

Winmostar - LAMMPS

Tutorial 4

界面ビルダ

V6.006

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2016/2/18

修正履歴

2015/10/02版

- V6初版

2016/2/18版

- (スライド11, 12, 14)LAMMPS キーワード設定画面の差替え

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にしているが対象となる系は分子から成る液体系や無機／金属結晶の固固界面、固液界面、液液界面などであってもよい。貼り合わせる各々のセルはMD計算などで緩和された構造のものを用いるのが基本である。周期境界条件の制限から、接合面の形状は合同でなくてはならないが、わずかに異なる場合は自動調整機能により貼り合わせが可能となる。

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 接合用セルを作製
2種のポリマーについて各々ポリマーセルビルダを用いてモデリングを行い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。
- ⑤ 作成したポリマー界面系についてLAMMPSを用いた分子動力学計算を実行する。

①接合用セルを作製

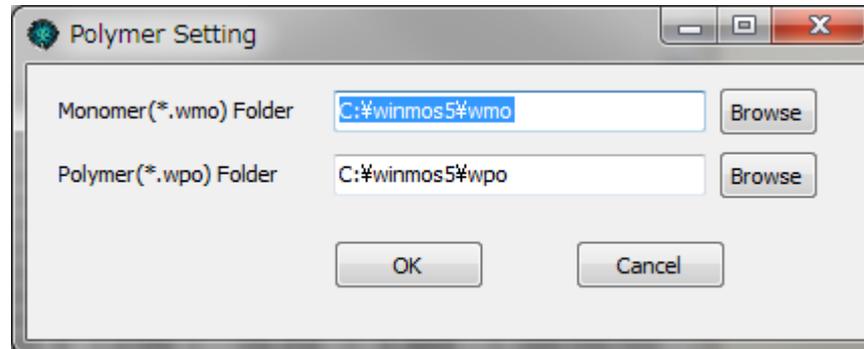


Contents

- 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)

1. 環境設定

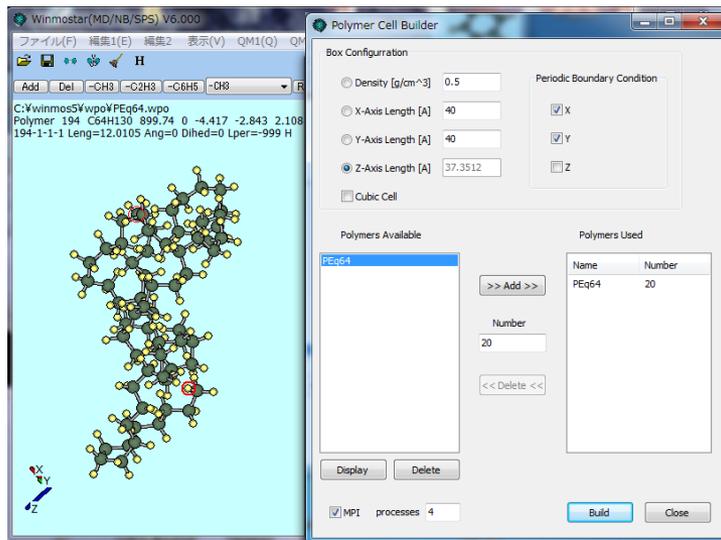
- ① LAMMPS及びcygwinの入手とセットアップ
LAMMPSのサイトからLAMMPSを入手する。さらにX-abilityのサイトからcygwin_wmを入手しセットアップを実施する。詳細は以下のリンク先を参照のこと。
http://winmostar.com/jp/LAMMPS_install_manual_jp_win.pdf
- ② ポリマーツールの設定
[MD]->[ポリマー]->[設定]画面(下図)で、必要に応じてモノマー用専用”ファイル(拡張子 .wmo)とポリマー鎖専用ファイル(拡張子 .wpo)の格納フォルダを指定する(デフォルトのままでも良い)。



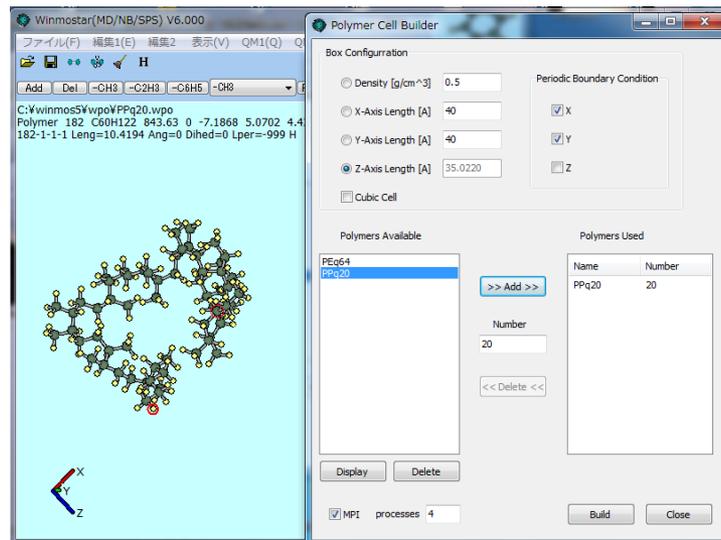
II. ポリマーセルビルダを用いた接合用セルの作製

- 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



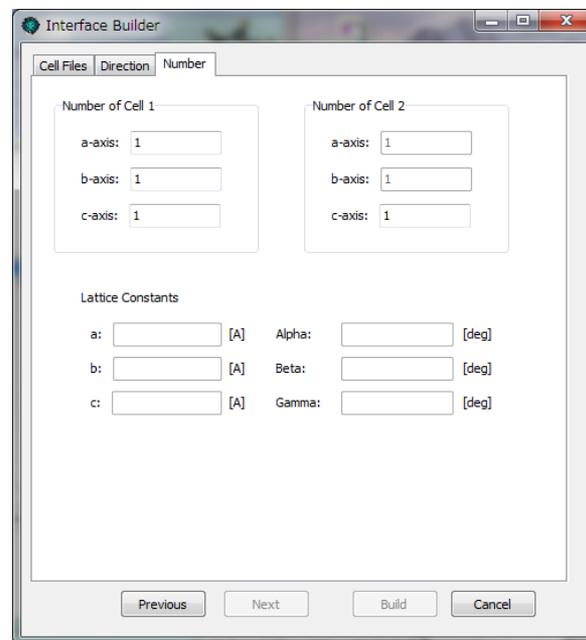
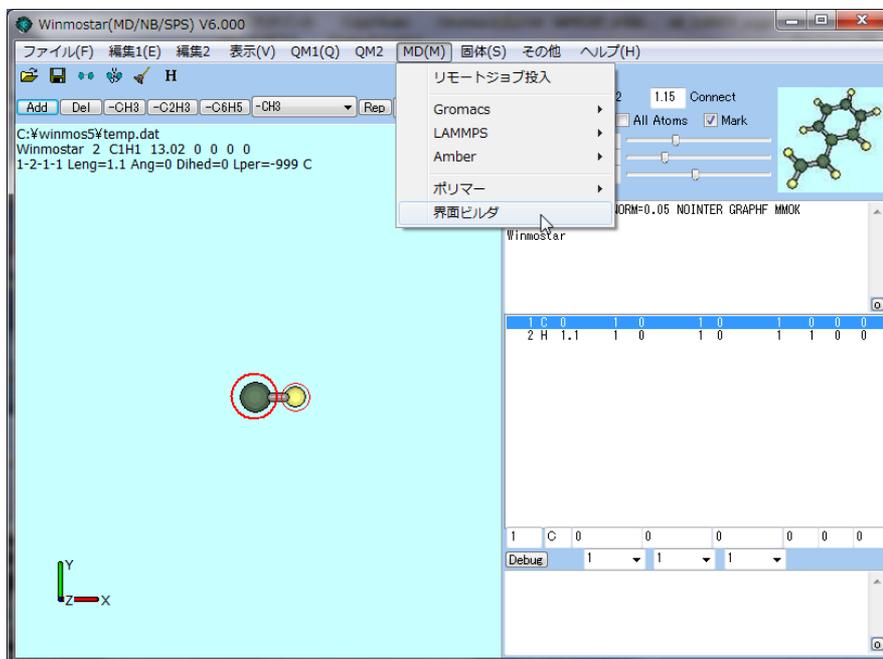
- [モノマー登録]機能を用いて電荷情報を有するポリエチレンモノマー(ファイル名:PEq)を登録する。
- [ホモポリマービルダ]を用いて**64量体のPE鎖**を作成し登録する(PEq64)。(DisplayをクリックするとPE鎖が表示され、確認できる)
- [ポリマーセルビルダ]を起動し(左図)、密度を0.5としX-Axis LengthとY-Axis Lengthを40Åに設定する。
- 周期境界条件のZのチェックを外す*1。
- 左リストからポリマー鎖名PEq64を選択しNumberに20と入力する。
- Addをクリックし右リストに反映させる。
- (MPI版LAMMPSの場合) MPIのチェックを入れ、proc(core数)を指定する。
- 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*2。得られたアモルファス構造は自動的に表示され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)。
- [ポリマーセルビルダ]を用いてNumberに20と入力し(右図)アモルファス構造を作成し保存する(PPq20_20zw)。

*1 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。

*2 処理に時間がかかることがある(数分)

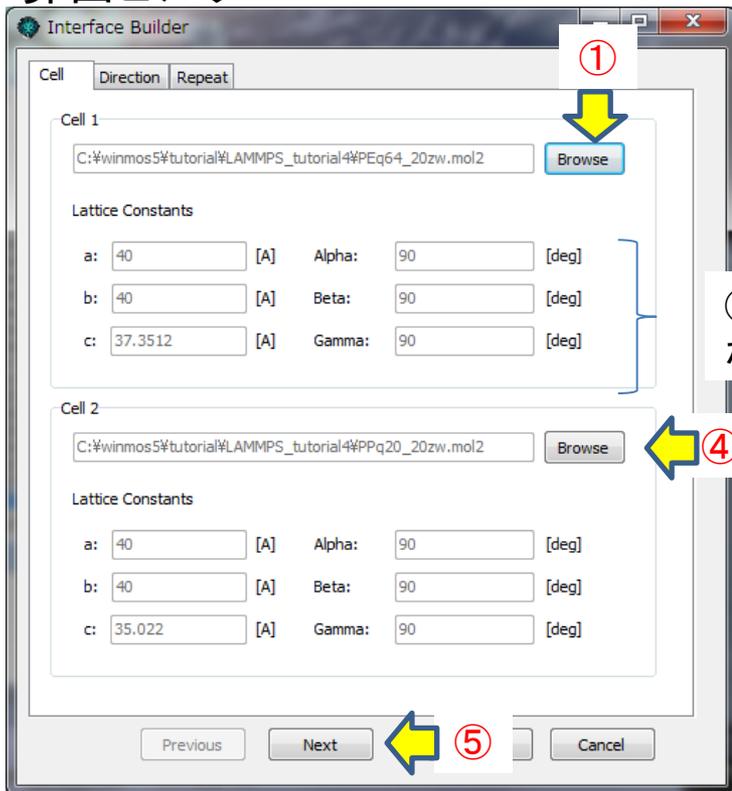
III. 界面ビルダーの呼び出し

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

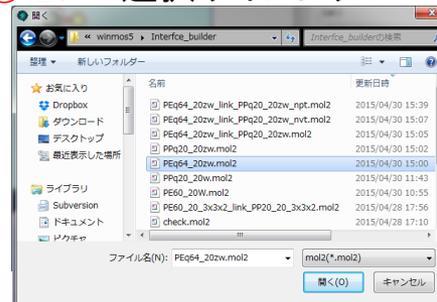


IV. MDセル選択

界面ビルダ

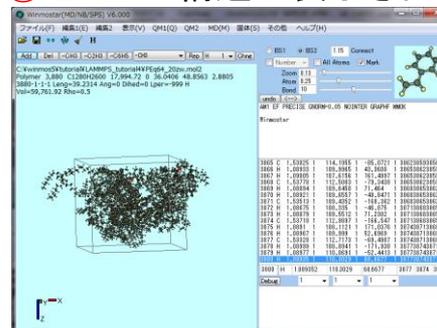


②セル1選択ウインドウ



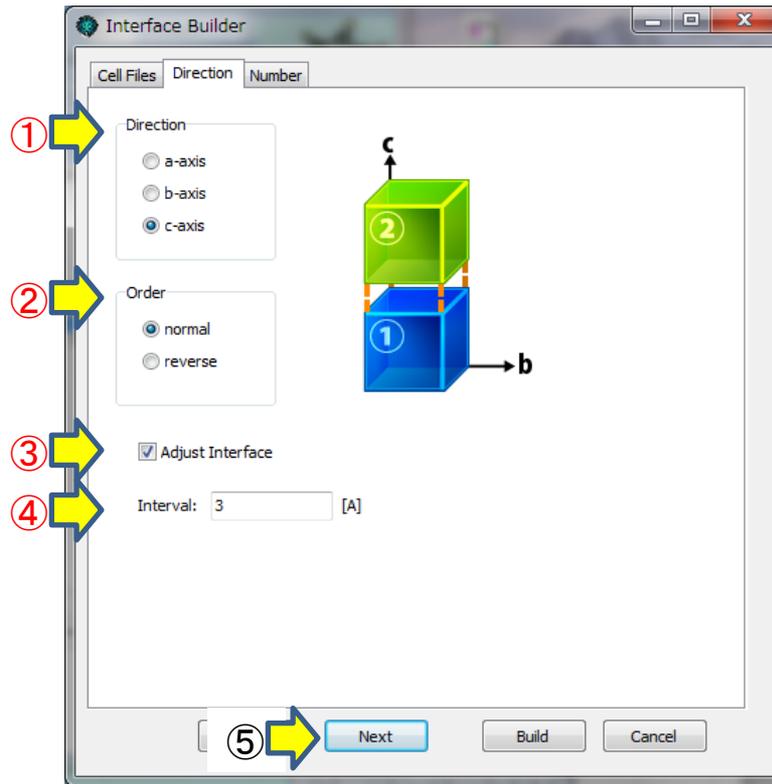
③セル1のセル定数が表示される

③セル1の構造が表示される



- ① Cell 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 Cell 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 Cell 2の[Browse]をクリックし、PPセルのファイル (PPq20_20zw.mol2)を選択する。
- ⑤ [Next]をクリックする(次スライド)。

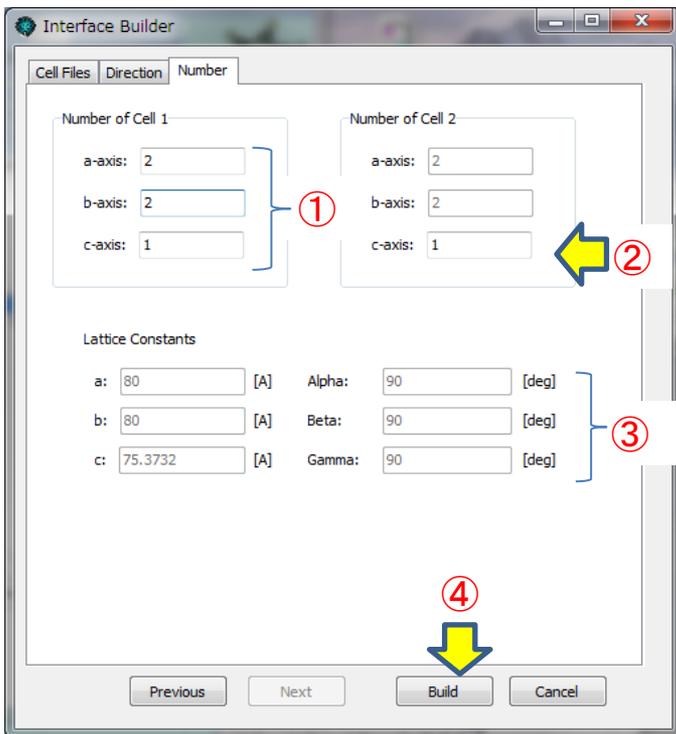
V. 接合方向と接合面の指定



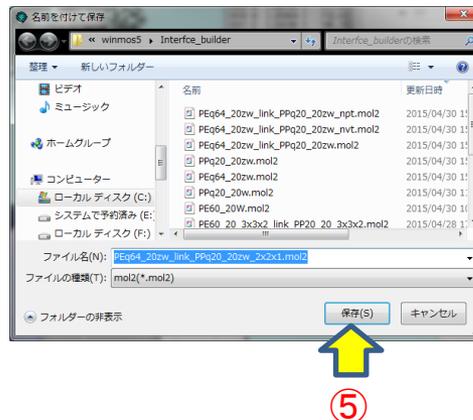
- ① Directionで貼り合わせる方向をc-axisに指定する。
- ② Orderで貼り合わせる面を選択する。
- ③ 接合面が完全一致していない場合はAdjust Interfaceにチェックを入れる。
- ④ Interval貼り合わせる2つのセルの間隔を3Åに設定する。
- ⑤ [Next]をクリックする(次スライド)。

VI. 各セルの積層数と間隔指定

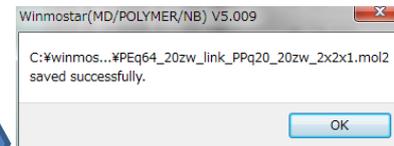
界面ビルダ



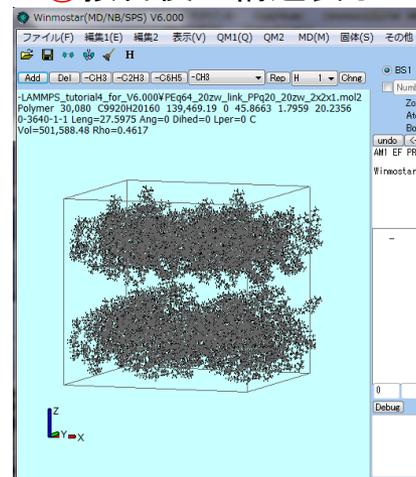
④接合後のファイル名を入力



⑤正常終了メッセージ



⑥接合後の構造表示



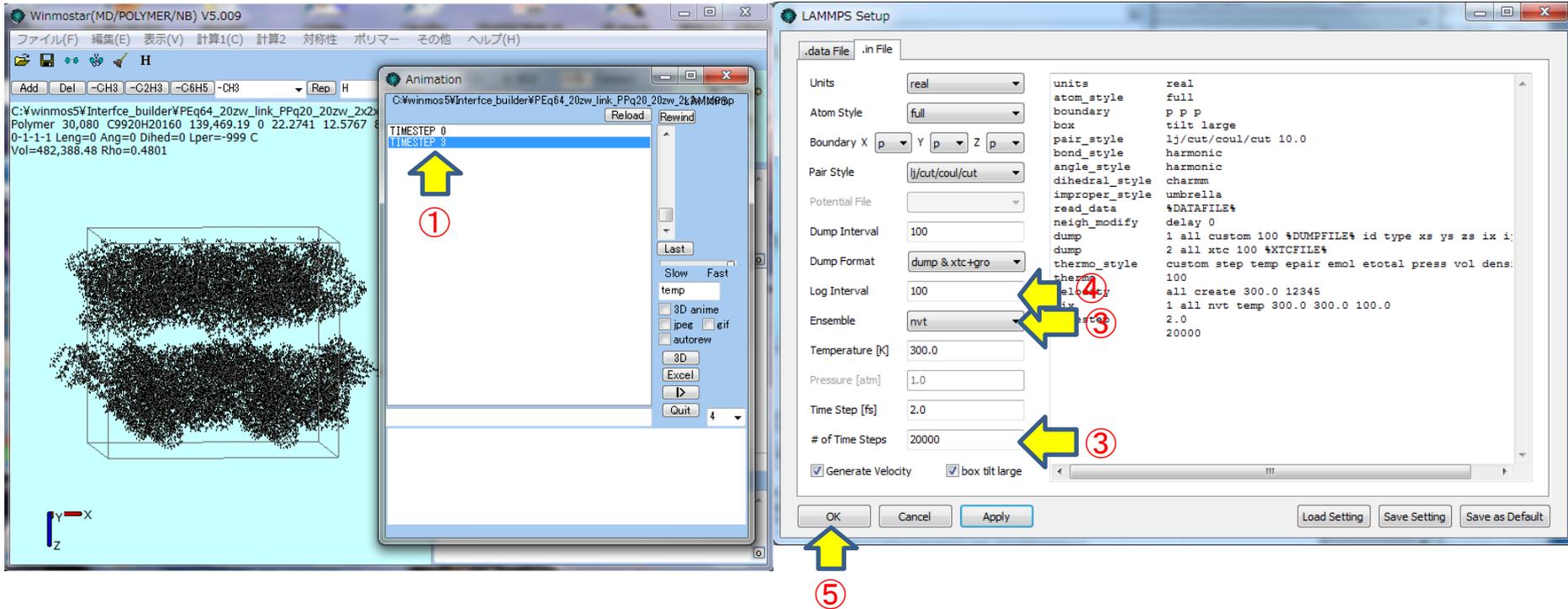
- ① Number of Cell 1のa-axis, b-axis, c-axisにそれぞれ積み重ね数を入力する。
- ② Number of Cell 2に積み重ね数を入力する。なお指定した積層方向に応じて指定可能な軸は変化する。
- ③ Lattice Constantsにセル定数が表示される。
- ④ [Build]をクリックし、接合後のファイル名(PEq64_20zw_link_PPq20_20zw_2x2x1)を入力する。
- ⑤ [保存]をクリックすると接合が実行され、正常終了した旨のメッセージウインドウが表示される。[OK]をクリックする。
- ⑥ Winostarのモデリン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

VII. LAMMPS実行1 (minimize)

The image shows a sequence of steps for running LAMMPS. On the left, the Winmostar interface displays a molecular model. On the right, the LAMMPS Setup dialog box is shown with several settings: Units (real), Atom Style (full), Boundary (p p p), Pair Style (lj/cut/coul/cut), Ensemble (minimize), and Log Interval (1). Red circles with numbers 1 through 4 indicate specific actions: 1. Opening the file menu in Winmostar; 2. Checking 'Specify data file' in LAMMPS Setup; 3. Selecting the '.in File' tab; 4. Selecting 'minimize' as the ensemble.

- 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 [MD]->[LAMMPS]->[キーワード設定]画面を開いて[.data File]タブを表示させ、必要に応じてMPIにチェックを入れてprocを指定する。
- ③ [.in File]タブを表示させる。
- ④ [Ensemble]でminimizeを選択した後、[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。
- ⑥ [MD]->[LAMMPS]->[エネルギー変化]のTotEngの変化など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)

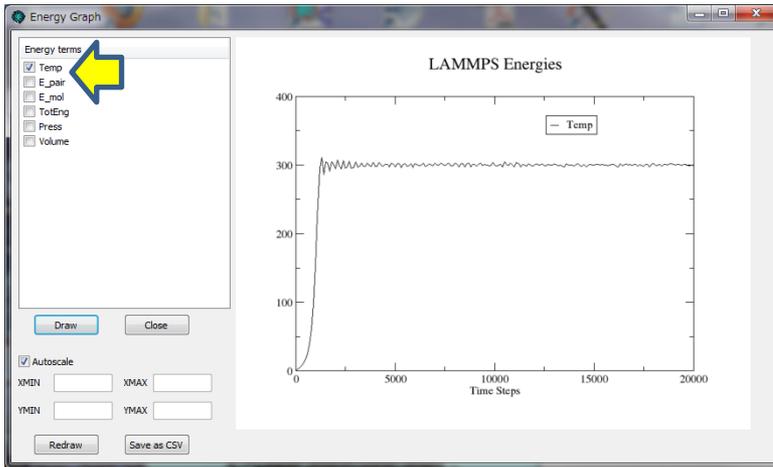


- ① [MD]->[LAMMPS]->[トラジェクトリ読み込み]画面を開き、minimize結果の最終ステップの構造を表示させる。
- ② [ファイル]->[名前を付けて保存]で拡張子選択で.mol2を選択し別名(PEq64_20zw_link_PPq20_20zw_2x2x1_nvt)でファイルを保存する。
- ③ [MD]->[LAMMPS]->[キーワード設定]画面を開き、Ensembleにnvtを選択し# of timestepsに20000と設定する。
- ④ Log Intervalを調整する。
- ⑤ [OK]をクリックしキーワード設定画面を閉じる。
- ⑥ [MD]->[LAMMPS]->[LAMMPS実行]を選択し、LAMMPSを起動する。

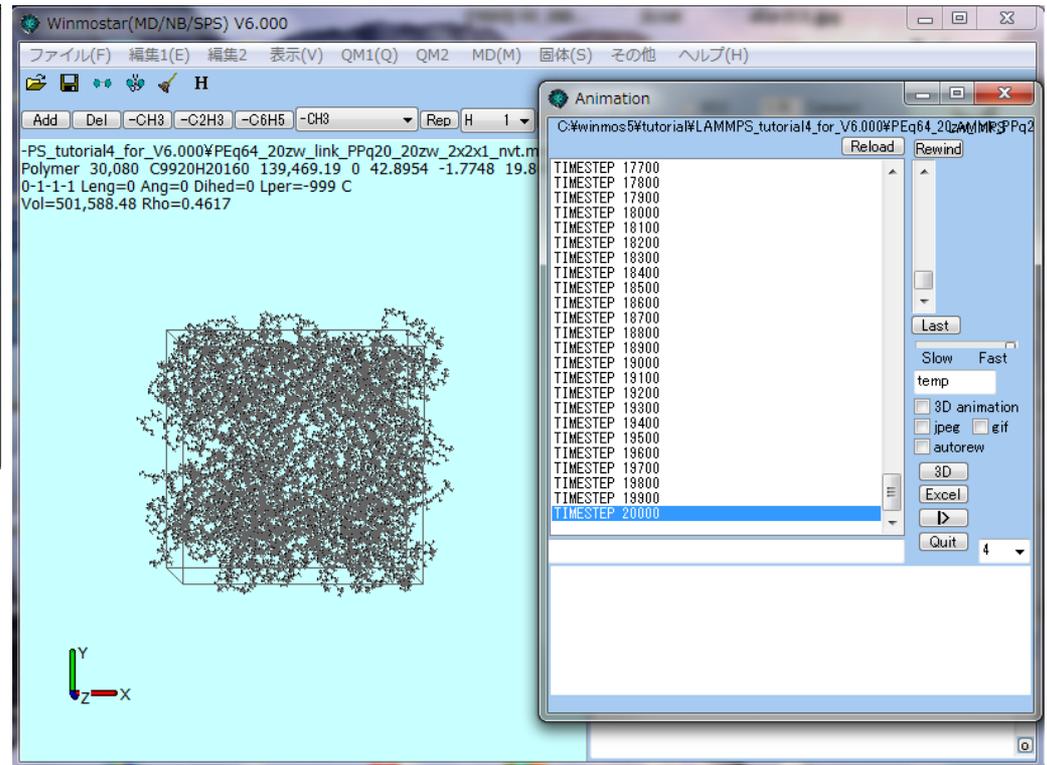
Total wall time: 0:56:18 by 4 MPI Core i5

エネルギー変化の確認(温度一定MD)

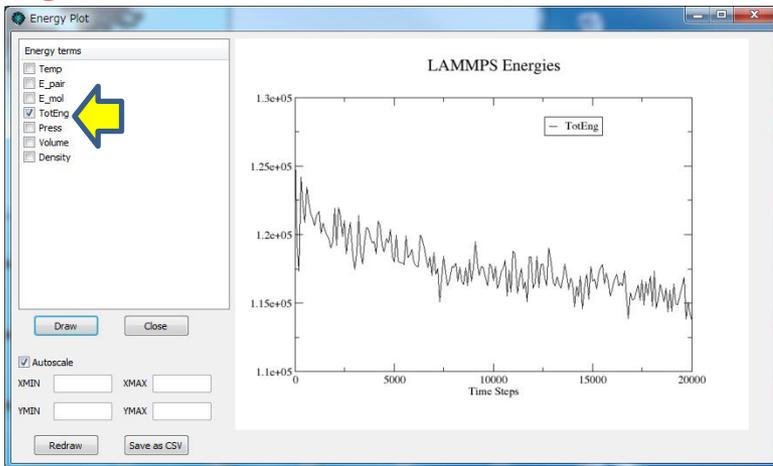
① 温度変化



② トラジェクトリ

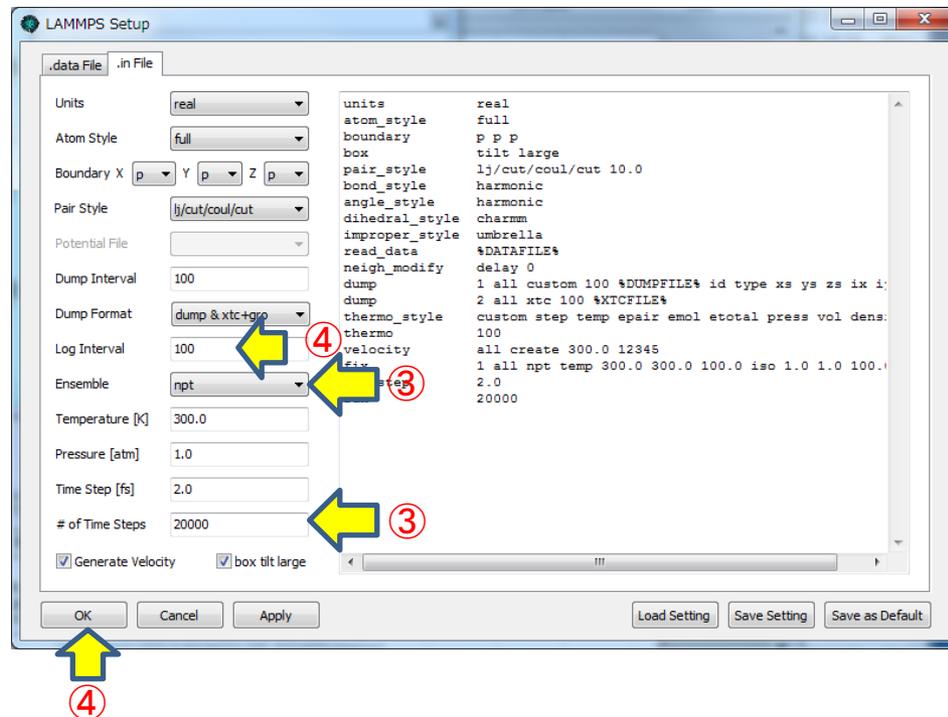
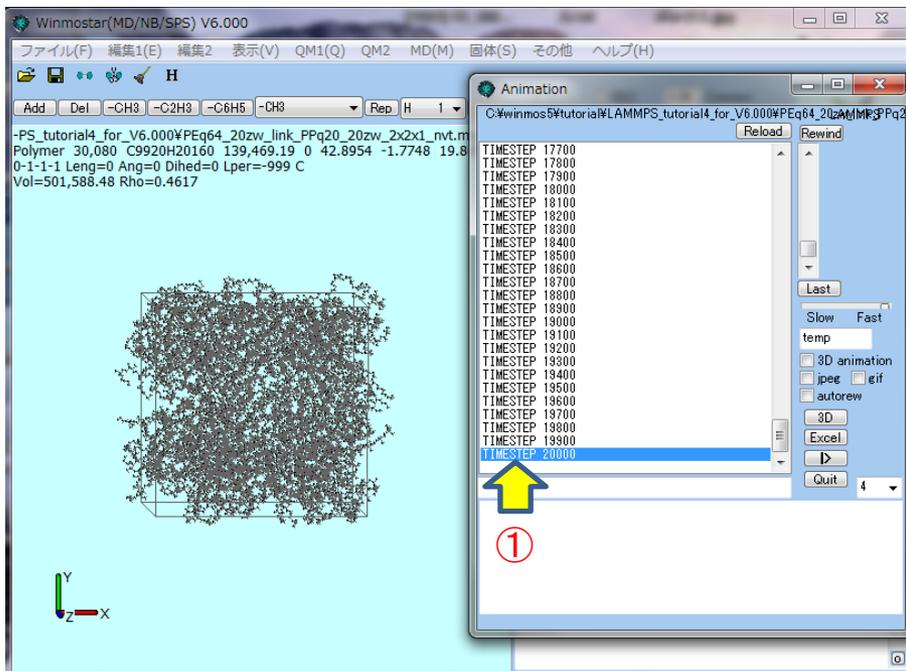


① トータルエネルギー変化



- ① [MD]->[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 [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。

IX. LAMMPS実行3 (温度圧力一定MD)

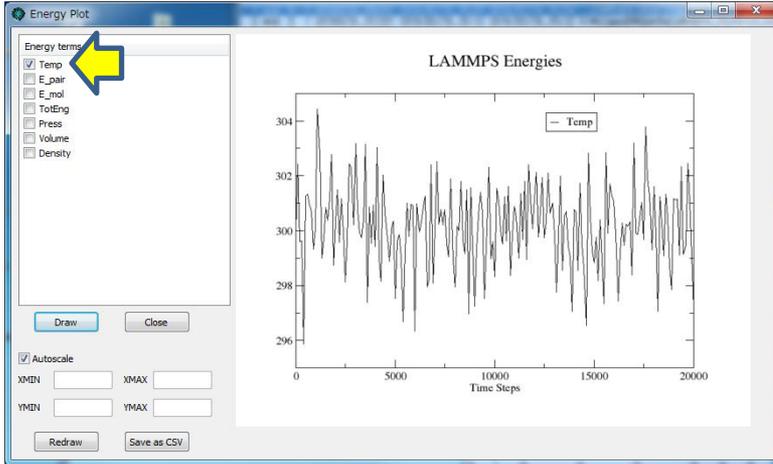


- ① [MD]->[LAMMPS]->[トラジェクトリ読み込み]画面を開き、nvt結果の最終ステップの構造を表示させる。
- ② [ファイル]->[名前を付けて保存]で拡張子選択で.mol2を選択し別名 (PEq64_20zw_link_PPq20_20zw_2x2x1_npt) でファイルを保存する。
- ③ [MD]->[LAMMPS]->[キーワード設定]画面を開き、Ensembleにnptを選択し# of timestepsに20000と設定する。
- ④ Log Intervalを調整する。
- ⑤ [OK]をクリックしキーワード設定画面を閉じる。
- ⑥ [MD]->[LAMMPS]->[LAMMPS実行]を選択し、LAMMPSを起動する。

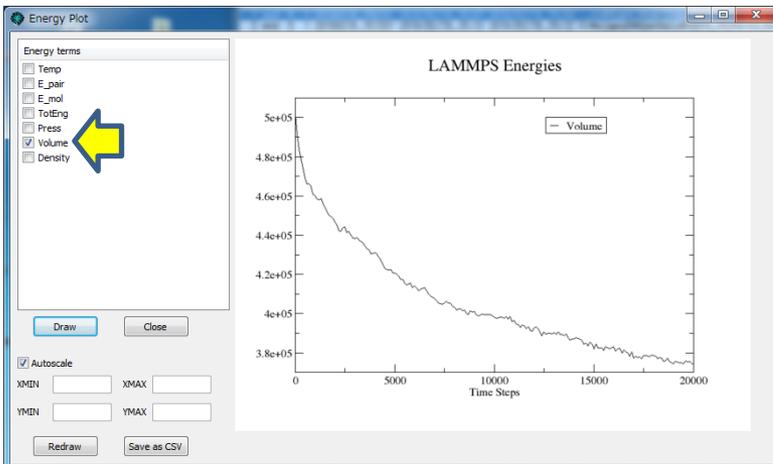
Total wall time: 0:47:26 by 4 MPI Core i5

計算結果の確認(温度圧力一定MD)

① 温度変化



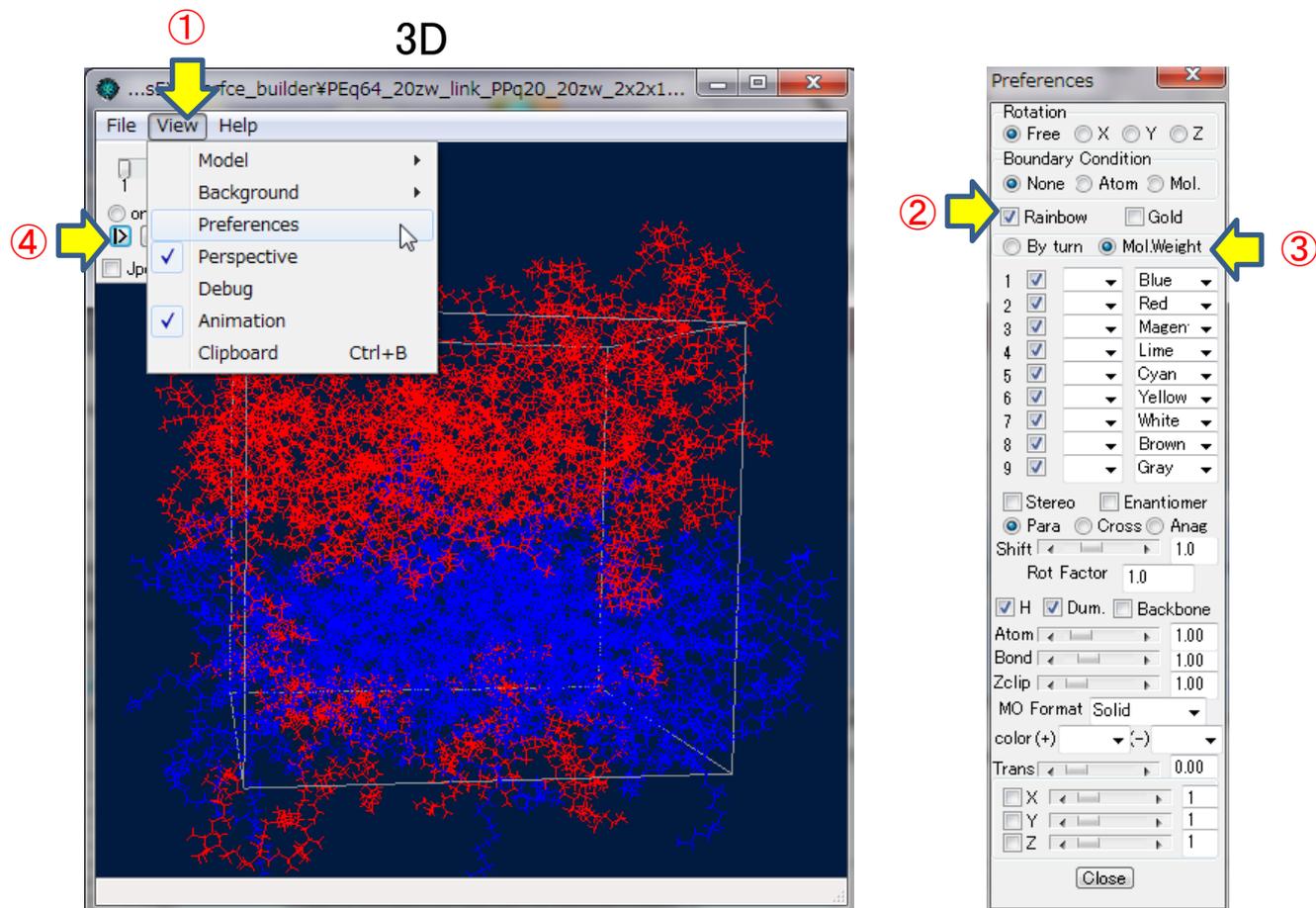
① 体積変化



③ トラジェクトリ読み込み

- ① [MD]->[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 [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。
- 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
- ④ 再生ボタンをクリックする。

