[エネルギー変化]で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。

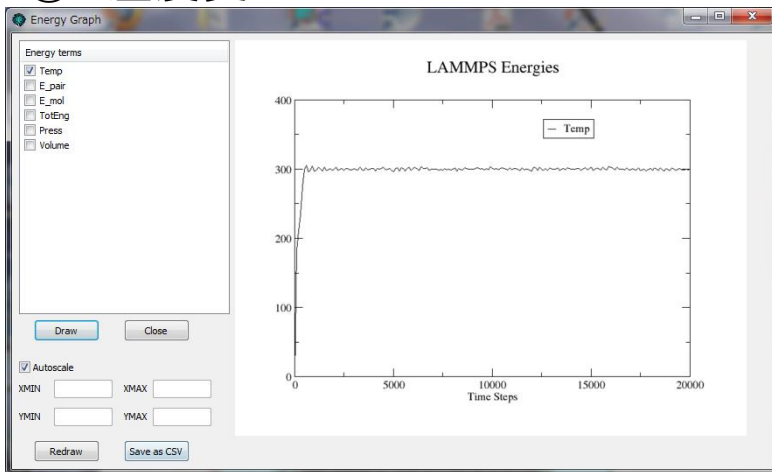
IX. LAMMPS実行3(温度・圧力一定MD)



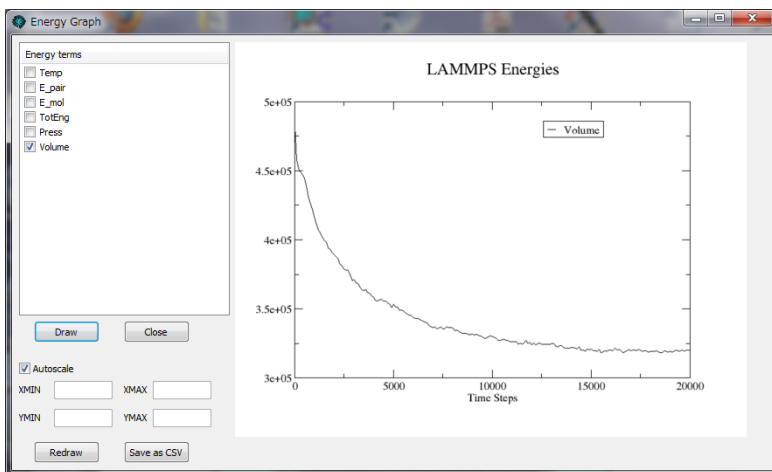
- ① [計算2]->[LAMMPS]->[トラジェクトリ読み込み]画面を開き、nvt結果の最終ステップの構造を表示させる。
- ② [ファイル]->[名前を付けて保存]で、拡張子選択で.mol2を選択し別名でファイルを保存する。
- ③ [計算2]->[LAMMPS]->[キーワード設定]画面を開き、Ensembleにnptを選択し# of timestepsを入力する。またOutput Intervalを調整する。
- ④ [Import]をクリックしてセル情報を反映させ、[Generate]をクリックした後、[OK]をクリックしキーワード設定画面を閉じる。
- ⑤ [計算2]->[LAMMPS]->[LAMMPS実行]を選択し、LAMMPSを起動する。

計算結果の確認(温度・圧力一定MD)

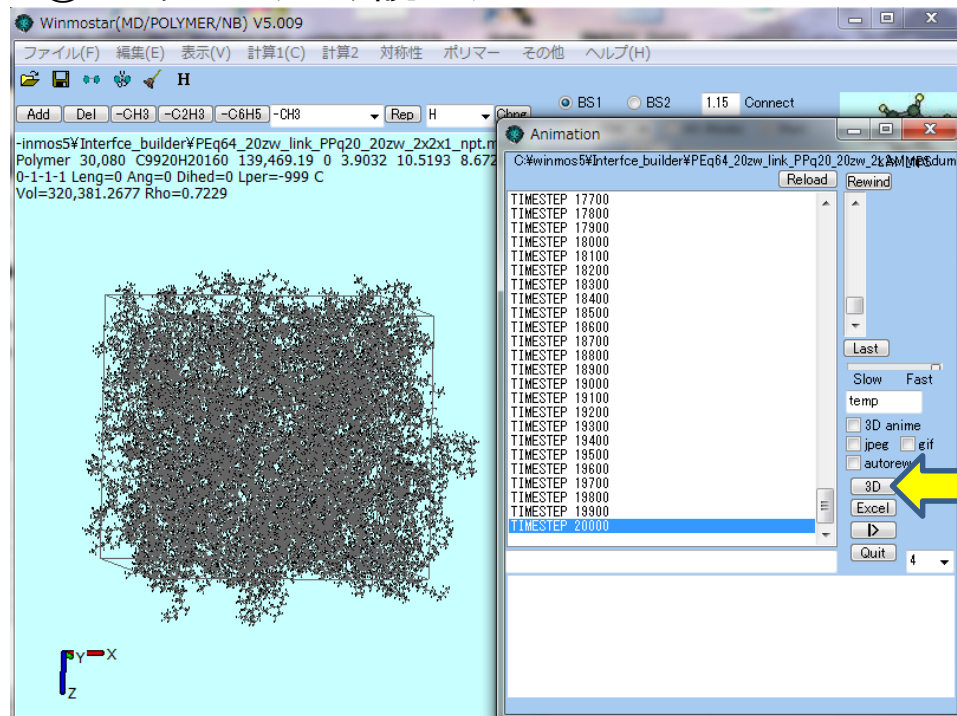
① 温度変化



① 体積変化

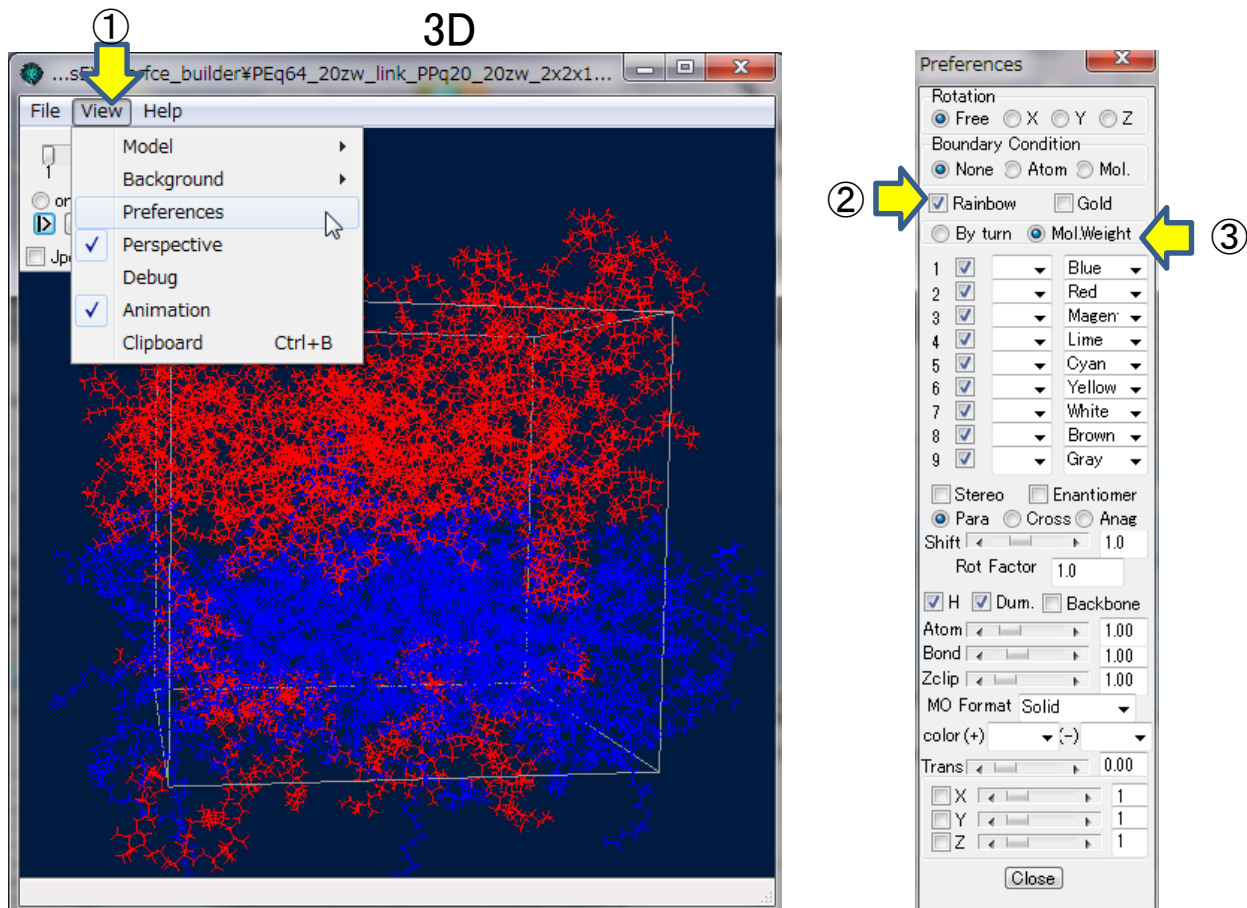


③ トラジェクトリ読み込み



- ① [計算2]->[LAMMPS]->[エネルギー変化]で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。
- ③ [3D]をクリックする(次スライド)

X. 3D表示(温度・圧力一定MD)



- ① [View]->[Preferences]を選択してPreferencesウインドウを起動する。
- ② [Rainbow]にチェックを入れる
- ③ Mol. Weightを選択する

