

Winmostar チュートリアル  
LAMMPS  
ポリマーモデリング/ガラス転移温度  
V7.016

株式会社クロスアビリティ  
[question@winmostar.com](mailto:question@winmostar.com)

2017/3/30

# Contents

## 環境設定

- I. モノマーを登録
- II. ポリマーを定義
- III. 系を作成
- IV. 平衡化計算
- V. アニールリング計算

# 注意点

- 分子の種類、初期密度に応じて平衡化に必要なステップ数は変化します。
- 相互作用の計算方法、力場、電荷の算出方法も結果に影響を与えます。
- 重合度(鎖長)、降温(昇温)速度も結果に影響を与えます。
- チュートリアルという性質上、ここではポリマー系の平衡化に十分なステップ数の計算を実施しません。

# 環境設定

- LAMMPS及びCygwinの入手とセットアップ  
以下のリンク先の「Windows版LAMMPSのインストール手順」に従い、LAMMPSおよびCygwinをセットアップする。

[https://winmostar.com/jp/manual\\_jp.html](https://winmostar.com/jp/manual_jp.html)

2. 計算エンジンのインストール

Windows版

[cygwin\\_wm\\_v7\\_20160926.exe](#)(418MB) ※NWChem, Gromacs, Amber Windowsビルド済パッケージ (上級者向け)NWChem, Gromacs, AmberのCygwin用インストール手順 ※cygwin\_wm\_v7\_20160926.exe

[V6用NWChem](#) ※Windowsビルド済パッケージ

[GAMESSのインストール手順](#)

[LAMMPSのインストール手順](#)

[Quantum ESPRESSOのインストール手順](#)

Windows 版 LAMMPS インストールマニュアル 2016/06/13

1. LAMMPS の入手

① サイトにアクセスする。 <http://rpm.lammps.org/windows.html>

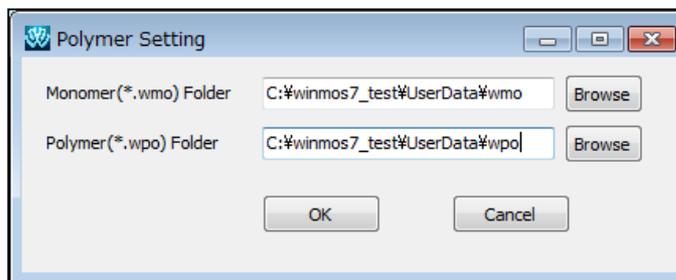
インストール先の OS に応じて [32-bit Windows download area]もしくは[64-bit Windows download area]をクリックする。

LAMMPS-ICMS Windows Installer Repository

This repository is hosting pre-compiled Windows installers of the LAMMPS molecular dynamics simulation software package. The binaries are built semi-automatically with MinGW64 Linux to Windows cross compilers using up-to-date snapshots of the LAMMPS-ICMS git repository hosted at the Institute for Computational Molecular Science at Temple University. The LAMMPS binaries contain all optional packages included in the source distribution **except** KIM (license is not GPL compatible), USER\_CUDA (CUDA does not support cross compilation), KOKOS and USER\_INTEL (do not support cross compilation with GCC), USER\_USMD (requires external library) EXHIBIT (requires to bundle a full Python runtime), USER\_MBM (only useful when linking to a GM software), USER\_SJUE (requires external library), SGA (supported by the USER\_SGA package which is included). The **serial** executable additionally does not contain the MPI and USER MPI packages. More from version 4.0.1 onwards, which are not available without internet.



- ポリマーツールの設定  
[MD]->[ポリマー]->[設定](下図)で、必要に応じてモノマーファイル(拡張子.wmo)とポリマーファイル(拡張子 .wpo)の格納フォルダを指定する。



# I. モノマーを登録

本チュートリアルでは、ポリプロピレンの作成手順を示す。  
 まず、ポリプロピレンのモノマー(プロパン、 $C_3H_8$ )をメイン画面上で作成する。  
 次に、[MD] - [電荷割り当て] - [acpypeを使用]で[Execute]を押す。  
 電荷を非表示にしたい場合はメイン画面右上のチェックボックスをチェックを外す。  
 最後に、重合した際に隣のモノマーと結合する2箇所を続けて左クリックする。

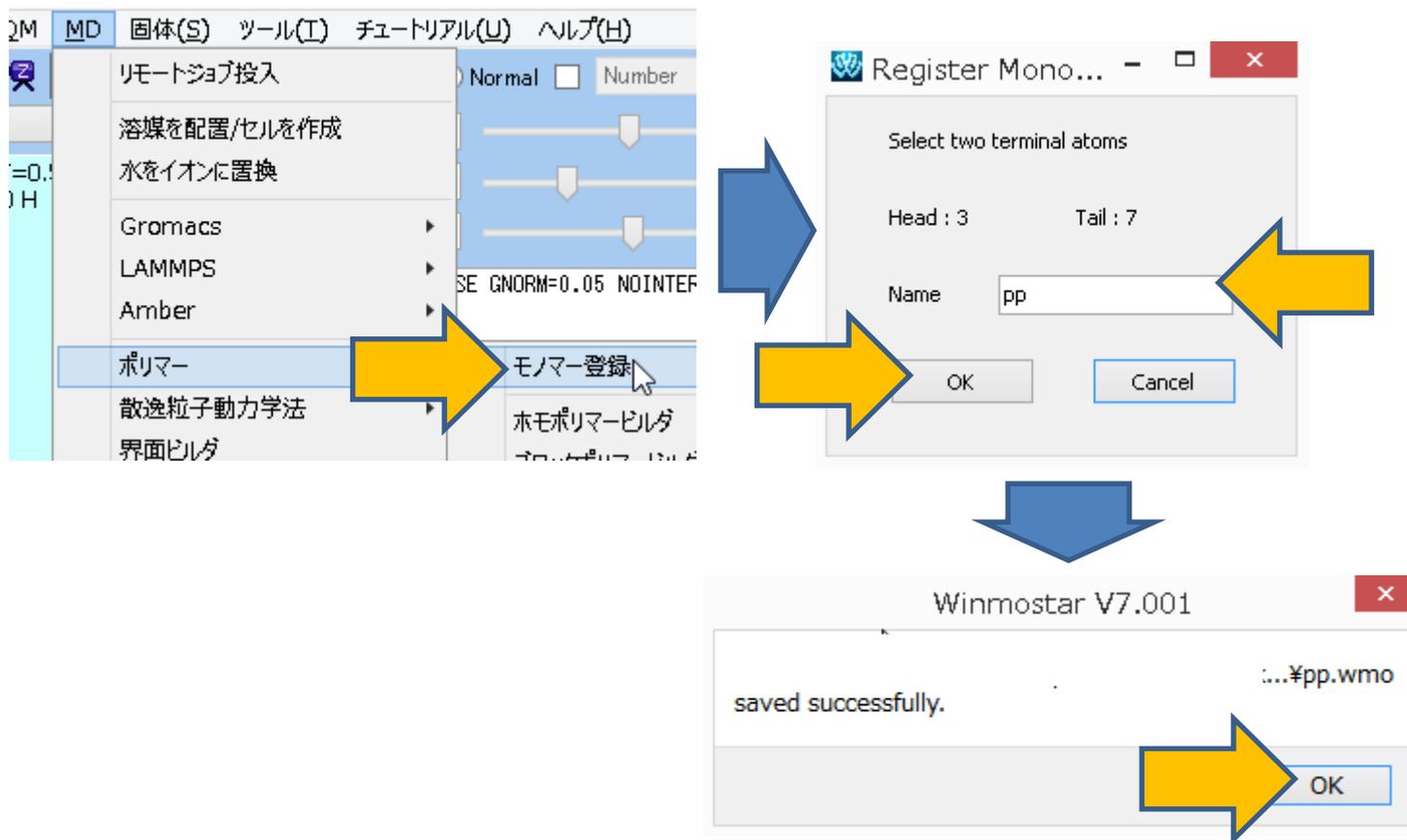
The screenshot shows the X-Ability software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a propane molecule ( $C_3H_8$ ). The data table below the model shows the following information:

Atom	Element	Mass	X	Y	Z	Charge
1	C	12.011	0.0000	0.0000	0.0000	0.0000
2	C	12.011	1.43880	0.0000	0.0000	0.0000
3	H	1.008	1.10000	1.09000	0.0000	0.0000
4	H	1.008	1.10000	1.09000	1.12000	0.0000
5	H	1.008	1.10000	1.09000	-1.12000	0.0000
6	H	1.008	1.10000	1.09000	-0.80000	0.0000
7	H	1.008	1.10000	1.09000	1.12000	0.0000
8	C	12.011	1.43880	1.09000	-1.12000	0.0000
9	H	1.008	1.10000	1.09000	-0.80000	0.0000
10	H	1.008	1.10000	1.09000	1.12000	0.0000
11	H	1.008	1.10000	1.09000	-1.12000	0.0000

The interface also shows a 'User Charge' checkbox checked, and a 'Bond' field set to 10. A yellow arrow points to the 'Add' button, and another yellow arrow points to the 'User Charge' checkbox. A blue arrow points from the software interface to a larger 3D model of two propane molecules, with red circles highlighting the two carbon atoms that will be linked during polymerization.

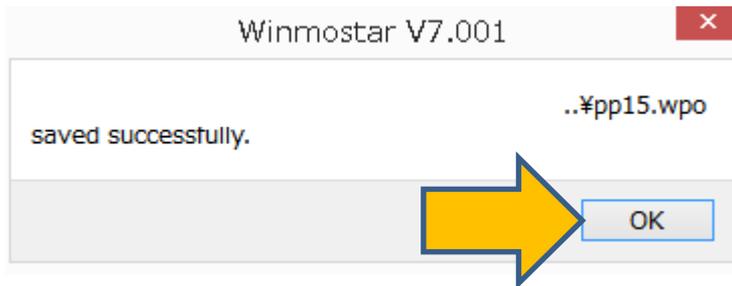
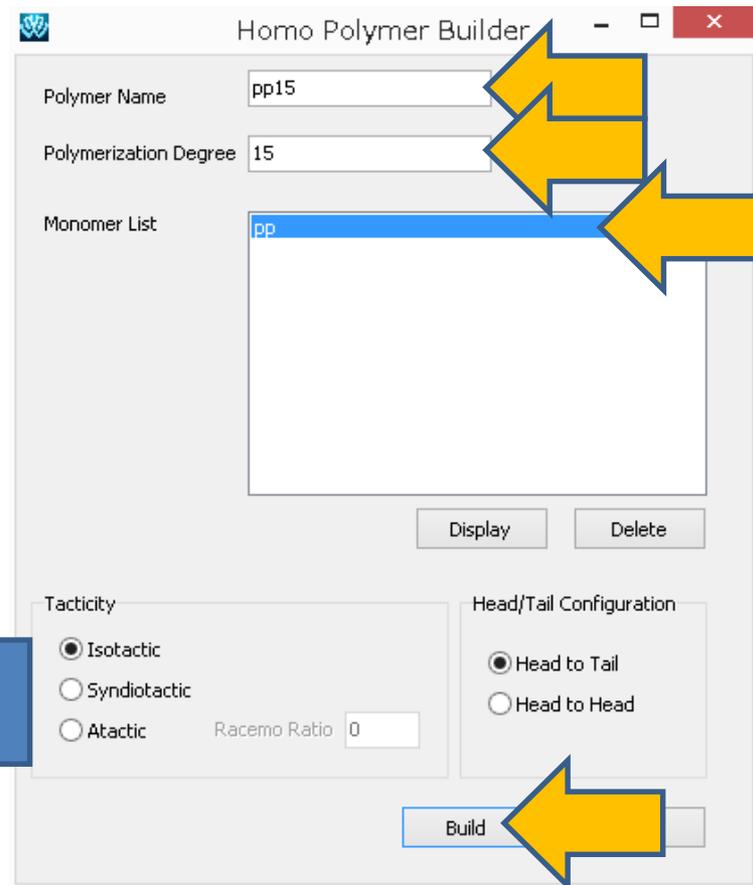
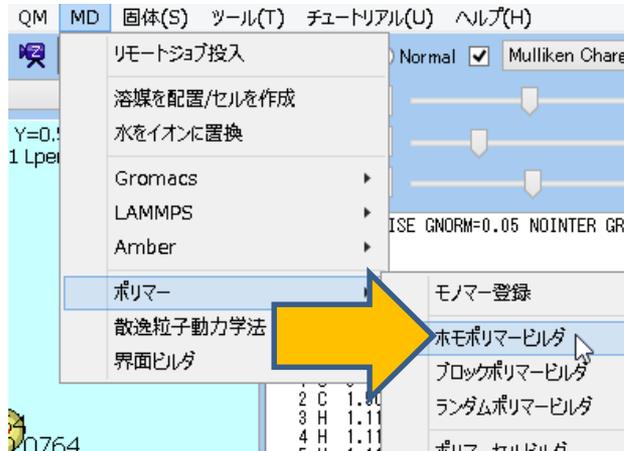
# I. モノマーを登録

[MD]-[ポリマー]-[モノマー登録]にて、「Name」に「pp」と入力し「OK」とする。  
登録が成功した旨を伝えるダイアログが出現するので「OK」とする。



## II. ポリマーを定義

[MD]-[ポリマー]-[ホモポリマービルダ]にて、「Polymer Name」に「pp15」、  
「Polymerization Degree」に「15」、「Monomer List」で「pp」を選択し、「Build」し、  
「Close」する。



### III. 系を作成

[MD]-[ポリマー]-[ポリマーセルビルダ]にて、「Polymers Available」から「pp15」を選択し、「Number」を「30」とし「Add」する。その後「Build」する。  
保存時のファイル名は仮に「pp15\_30.mol2」とする。

The screenshot shows the 'Polymer Cell Builder' window with the following configuration:

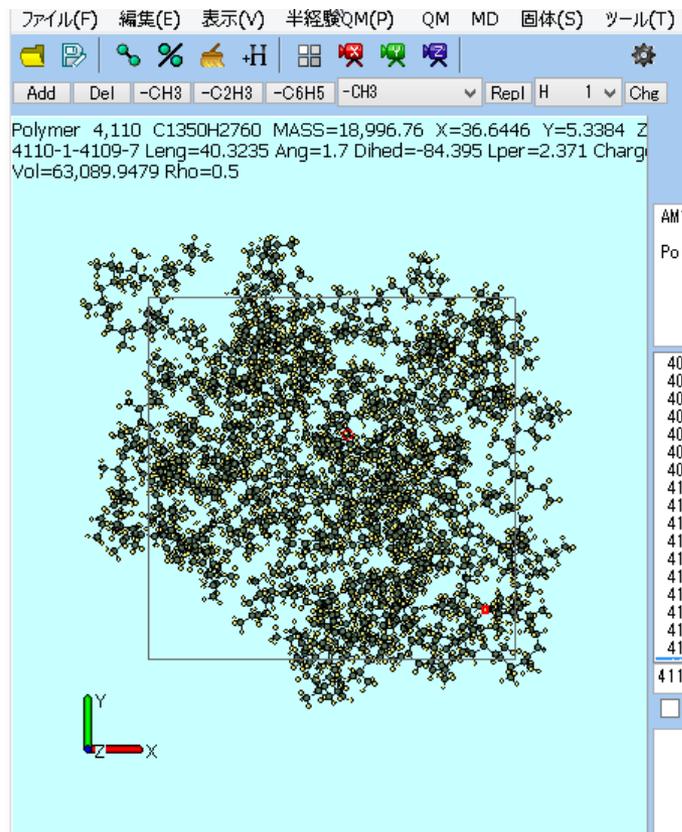
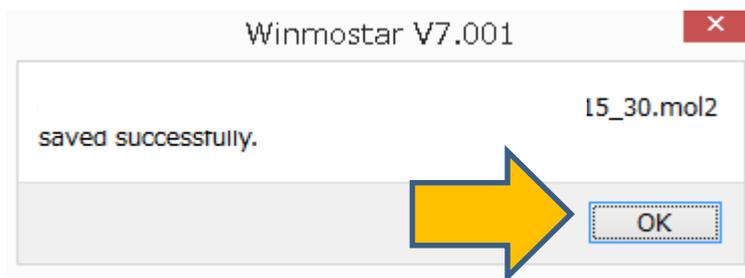
- Box Configuration:**
  - Density [g/cm<sup>3</sup>]: 0.5
  - X-Axis Length [Å]: 39.8095
  - Y-Axis Length [Å]: 39.8095
  - Z-Axis Length [Å]: 39.8095
  - Cubic Cell
- Periodic Boundary Condition:**
  - X
  - Y
  - Z
- Polymers Available:**
  - pp15 (selected)
- Polymers Used:**

Name	Number
pp15	30

Buttons: >> Add >>, Number: 30, << Delete <<, Display, Delete, Build, Close.

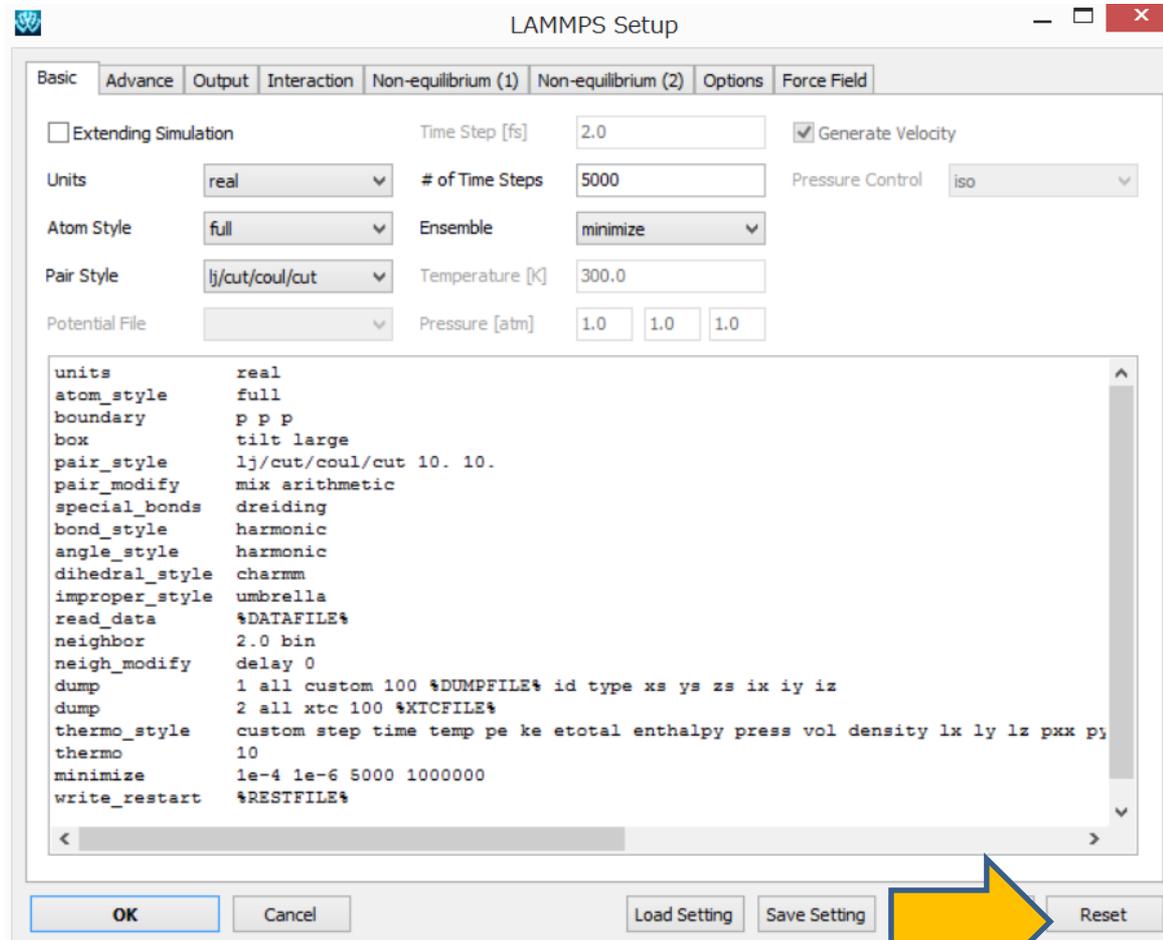
### III. 系を作成

作成が成功したことを告げるダイアログを閉るとメイン画面に系が表示される。  
ポリマーセルビルダは「Close」する。



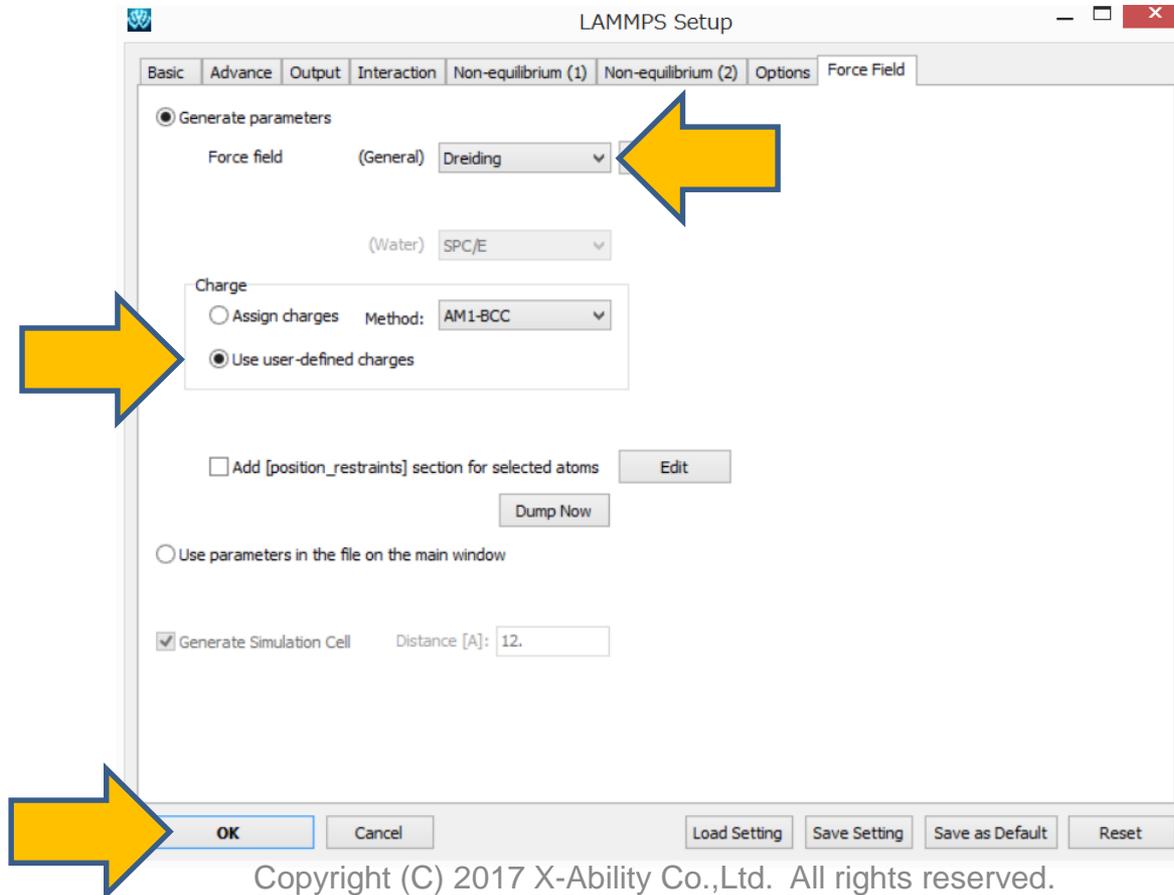
## IV. 平衡化計算

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Reset」をクリックする。



## IV. 平衡化計算

「Force Field」タブを選択し、「Force Field」に「Dreiding」、「Charge」に「Use user-defined charges」を選択し、「OK」する。  
その後、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]とする。



## IV. 平衡化計算

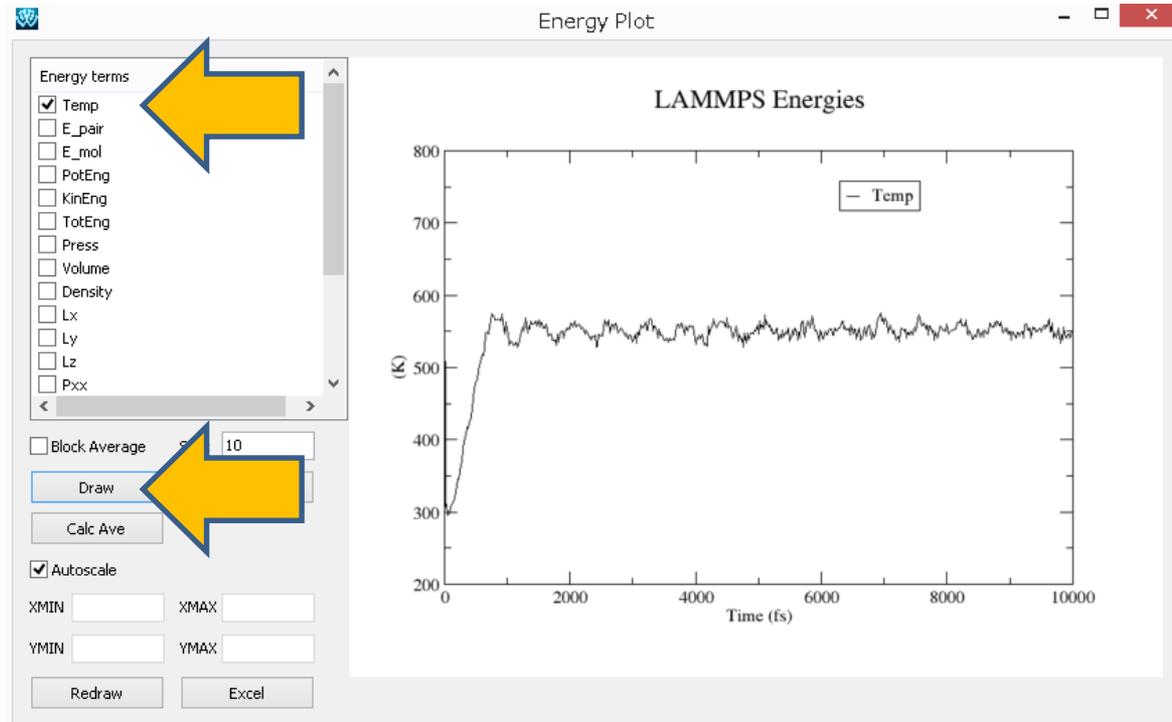
計算終了後、同様に[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Basic」タブの「Extending Simulation」にチェックを入れ、「Ensemble」に「nvt」を指定し、「Temperature」は「550」とする。また、「Advance」タブの「Constrain Hydrogen」にチェックを入れ、「OK」する。その後、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]とする。

The image shows two overlapping windows of the 'LAMMPS Setup' dialog. The top window is on the 'Basic' tab, and the bottom window is on the 'Advance' tab. Yellow arrows highlight the following settings:

- Basic Tab:**
  - Extending Simulation
  - Units: real
  - Atom Style: full
  - Pair Style: lj/cut/coul
  - Time Step [fs]: 2.0
  - # of Time Steps: 5000
  - Ensemble: nvt
  - Temperature [K]: 550
- Advance Tab:**
  - Boundary X: p, Y: p, Z: p
  - Reset COM Motion: linear
  - box tilt large
  - Energy Tolerance: 1e-4
  - Reset Interval: 50
  - rigid
  - Force Tolerance: 1e-6
  - Random Seed: 12345
  - Constrain Hydrogen
  - Tdamp [fs]: 100.
  - Tchain: 3
  - Shake Tolerance: 1e-4
  - Pdamp [fs]: 100.
  - Pchain: 3

## IV. 平衡化計算

計算終了後、[MD]-[LAMMPS]-[エネルギー変化]にて、デフォルトで選ばれるファイルを選び、「Energy Terms」にて「Temp」にチェックを入れ「Draw」し、温度が目標温度付近に制御されていることを確認する。その後「Close」する。



## IV. 平衡化計算

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Basic」タブの「Generate Velocity」のチェックを外し、「Ensemble」に「npt」を指定し、「Pressure」を「200」とし、「OK」する。その後、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]とする。

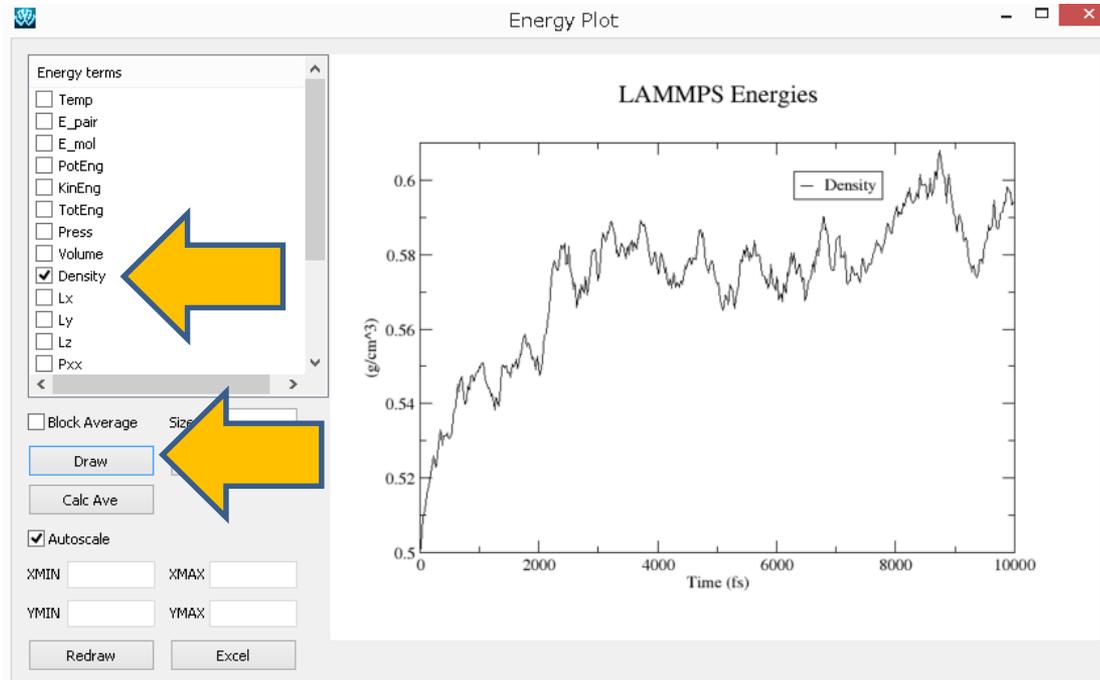
LAMMPS Setup

Basic | Advance | Output | Interaction | Non-equilibrium (1) | Non-equilibrium (2) | Options | Force Field

<input checked="" type="checkbox"/> Extending Simulation	Time Step [fs]	2.0	<input type="checkbox"/> Generate Velocity
Units: real	# of Time Steps	5000	Pressure Control: iso
Atom Style: full	Ensemble	npt	
Pair Style: lj/cut/coul/cut	Temperature [K]	550	
Potential File	Pressure [atm]	200	

## IV. 平衡化計算

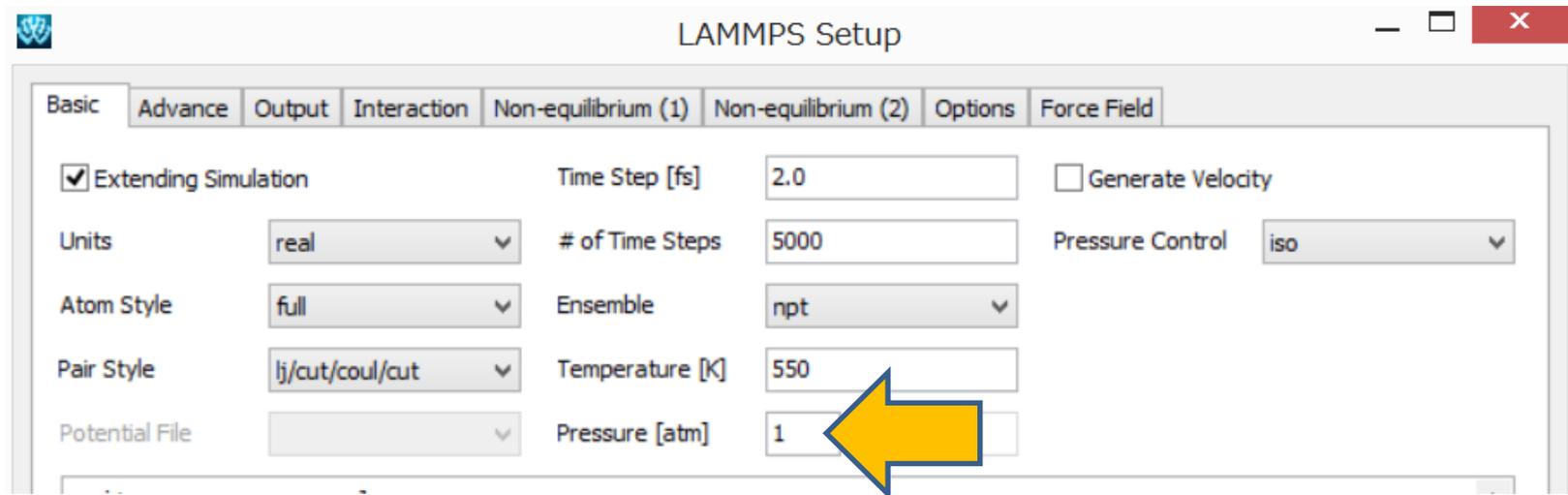
計算終了後、[MD]-[LAMMPS]-[エネルギー変化]にて、デフォルトで選ばれるファイルを選び、「Energy terms」にて「Density」にチェックを入れ「Draw」し、密度が一定値付近に収束していることを確認する。その後「Close」する。  
(今回の計算条件では収束しているとは判断し難いが、チュートリアルという性質上そのまま先に進める)



## IV. 平衡化計算

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Basic」タブの「Pressure」を「1」とし、「OK」する。

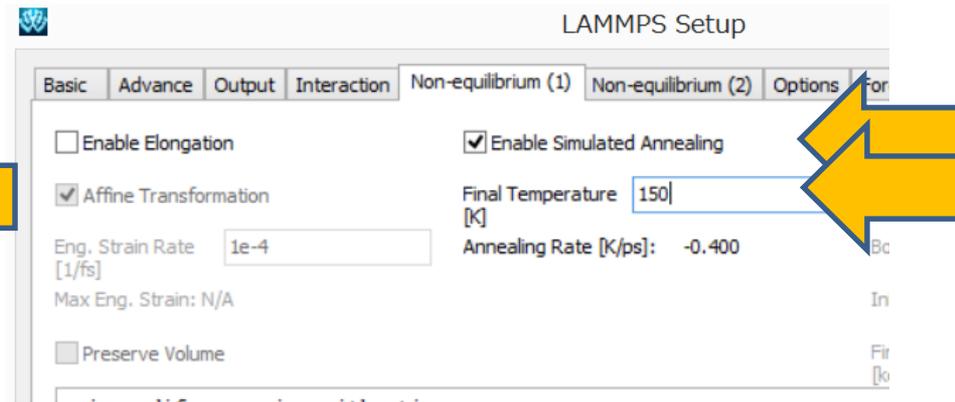
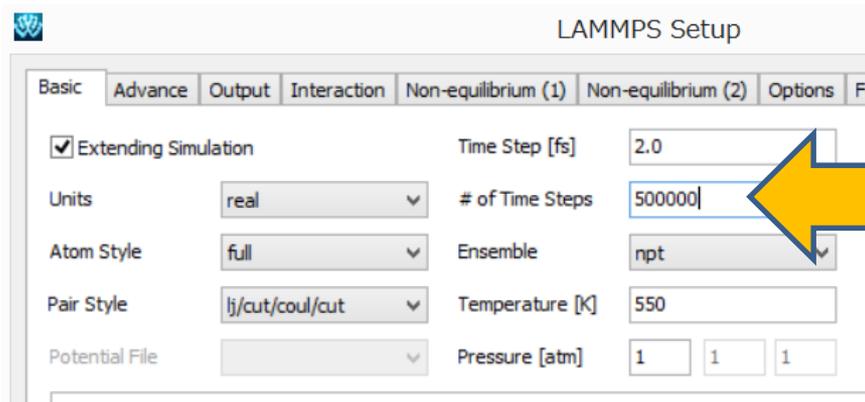
その後、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]とする。



## V. アニーリング計算

次に、ガラス転移温度算出を目的として、アニーリング（温度を徐々に下げる）計算を行う。

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]を開き、「Basic」タブの「# of Time Steps」を「500000」（計算時間を短縮したい場合は小さい値に設定）とし、「Non-equilibrium」タブの「Enable Simulated Annealing」にチェックを入れ、「Final Temperature」を「150」にし、「OK」する。  
その後、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]とする。

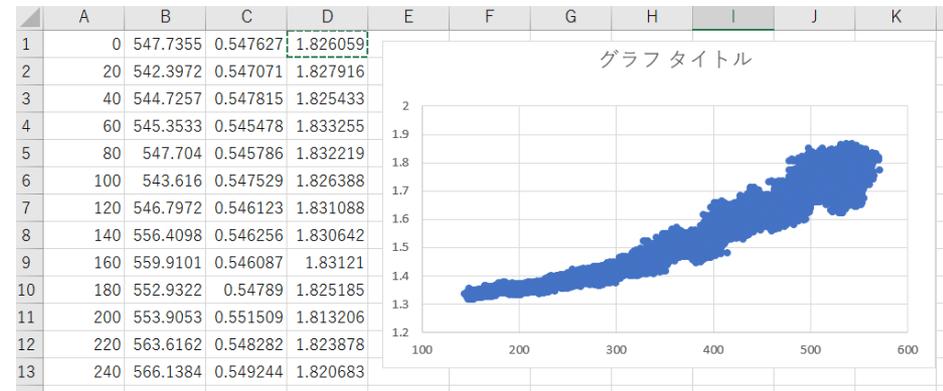
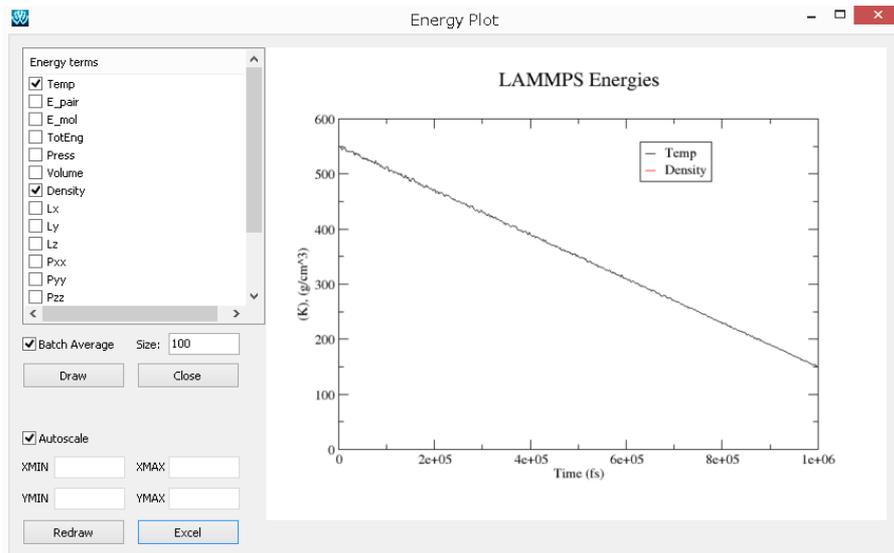


# V. アニーリング計算

計算終了後、[MD]-[LAMMPS]-[エネルギー変化]にて、デフォルトで選ばれるファイルを選び、「Energy Terms」にて「Temp」と「Density」にチェックを入れ「Draw」し、「Excel」を押す。

出力されたcsvファイルの2カラム目を横軸、3カラム目の逆数を縦軸にプロットすると、温度-比容(specific volume)曲線が得られる。

各種のフィッティングでこの曲線の変曲点(280~300K付近)を求めると、それがガラス転移温度の推測値となる。



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

ビジター投稿

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...](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!