

Winmostar チュートリアル  
LAMMPS  
ポリマー界面  
V7.010

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

2017/1/26

# ポリマー界面系概要

本演習の流れは以下のとおりである。

- ① 接合用セルを作製  
ポリマーツールを使ってPE(ポリエチレン)とPP(ポリプロピレン)のポリマーセルを作成する。
- ② 接合条件設定  
接合面(ab面、bc面、ca面)と接合方向を指定する。
- ③ 積層数指定と接合実施  
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して接合する。
- ④ LAMMPSによる計算実行  
界面系のMD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ertools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. 接合条件設定
- VI. 積層数指定と接合実施
- 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

- 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>

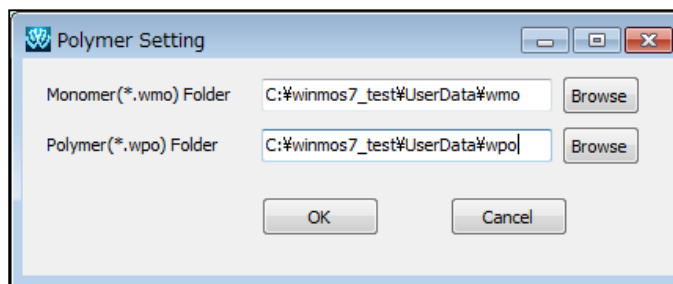
インストール先の OS に応じて [32-bit Windows download area] もしくは [64-bit Windows download area] をクリックする。

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) EXH2CN (requires to bundle a full Python runtime), USER\_MMM (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. From version 4.0.1 onwards, when the **serial** executable is used, it will not contain the MPI and USER MPI packages.



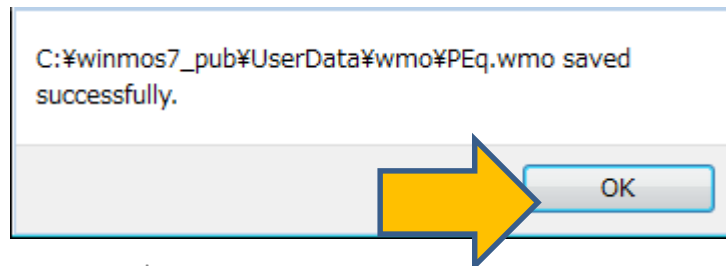
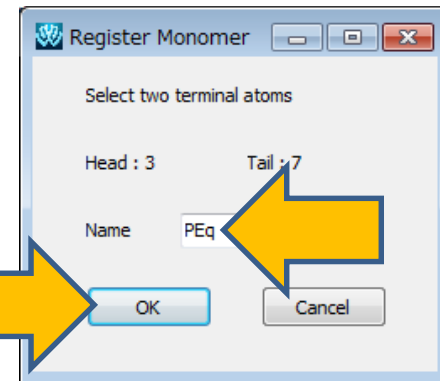
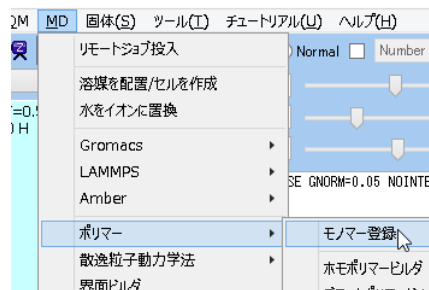
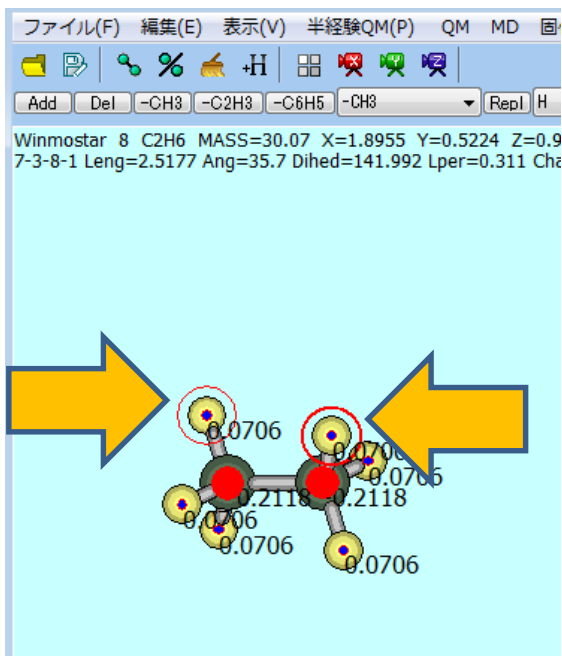
- ポリマーツールの設定  
[MD]->[ポリマー]->[設定](下図)で、必要に応じてモノマーファイル(拡張子.wmo)とポリマーファイル(拡張子.wpo)の格納フォルダを指定する。



## II. ポリマーツールを用いた接合用セルの作製 PEモノマー登録

エタン(C<sub>2</sub>H<sub>6</sub>)をメイン画面上で作成する。MOPAC計算を行った後\*1、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。

[MD]-[ポリマー]-[モノマー登録]にて、「Name」に「PEq」と入力し「OK」をクリックする。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」をクリックする。

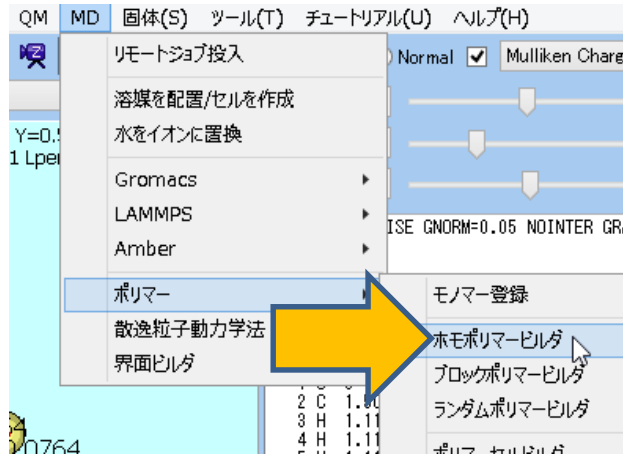


\*1 点電荷にMOPACのMulliken電荷以外を利用する場合は、RESP電荷などを計算する。

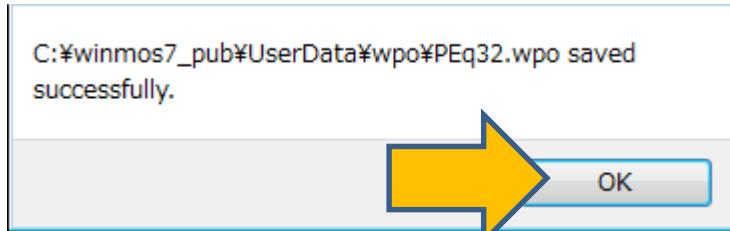
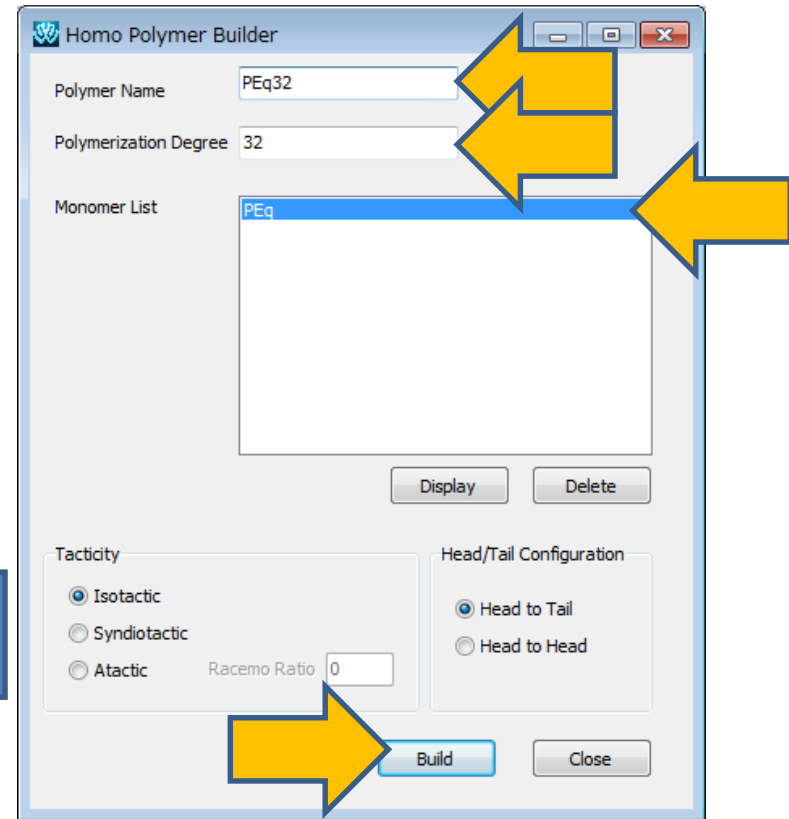
[https://winmostar.com/jp/tutorials/V7/MD\\_tutorial.1\(Build\\_cell\)V7.pdf](https://winmostar.com/jp/tutorials/V7/MD_tutorial.1(Build_cell)V7.pdf) (補足)

## II. ポリマーツールを用いた接合用セルの作製 PE鎖の作成

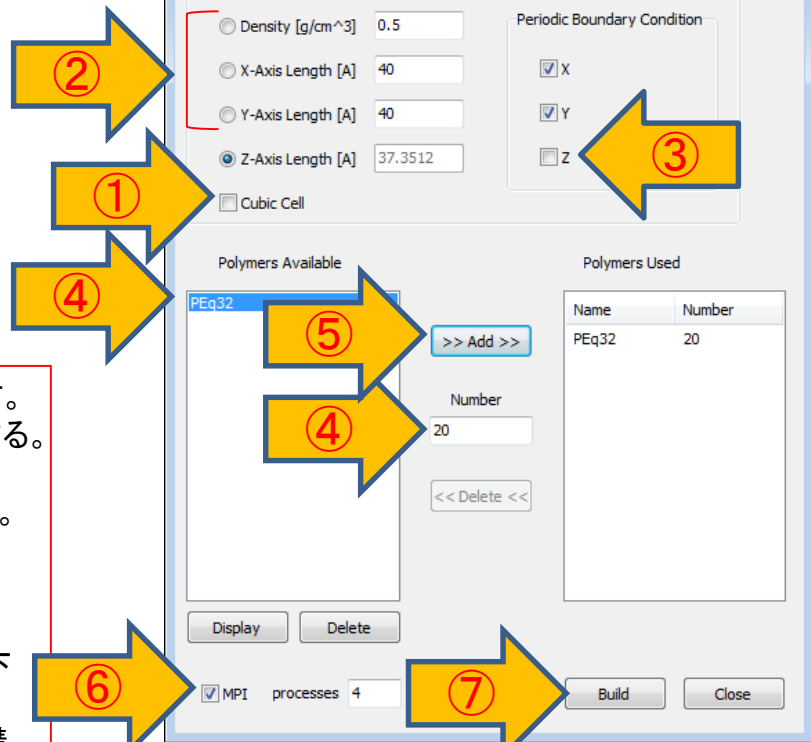
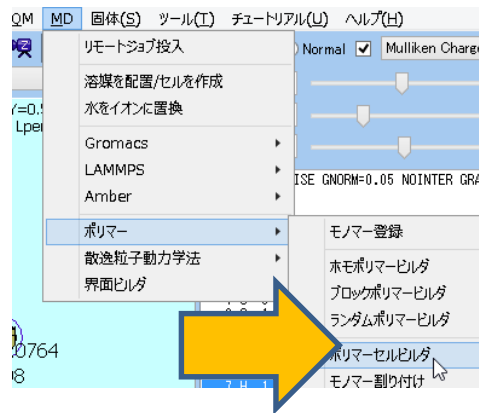
・[MD]>[ポリマー]>[ホモポリマービルダ]を用いて**32量体のPE鎖**を作成する。



「Polymer Name」に「PEq32」、「Degree」に「32」と入力し「Monomer List」で「PEq」を選択した後「Build」をクリックし「Close」する。



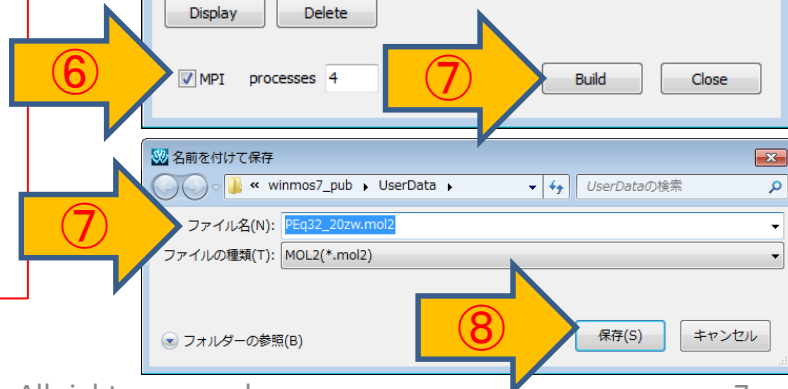
## II. ポリマーツールを用いた接合用セルの作製 PEセルの作成



- ① [ポリマーセルビルダ]を起動し(左図)、Cubic Cellのチェックを外す。
- ② Densityを0.5としX-Axis LengthとY-Axis Lengthを40Åに設定する。
- ③ 周期境界条件のZのチェックを外す\*1。
- ④ 左リストからポリマー鎖名PEq32を選択しNumberに20と入力する。
- ⑤ Addをクリックし右リストに反映させる。
- ⑥ (MPI版LAMMPSの場合) MPIのチェックを入れ、proc(core数)を指定する。
- ⑦ Buildをクリックし「名前を付けて保存」ウインドウで[UserData]配下にファイル名を入力する(PEq32\_20zw)。
- ⑧ [保存]をクリックすると処理が開始される\*2。得られたアモルファス構造はメイン画面に表示される。

\*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)



## II. ポリマーツールを用いた接合用セルの作製 PP鎖の作成

プロパン(C<sub>3</sub>H<sub>8</sub>)をメイン画面上で作成する。MOPAC計算を行った後、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。

「PPq」としてモノマー登録する。

[ホモポリマービルダ]を起動し「Polymer Name」は「PPq20」、重合度は20とし Monomer Listから「PPq」を選択後「Build」をクリックし「Close」する。

ファイル(F) 編集(E) 表示(V) 半経験QM(P) QM MD 固体(S) ...

Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -CH3 Repl. H 1

Winmostar 11 C3H8 MASS=44.1 X=1.8813 Y=0.5532 Z=0.902  
7-3-11-1 Leng=2.493 Ang=30.1 Dihed=133.751 Lper=0.468 Charge=0.0

0.0709 0.0709  
0.0716 0.1598  
0.0716 0.0709  
0.0716 0.0709

Register Monomer

Select two terminal atoms

Head : 3 Tail : 7

Name PPq

OK Cancel

Homo Polymer Builder

Polymer Name PPq20

Polymerization Degree 20

Monomer List

PEq  
PPq

Display Delete

Tacticity

Isotactic  
 Syndiotactic  
 Atactic Racemo Ratio 0

Head/Tail Configuration

Head to Tail  
 Head to Head

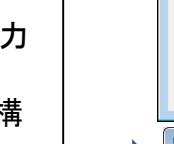
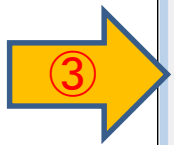
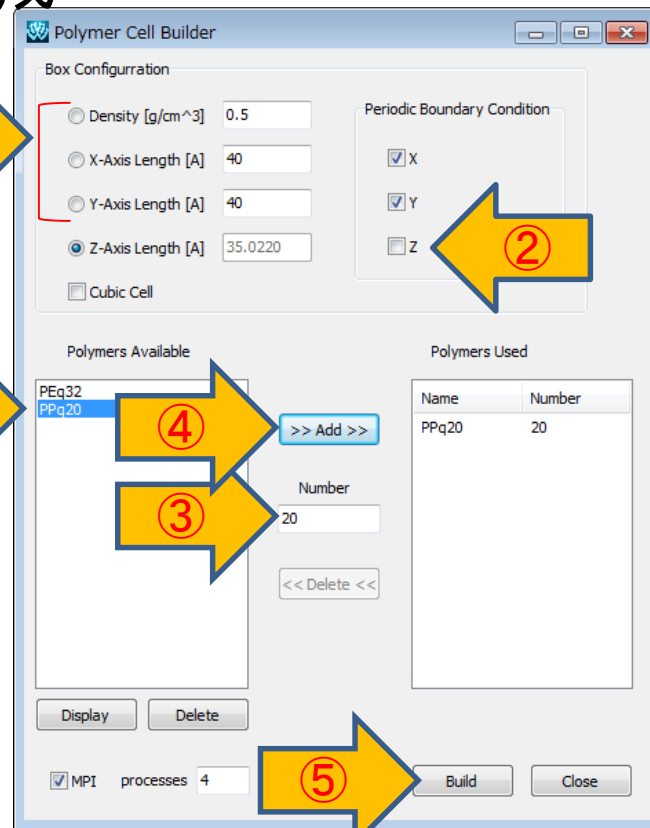
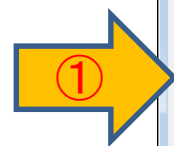
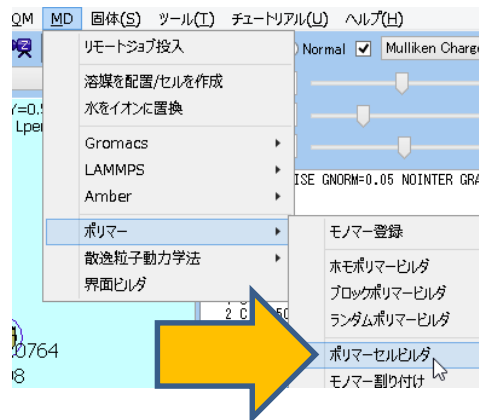
Build Close

C:\winmos7\_pub\UserData#wpo#PPq20.wpo saved successfully.

OK



## II. ポリマーツールを用いた接合用セルの作製 PPセルの作成

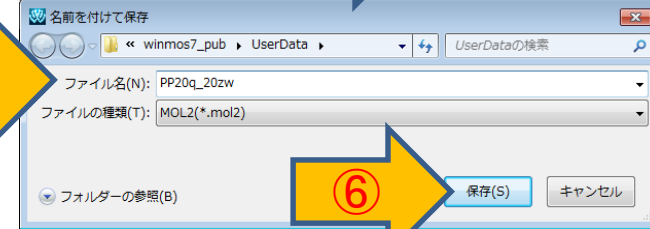


※ 赤字部分のみPEと異なる

- ① [ポリマーセルビルダ]を起動し(左図)、Cubic Cellのチェックを外し、Densityを0.5としX-AxisおよびY-Axis Lengthを40Åに設定する。
- ② 周期境界条件のZのチェックを外す\*1。
- ③ 左リストからポリマー鎖名PPq20を選択しNumberに20と入力する(PEq32が残っている場合は[delete]で削除する。)
- ④ Addをクリックし右リストに反映させる。
- ⑤ 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(PPq20\_20zw)。
- ⑥ [保存]をクリックすると処理が開始される\*2。得られたアモルファス構造はメイン画面に表示される。

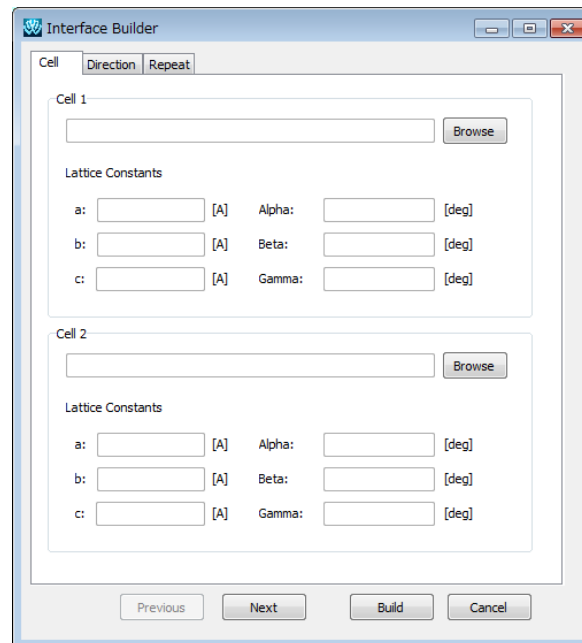
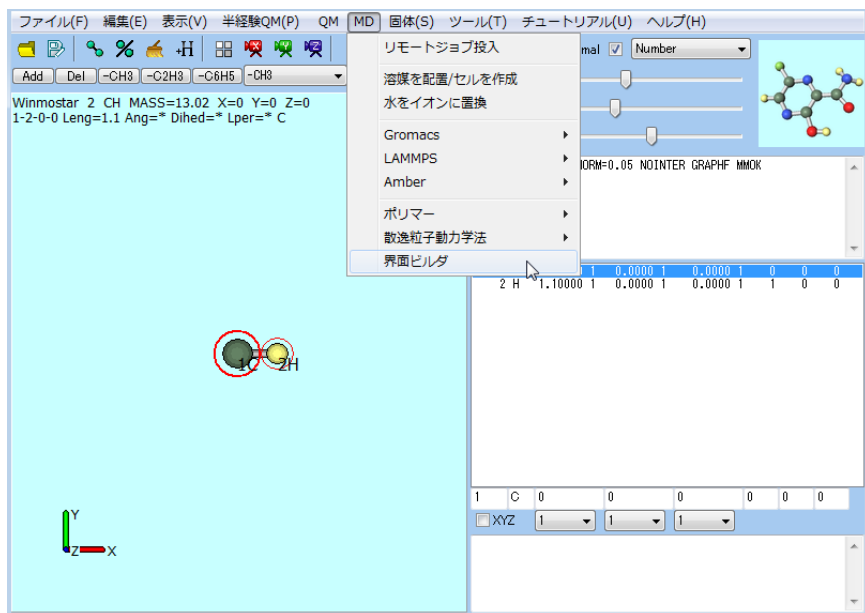
\*1 チェックあり: チェックを入れた方向の周期境界条件下で配置する。  
 チェックなし: チェックを入れた方向の壁内に収まるように配置する。

\*2 処理に時間がかかることがある(数分)

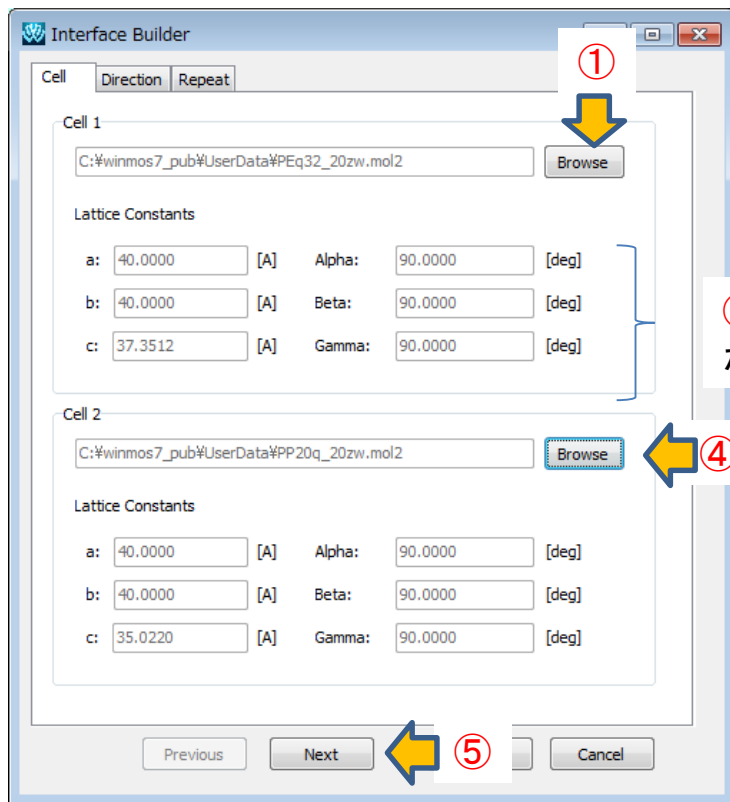


# III. 界面ビルダーの呼び出し

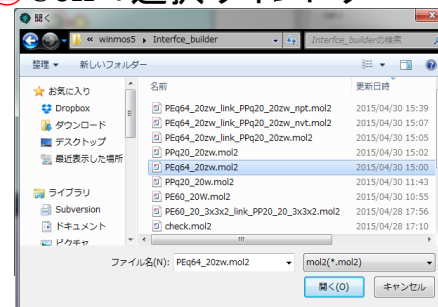
- ・メインメニューから [MD]→[界面ビルダ] を呼び出す。



# IV. MDセル選択

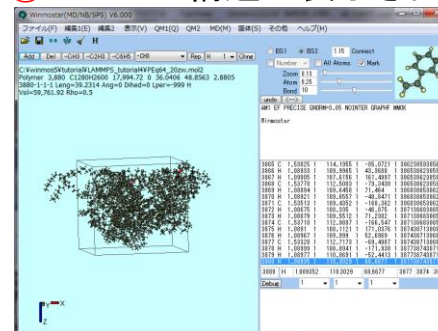


② Cell 1 選択ウインドウ



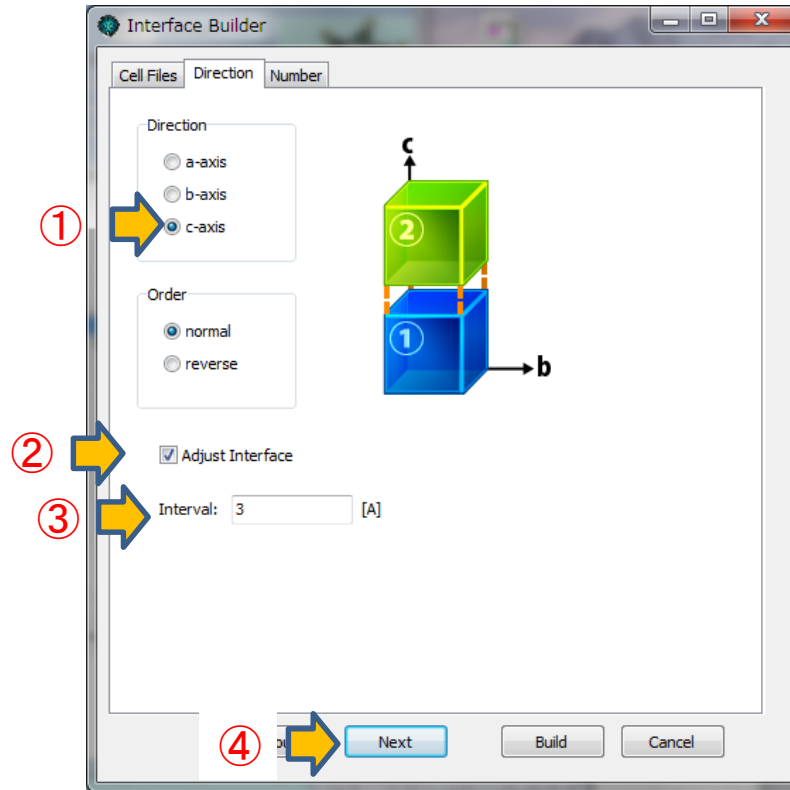
③ Cell 1 のセル定数が表示される

③ Cell 1 の構造が表示される



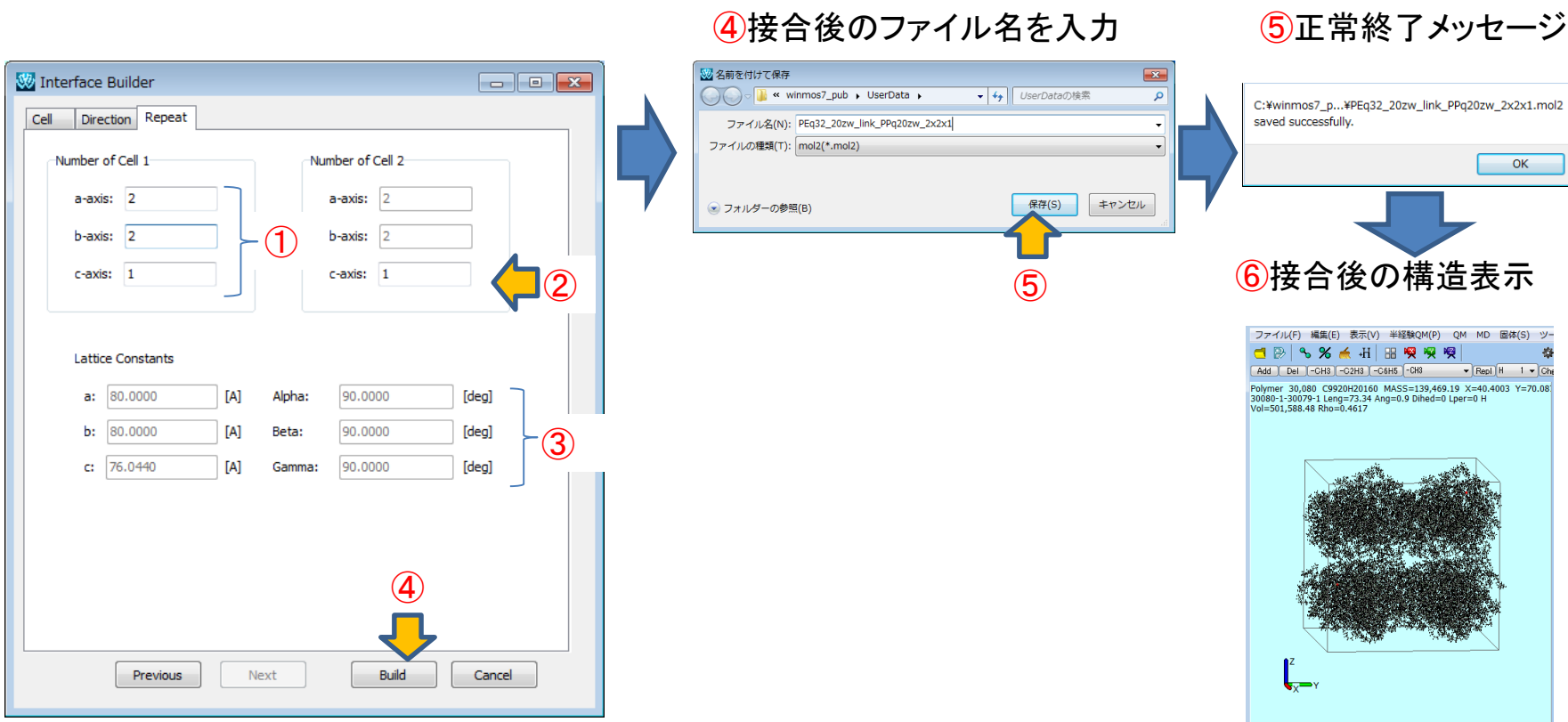
- ① Cell 1の[Browse]をクリックする。
- ② PEセルのファイル(PEq32\_20zw.mol2)を選択する。
- ③ Cell 1のセル定数が表示され、Winostarのモデリング画面にCell 1の構造が表示される。
- ④ Cell 2の[Browse]をクリックし、PPセルのファイル(PPq20\_20zw.mol2)を選択する。
- ⑤ [Next]をクリックする(次スライド)。

## V. 接合条件設定



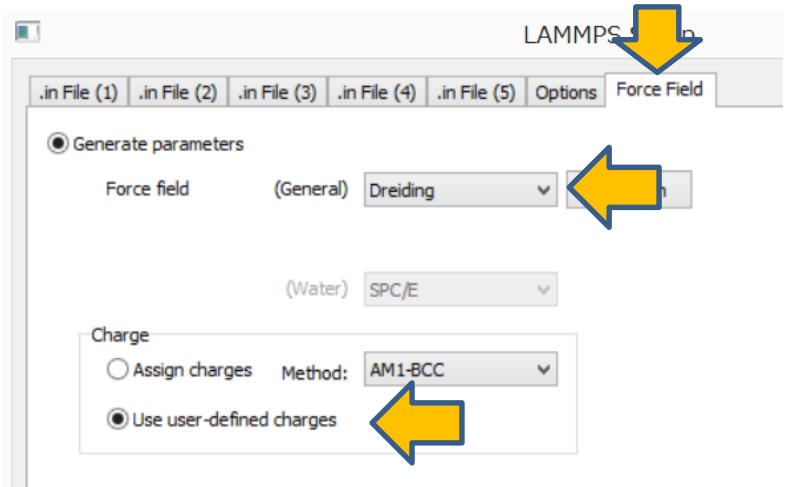
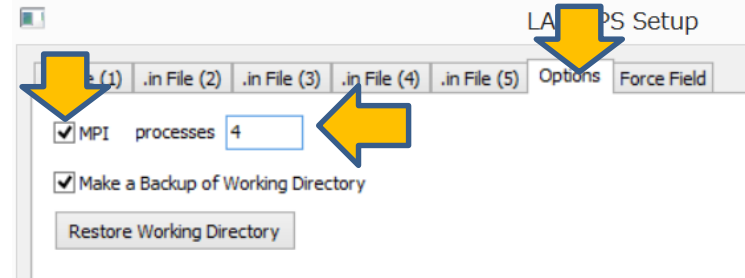
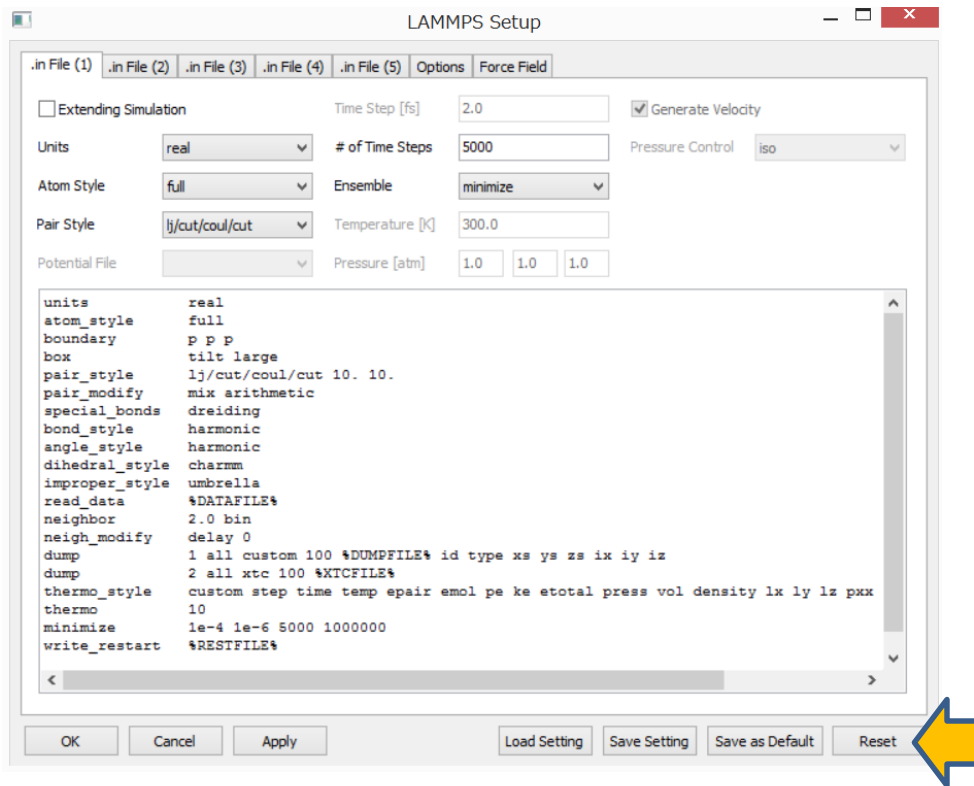
- ① Directionで貼り合わせる方向をc-axisに指定する。
- ② 接合面が完全一致していない場合はAdjust Interfaceにチェックを入れる。
- ③ Intervalで貼り合わせる2つのセルの間隔を3Åに設定する。
- ④ [Next]をクリックする(次スライド)。

# VI. 積層数指定と接合実施



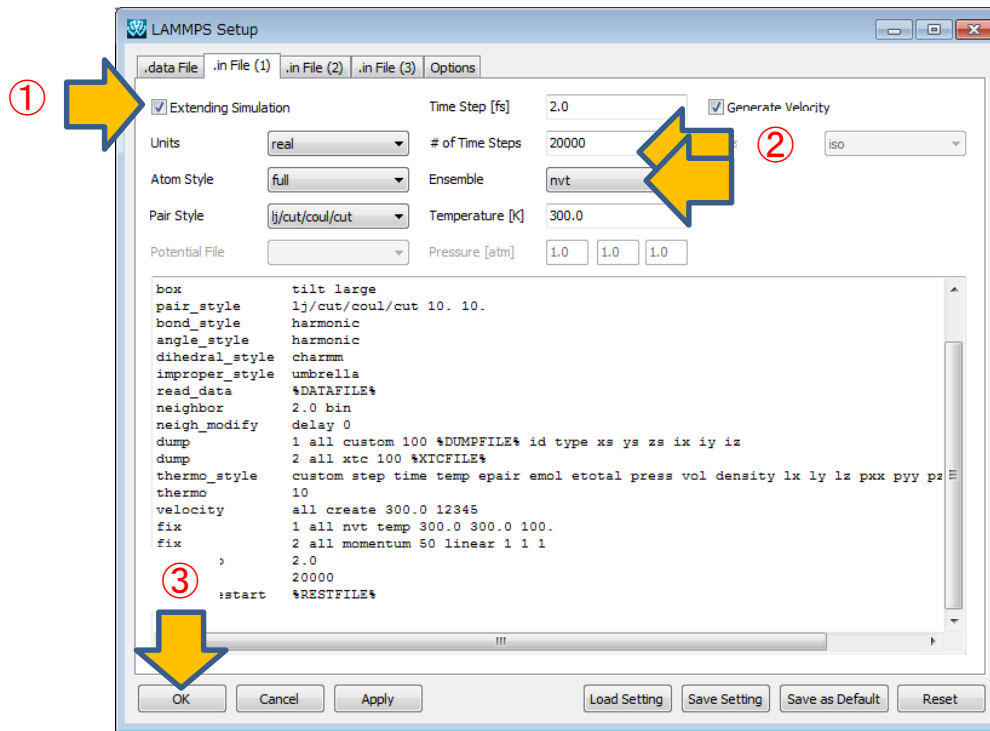
- ① Number of Cell 1のa-axis, b-axis, c-axisにそれぞれ積層数を入力する。
- ② Number of Cell 2に積層数を入力する。なお指定した積層方向に応じて指定可能な軸は変化する。
- ③ Lattice Constantsにセル定数が表示される。
- ④ [Build]をクリックし、接合後のファイル名(PEq32\_20zw\_link\_PPq20\_20zw\_2x2x1)を入力する。
- ⑤ [保存]をクリックすると接合が実行され、正常終了した旨のメッセージウインドウが表示される。[OK]をクリックする。
- ⑥ Winostarのモデリング画面に接合後の構造が表示される。

# VII. LAMMPS実行1 (minimize)



- ① [MD]->[LAMMPS]->[キーワード設定]画面を開き、ウインドウ右下の[Reset]ボタンを押す。
- ② [Options]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 [Force Field]タブを表示させ、Force FieldにDreiding、ChargeにUse user-defined chargeを指定する。
- ④ ウインドウ左下の[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]で計算が正常に終了しているか確認する。

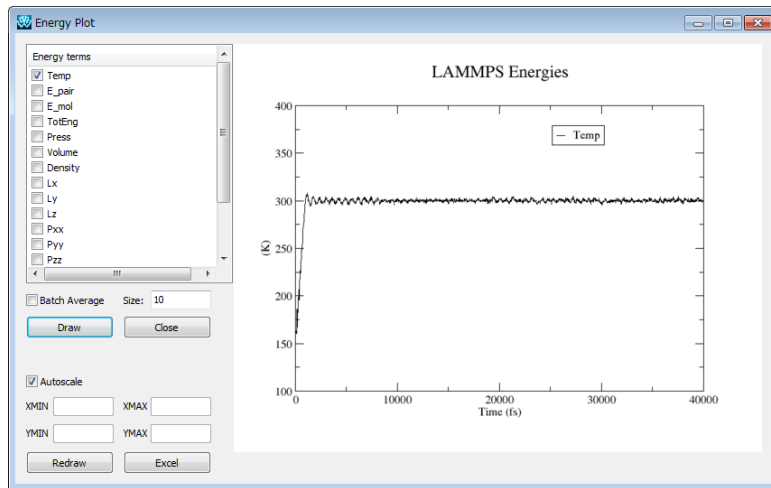
# VIII. LAMMPS実行2 (温度一定MD)



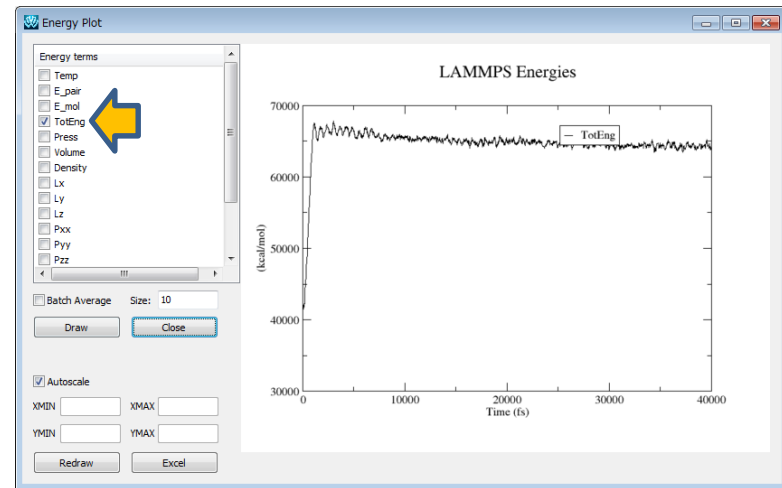
- ① [MD]->[LAMMPS]->[キーワード設定]画面を開き、[.in File(1)]タブ内のExtending Simulationにチェックを入れる。
- ② [# of time steps]に20000と設定し[Ensemble]にnvtを選択する。
- ③ [OK]をクリックし[キーワード設定]画面を閉じる。
- ④ [MD]->[LAMMPS]->[LAMMPS実行]を選択する。

# エネルギー変化の確認(温度一定MD)

## 温度変化



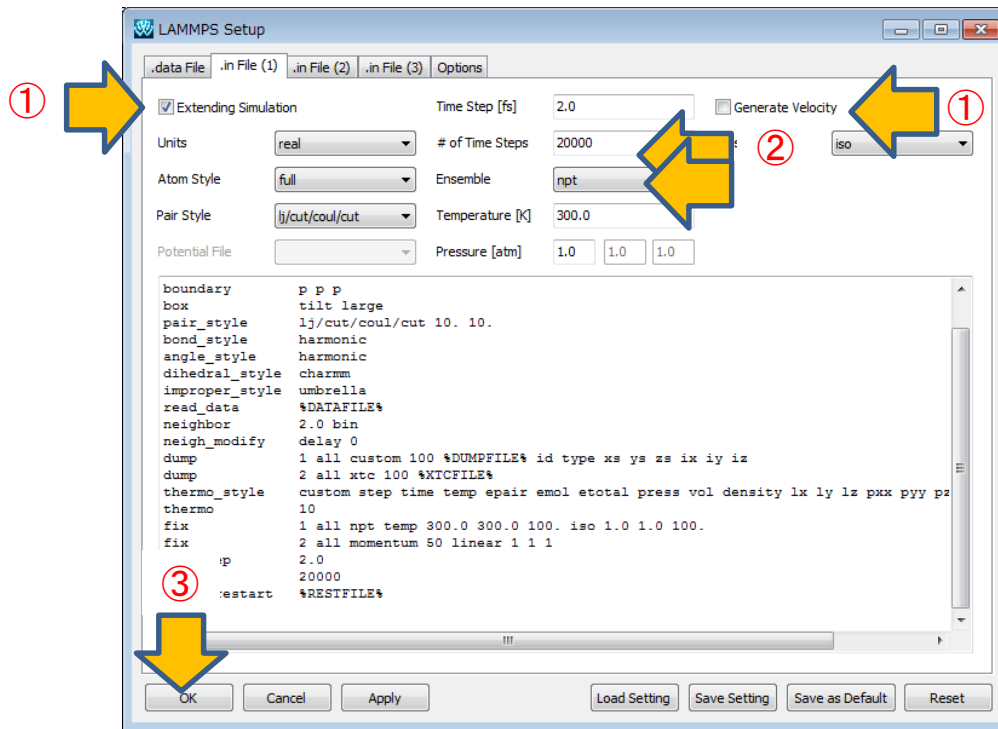
## トータルエネルギー変化



[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。



# IX. LAMMPS実行3 (温度圧力一定MD)

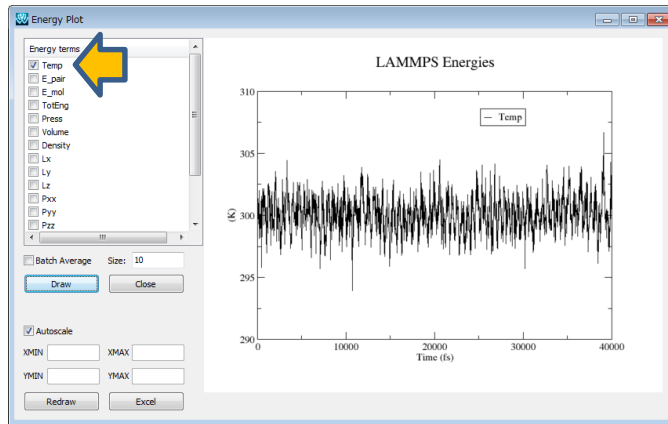


- ① [MD]->[LAMMPS]->[キーワード設定]画面を開き、[.in File(1)]タブ内のExtending Simulationにチェックを入れる。Generate Velocityのチェックを外す。
- ② [# of time steps]に**20000**と設定し[Ensemble]にnptを選択する。
- ③ [OK]をクリックし[キーワード設定]画面を閉じる。
- ④ [MD]->[LAMMPS]->[LAMMPS実行]を選択する。

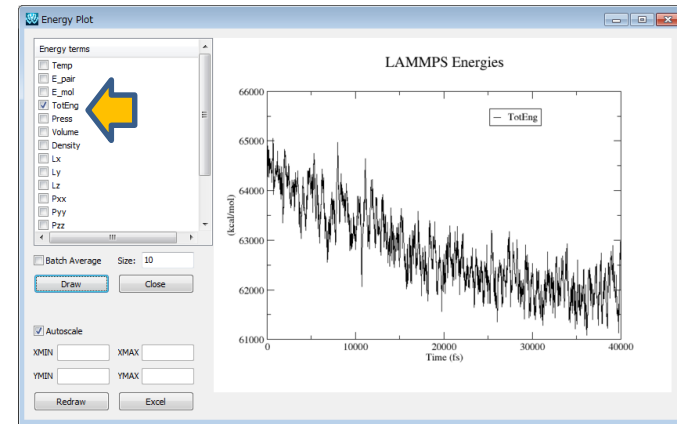
計算時間の参考値: 12分02秒(6コア)

# 計算結果の確認(温度圧力一定MD)

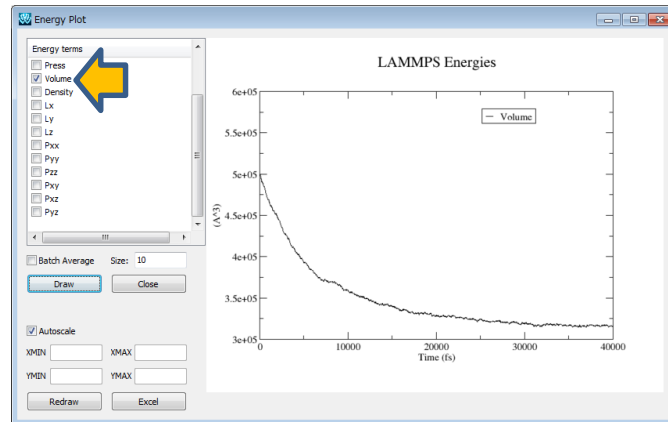
温度変化



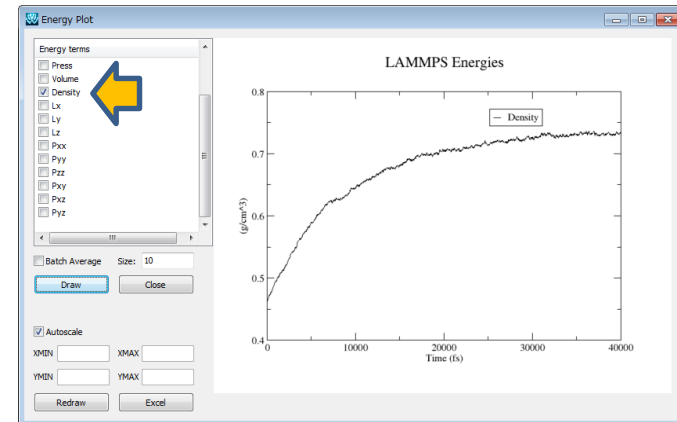
トータルエネルギー変化



体積変化



密度変化



[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。

# X. 3D表示(温度圧力一定MD)

- ① [MD]->[LAMMPS]->[トラジェクトリ読み込み]ウィンドウで[3D]をクリックする。
- ② [View]->[Preferences]を選択してPreferencesウィンドウを起動する。
- ③ [Rainbow]にチェックを入れMol. Weightを選択する
- ④ 再生ボタン[|>]をクリックする。

