

Winmostar - LAMMPS

Tutorial 3

ポリマーモデリング

V6.016

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2016/06/10

修正履歴

2015/06/16版

- 初版

2016/06/10版

- V6.016対応
- 画面差し換え

ポリマーモデリングツール概要

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。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なく、“ある程度”コンパクトに詰まった集合構造となる。境界条件は、3次元周期境界と特定方向の壁(wall)境界を任意選択できる。

本チュートリアルのおおまかな流れは以下のとおりである。

①モノマー登録

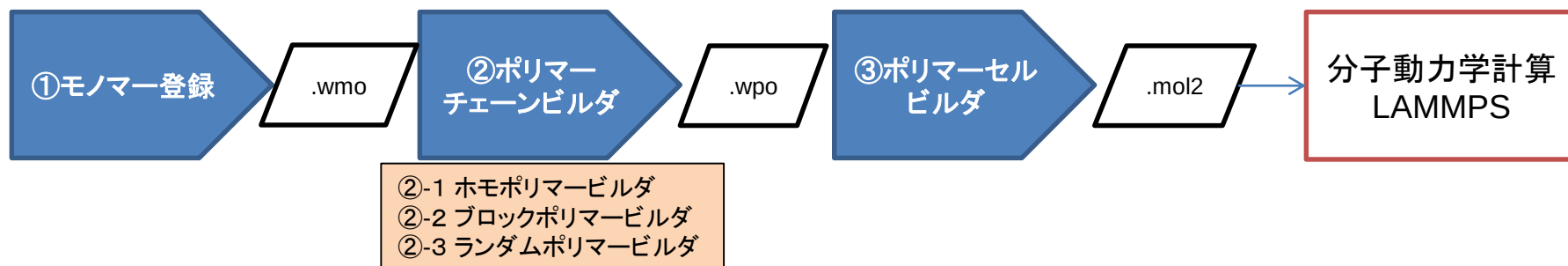
Winmostarの従来モデリング機能により作成した分子(モノマー)を「モノマー登録」ツールによりHead 原子(水素原子)とTail原子(水素原子)の情報を付加した“専用”ファイル(拡張子.wmo)として保存する。

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

- I. 環境設定
- II. モノマー登録
- III. 3種の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)

I. 環境設定

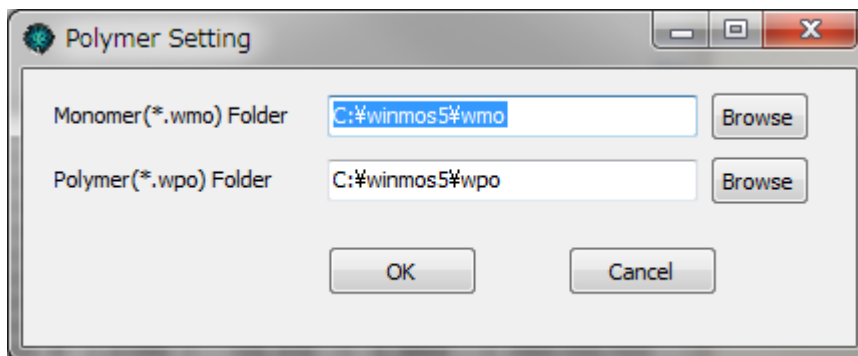
① LAMMPS及びcygwinの入手とセットアップ

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

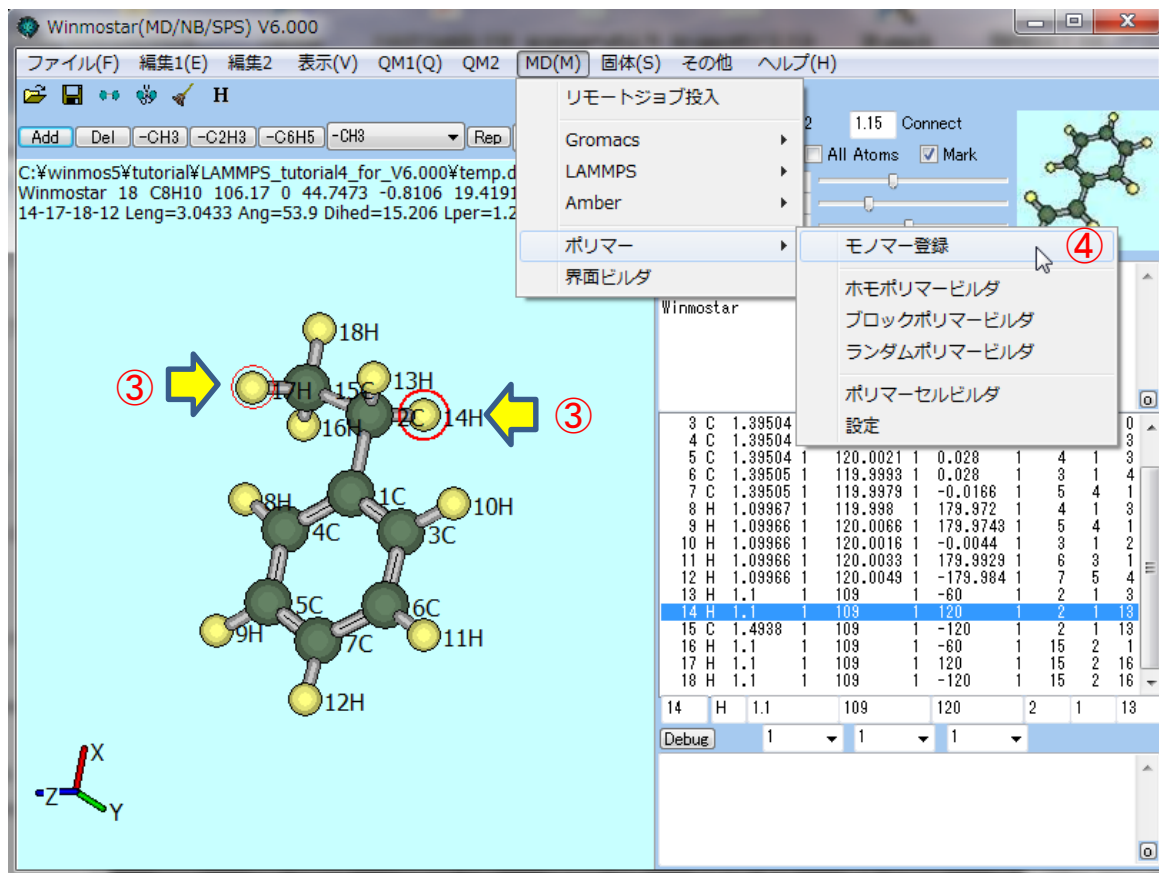
② ポリマータールの設定

[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. モノマー登録

- 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 [MD] -> [ポリマー] -> [モノマー登録]を立ち上げる。
- ⑤ [モノマー登録]画面でモノマー専用ファイル(拡張子.wmo)として保存する。



⑤ モノマー登録画面

Head : 17 Tail : 14

Name

III. 3種のポリマーチェーンビルダ

ホモポリマービルダ

- ① ポリマー鎖ファイル名(PS100)を入力する
- ② 重合度を指定する。
- ③ モノマーを選択する
- ④ Tacticityを選択する。さらにAtacticの場合はラセモ率*を指定する。
- ⑤ Head to TailかHead to Head (Tail to Tail)を選択する。
- ⑥ Buildをクリックするとポリマー鎖ファイルが生成する。

* ラセモ率: 0 (Isotactic) ~ 1.0 (Syndiotactic)

ブロックポリマービルダ

- ① ポリマー鎖ファイル名を入力する
- ② 先頭モノマーと末尾モノマーを指定する。
- ③ 中間モノマーとモノマー数を指定する
- ④ AddをクリックしListに登録する。
- ⑤ Buildをクリックするとポリマー鎖ファイルが生成する

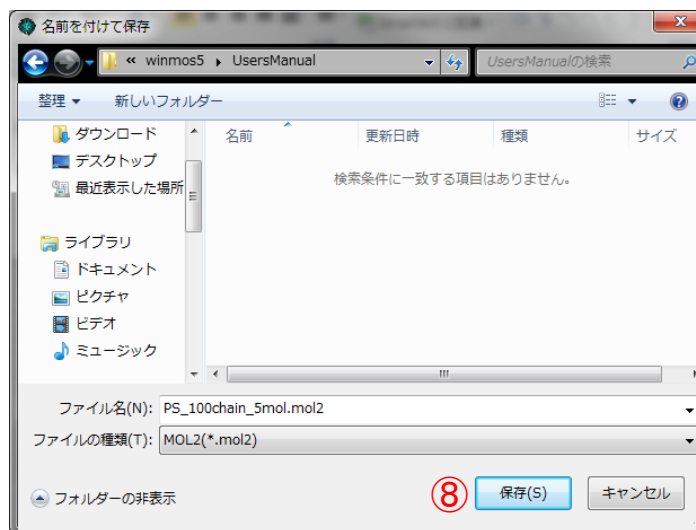
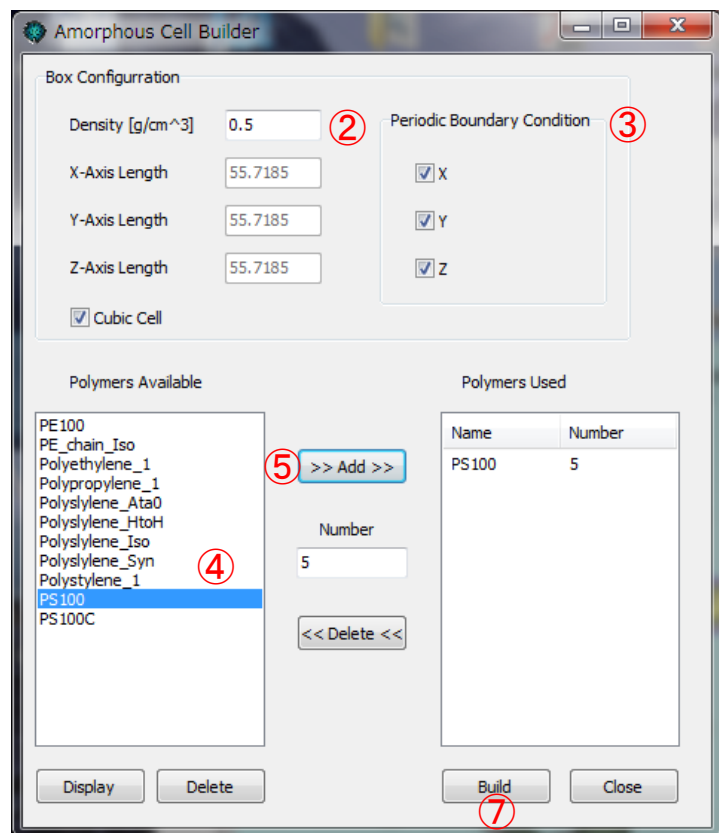
ランダムポリマービルダ

- 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。
- ③ 先頭モノマーと末尾モノマーを指定する。
- ④ 中間モノマーと比率*を指定する。
- ⑤ AddをクリックしListに登録する。
- ⑥ ③と④を繰り返す
- ⑦ Buildをクリックするとポリマー鎖ファイルが生成する。

* Probability of Each Monomer: 発生頻度
Proportion in Total Monomers: 存在率

以降、ホモポリマーを例に説明する

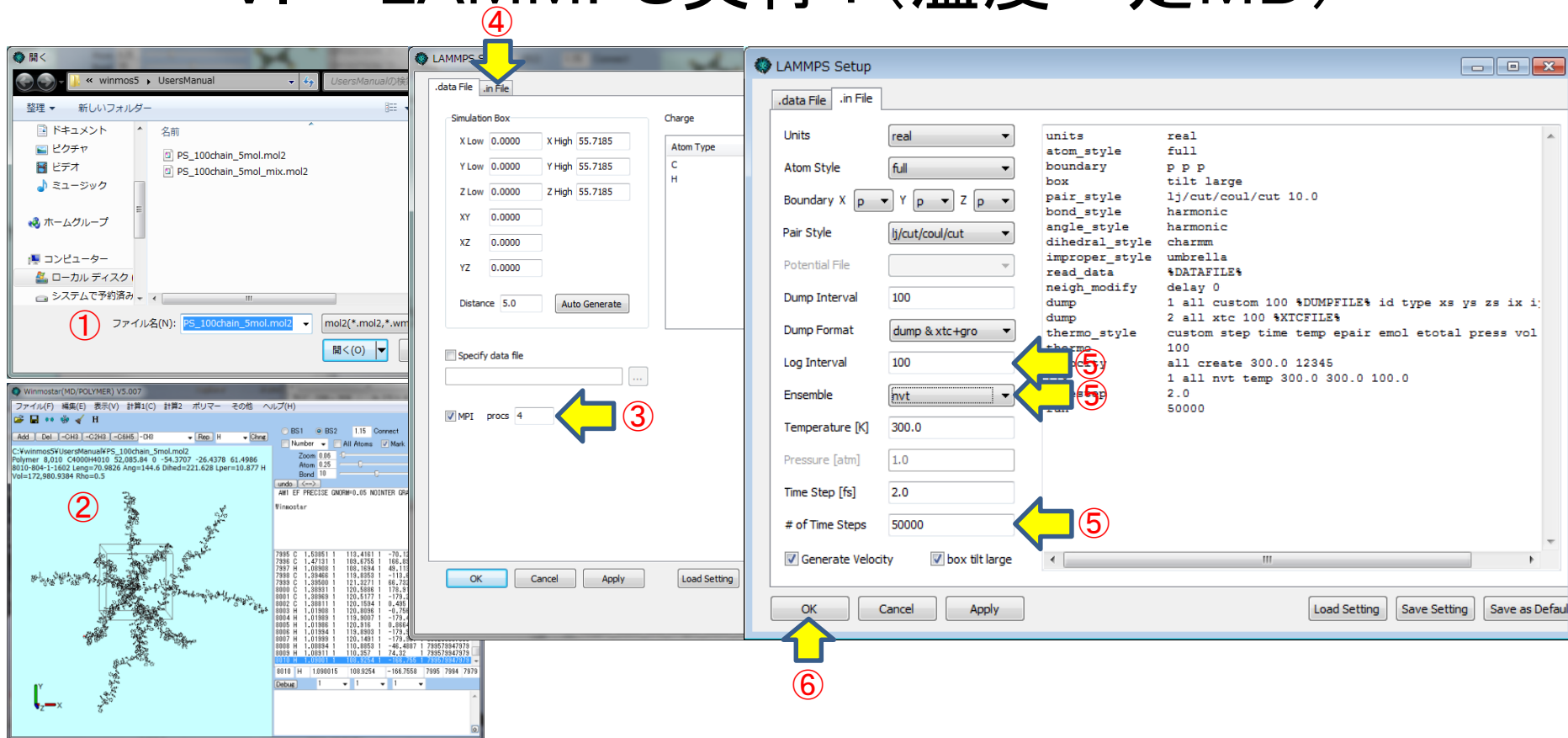
IV. ポリマーセルビルダ



- ① [MD] -> [ポリマー] -> [ポリマーセルビルダ]を立ち上げる。
- ② 密度に0.5と入力する。Cubic Cellにチェックを入れる。もしくはX軸長さ／Y軸長さを指定する。
- ③ 周期境界条件*を設定する。
- ④ 左リストからポリマー鎖名(PS100)を選択し、Numberに本数(5)を入力する。
- ⑤ Addをクリックし右リストに反映させる。
- ⑥ (必要に応じて③と④を繰り返す)
- ⑦ 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(PS_100chain_5mol)を入力する。
- ⑧ [保存]をクリックすると処理が開始する。処理には時間を要する場合がある。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。

* 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。

V. LAMMPS実行1(温度一定MD)

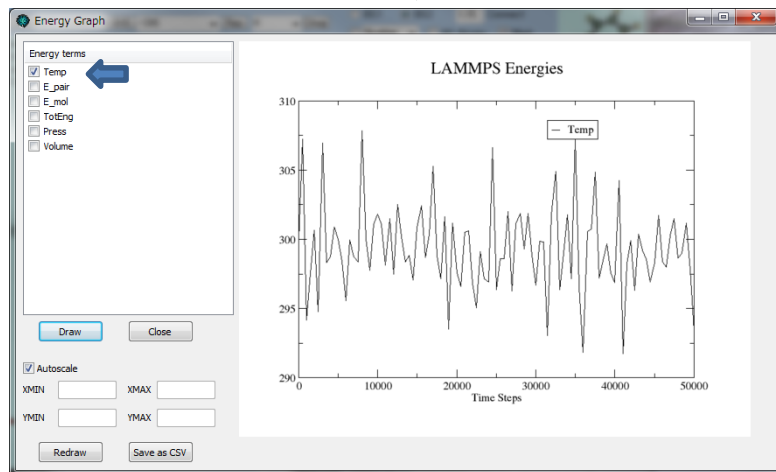


- ① Winmostarで[ファイル]->[開く]画面で、拡張子として.mol2を選択しポリマーツールで作成した.mol2ファイル(PS_100chain_5mol)を開く。
- ② 構造がWinmostarのモデリングウィンドウに表示される。
- ③ [MD]->[LAMMPS]->[キーワード設定]画面を開いて必要に応じてMPIにチェックを入れてprocを指定する。
- ④ [.in File]タブを表示させる。
- ⑤ Ensembleにnvtを選択し# of timestepsに50000と設定する。またlog Intervalを調整する。
- ⑥ [OK]をクリックしキーワード設定画面を閉じる。
- ⑦ [MD]->[LAMMPS]->[LAMMPS実行]を選択し、LAMMPSを起動する。

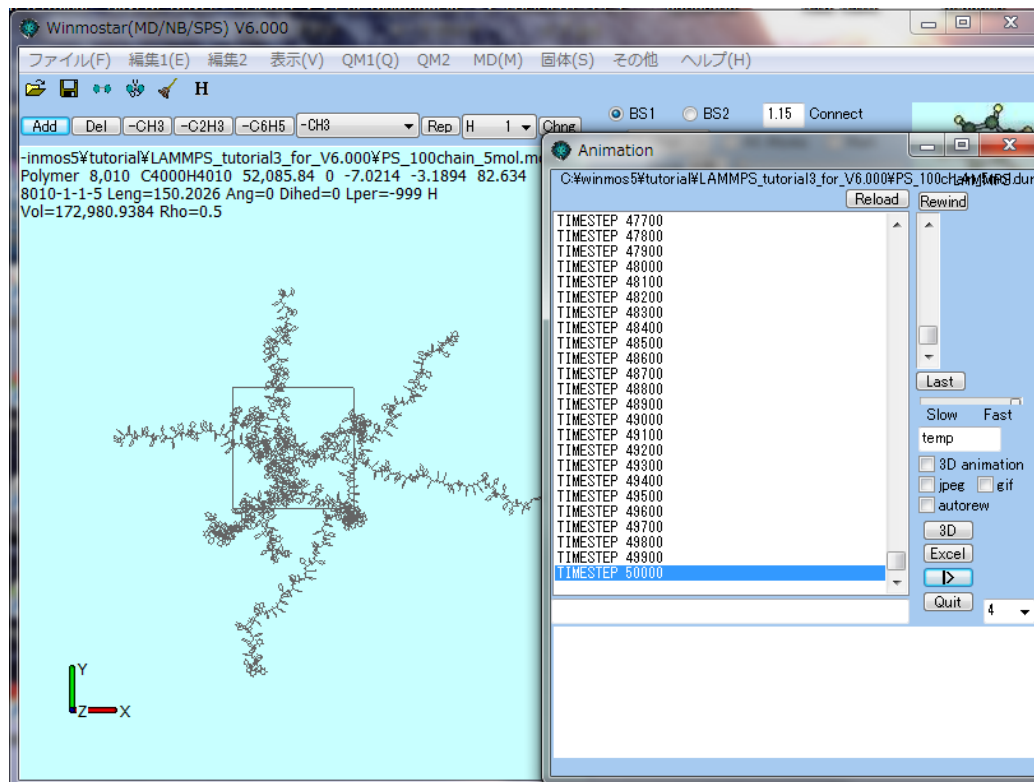
Total wall time: 0:31:06 by 4 MPI Core i5

①

温度

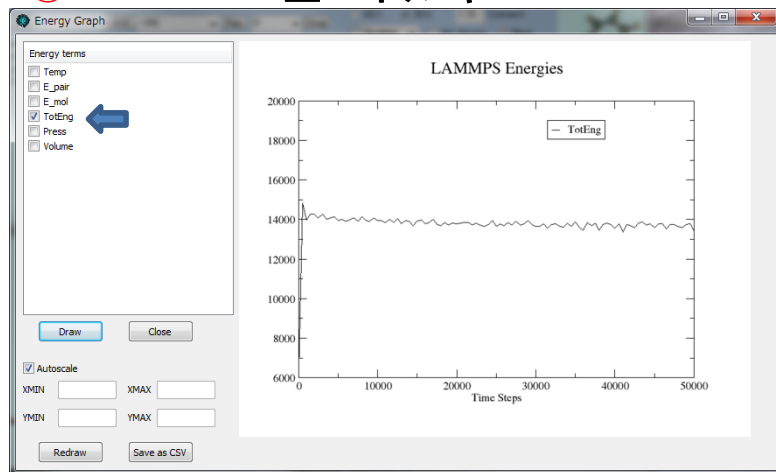


②



①

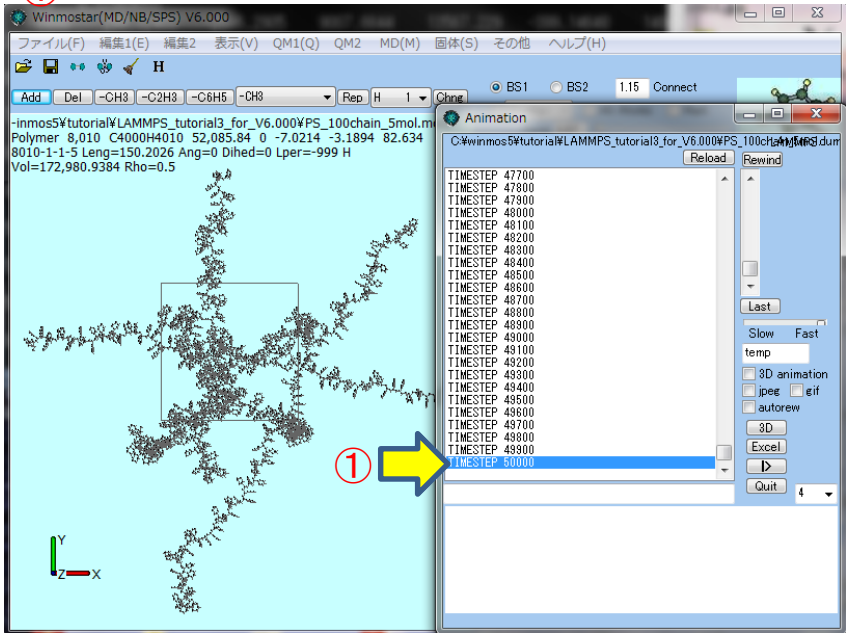
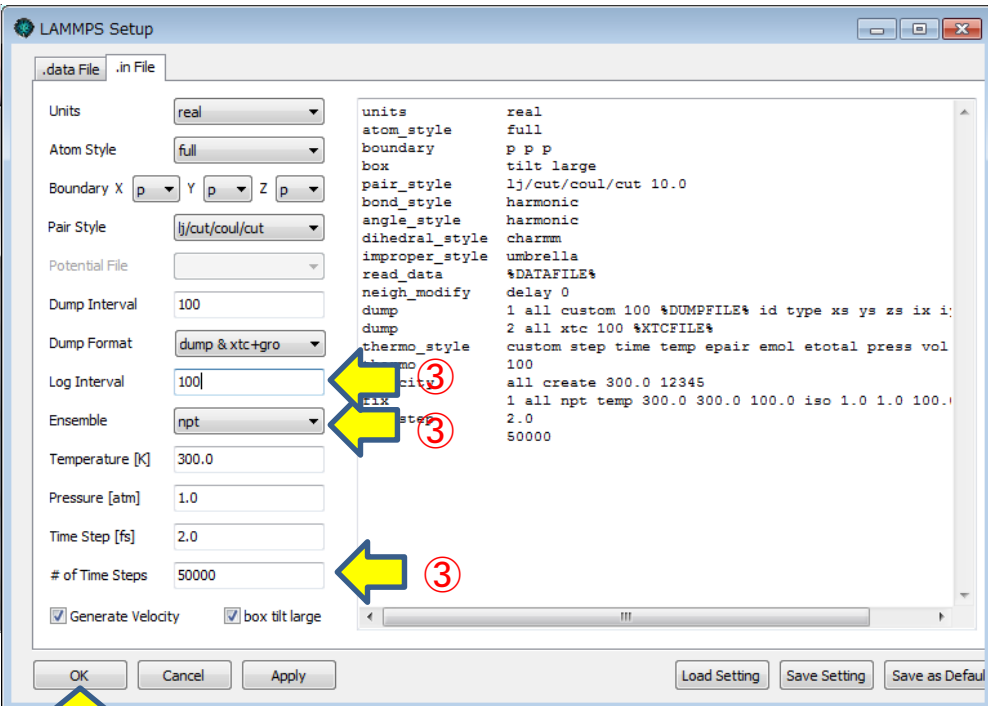
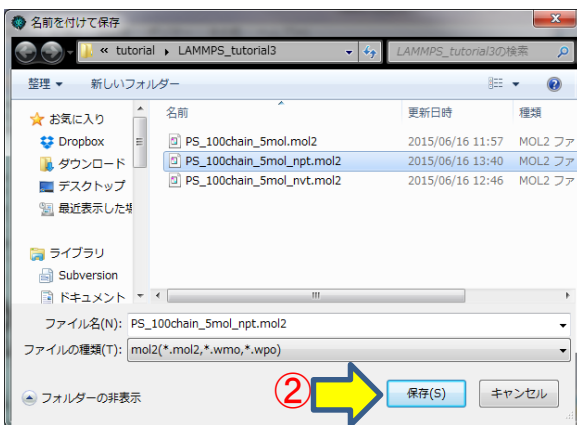
全エネルギー



- ① [MD]->[LAMMPS]->[エネルギー変化]で温度変化や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 [MD]->[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。

VI. LAMMPS実行2(温度圧力一定MD)

①

① [MD]->[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(PS_100chain_5mol_npt)でファイルを保存する。

③ [MD]->[LAMMPS]->[キーワード設定]画面を開き、Ensembleにnptを選択し# of timestepsに50000と設定する。またlog Intervalを調整する。

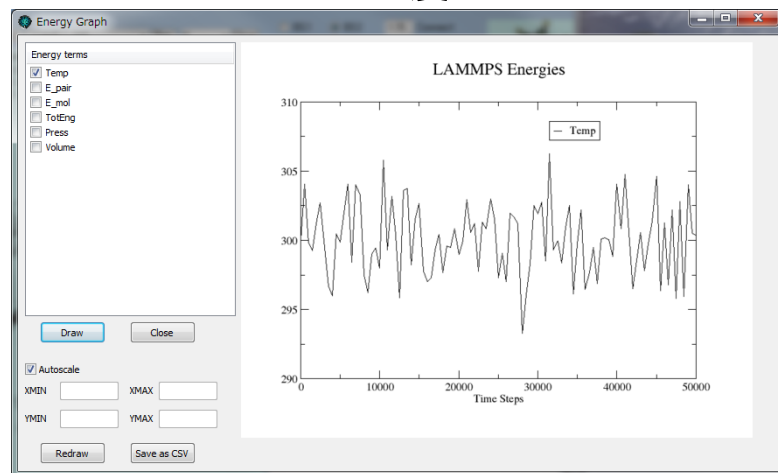
④ [OK]をクリックしキーワード設定画面を閉じる。

⑤ [MD]->[LAMMPS]->[LAMMPS実行]を選択し、LAMMPSを起動する。

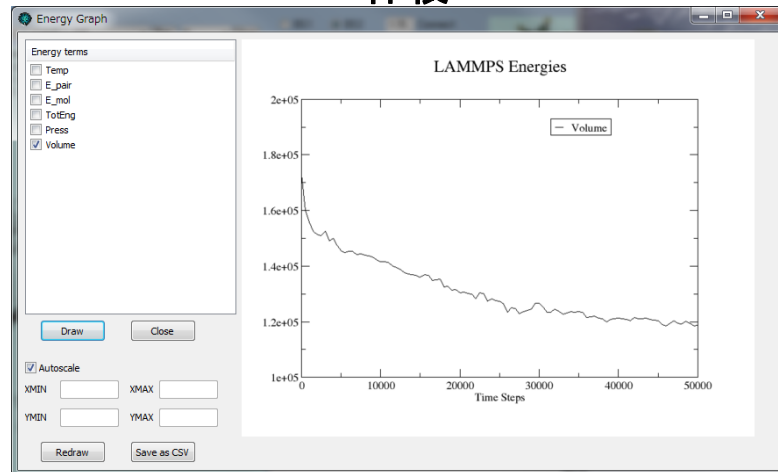
Total wall time: 0:34:45 by 4 MPI Core i5

①

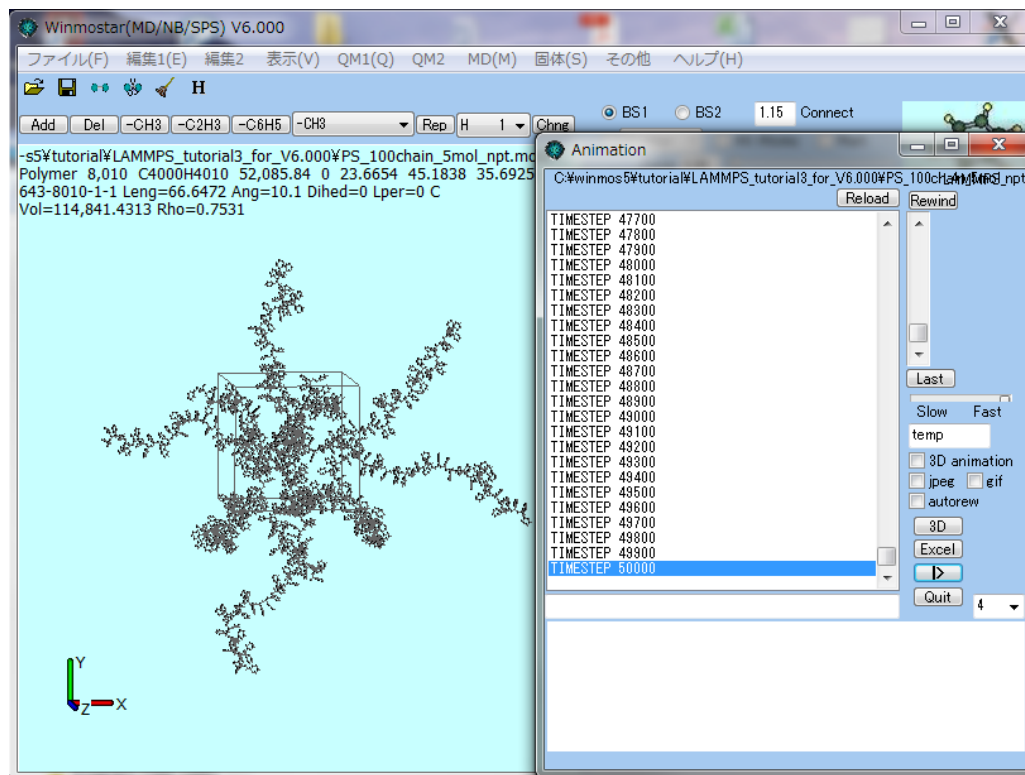
温度



体積



②



- ① [MD]->[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 [MD]->[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。

facebook アカウント登録

メールアドレスまたは携帯番号 パスワード

ログインしたままにする

X-Ability Co.,Ltd.
さんはFacebookを利用しています。
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の

アカウント登録 ログイン

X-Ability Co.,Ltd.
コンピュータ・テクノロジー

タイムライン 基本データ 写真 いいね! 動画

ユーザー

いいね! 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

デジタル投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30

最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。
http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_detailpage_o00_s00...

山口 達明

フロンティアオービタルによる新有機化学教程
フロンティアオービタルによる新有機化学教程
AMAZON.CO.JP

いいね! コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)
11月9日 21:38

いいね!