

Winmostar チュートリアル  
LAMMPS  
固体壁面を含む系  
V8.000

株式会社クロスアビリティ

[question@winmostar.com](mailto:question@winmostar.com)

2017/10/01

## 概要・注意点

- 本チュートリアルでは、固体壁と流体(気体または液体)を含む系の例として、2枚のグラフェンに挟まれた領域における水の挙動を観察する手順を示します。
- ターゲットとなる物質の種類、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、力場の種類、スーパーセルのサイズ、伸長速度も結果に影響を与えます。
- ここでは固体壁の座標を完全に固定するため、固体壁付近の系内の温度が局所的に低くなる点に注意してください。

# 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。

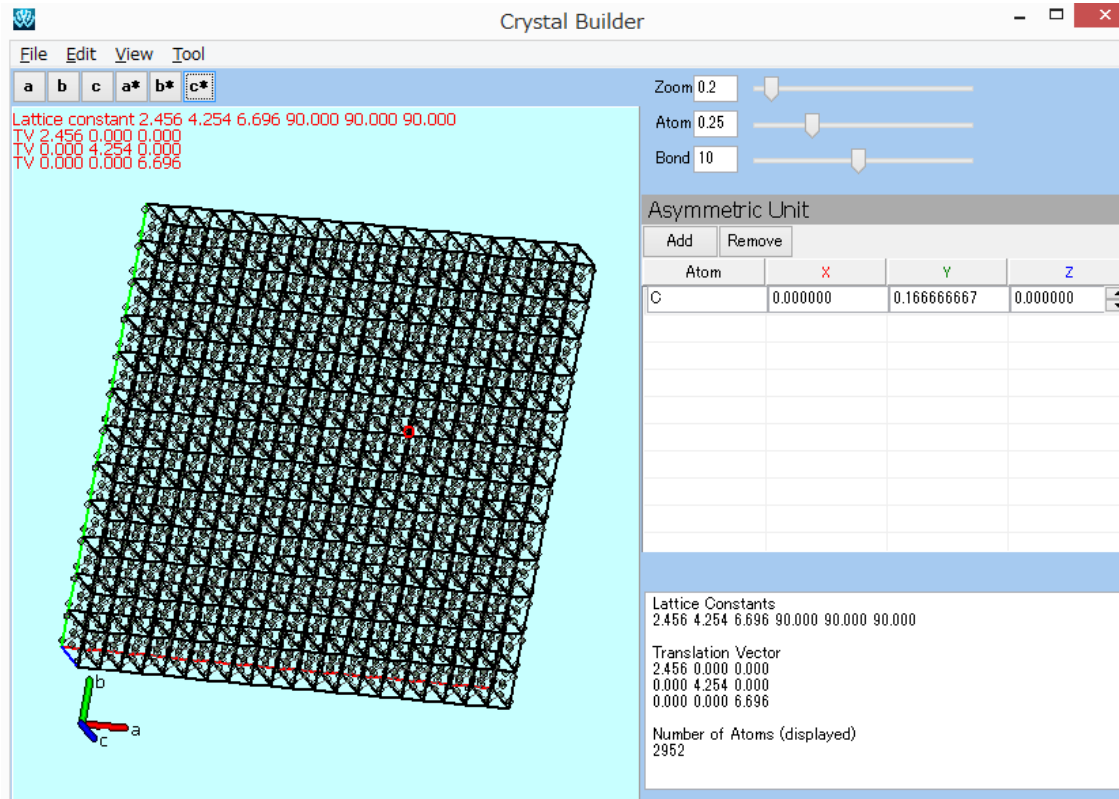
**LAMMPS-ICMS Windows Installer Repository**

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 Sciences 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\_HOMD (requires external library) PYHON (requires to bundle a full Python runtime), USER\_LAMM (only useful when linking to a GM software), USER\_SJUE (requires external library), SGA2 (supported by the USER\_SGA2G package which is included). The **serial** executable additionally does not contain the USER\_SJUE package. More info: [https://winmostar.com/jp/manual\\_jp.html](#)



# I. 系の作成

[固体]-[結晶ビルダ]を起動し、Orthorhombic 69 Fmmm、 $a=2.456 \text{ \AA}$ 、 $b=4.254 \text{ \AA}$ 、 $c=6.696 \text{ \AA}$ 、 $(0.0, 0.166666667, 0.0)$ にC原子が置かれた結晶を作成する。  
次に、[Edit]-[Repeat]にて $20 \times 12 \times 1$ にスーパーセル展開する。  
最後に[File]-[Save As]から「graphene.cif」として保存し、[File]-[Exit]をクリックする。



# I. 系の作成

メイン画面の[ファイル]-[開く]から先ほどの「graphene.cif」を開く。  
[溶媒を配置/セルを構築]を選択する。

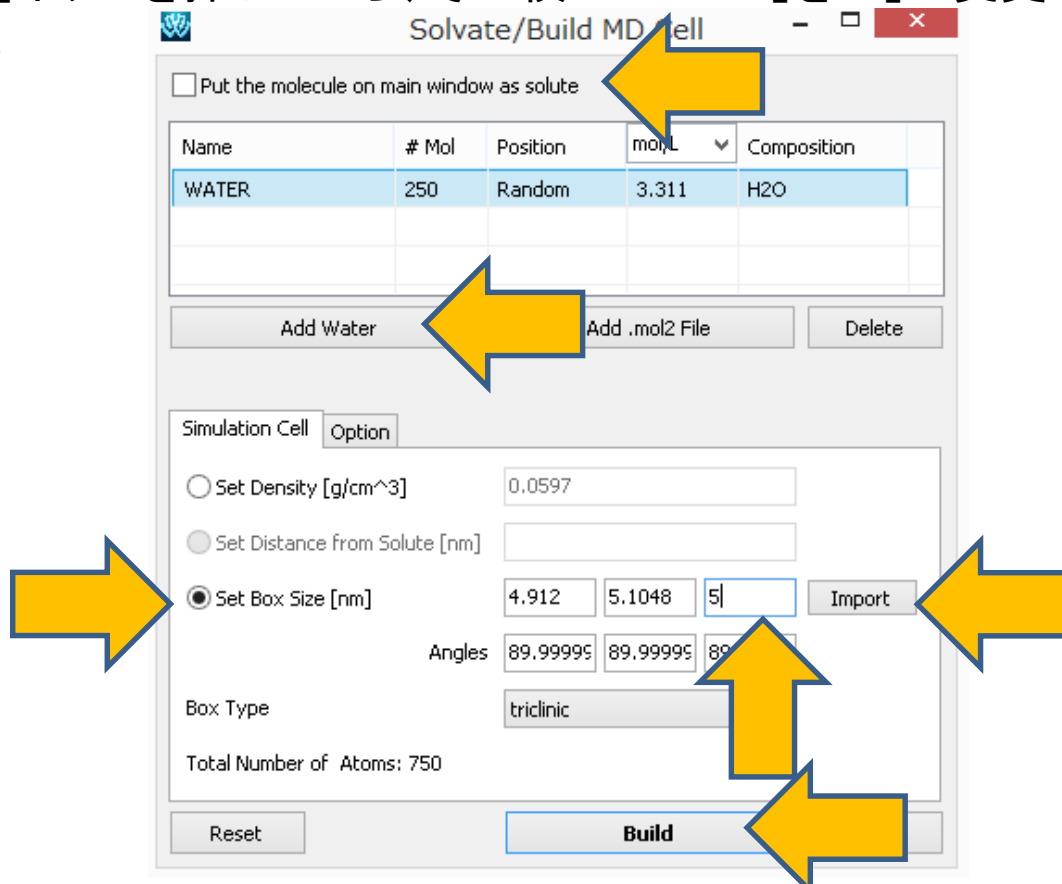
The screenshot shows the X-Ability software interface. The main window displays a 2D lattice structure of a material. The top menu bar includes: ファイル(E), 編集(E), 表示(V), 半経験QM(P), QM, MD, 固体(S), ツール(I), アドオン(A), チュートリアル(U), ヘルプ(H). The toolbar contains icons for file operations and a settings gear. Below the toolbar, there are dropdown menus for material type (Add, Del, -CH3, -C2H3, -C6H5, -CH3) and other parameters (Repl, H, I, Chg). The main display area shows a 2D lattice structure with a coordinate system (X, Y, Z) at the bottom left. The right panel displays a data table with columns for atom type, coordinates, and other parameters.

Atom	Type	X	Y	Z	Occupancy	Charge	Mass	Label
1998	C	49.62999	1	59.9993	1	180.0000	1	137 134 129
1999	C	1.41798	1	59.9993	1	180.0000	1	1896 135 132
1900	C	1.41796	1	119.9989	1	180.0000	1	1895 1736 1731
1901	C	1.41798	1	59.9993	1	180.0000	1	1898 137 134
1902	C	1.41796	1	119.9989	1	180.0000	1	1897 1738 1733
1903	C	1.41801	1	120.0007	1	0.0000	1	11744 1739 1736
1904	C	49.62999	1	59.9993	1	180.0000	1	143 140 135
1905	C	1.41801	1	120.0007	1	0.0000	1	11746 1741 1738
1906	C	49.62999	1	59.9993	1	180.0000	1	145 142 137
1907	C	1.41798	1	59.9993	1	180.0000	1	1804 143 140
1908	C	1.41796	1	119.9989	1	180.0000	1	1803 1744 1739
1909	C	1.41798	1	59.9993	1	180.0000	1	1806 145 142
1910	C	1.41796	1	119.9989	1	180.0000	1	1805 1746 1741
1911	C	1.41801	1	120.0007	1	0.0000	1	11752 1747 1744
1912	C	49.62999	1	59.9993	1	180.0000	1	151 148 143
1913	C	1.41801	1	120.0007	1	0.0000	1	11754 1749 1746
1914	C	49.62999	1	59.9993	1	180.0000	1	153 150 145
1915	C	1.41798	1	59.9993	1	180.0000	1	1812 151 148
1916	C	1.41796	1	119.9989	1	180.0000	1	1811 1752 1747
1917	C	47.89725	1	89.1518	1	0.0000	1	11782 1 6
1918	C	47.89725	1	90.8481	1	0.0000	1	11781 1602 1605
1919	C	1.41801	1	90.8482	1	78.0444	1	11780 1603 1602

The screenshot shows the '固体(S)' menu in the software. The menu items are: リモートジョブ投入, 溶媒を配置/セルを構築 (highlighted with a yellow arrow), 分子を挿入, and 水をイオンに置換. A blue arrow points from the main window to this menu.

# I. 系の作成

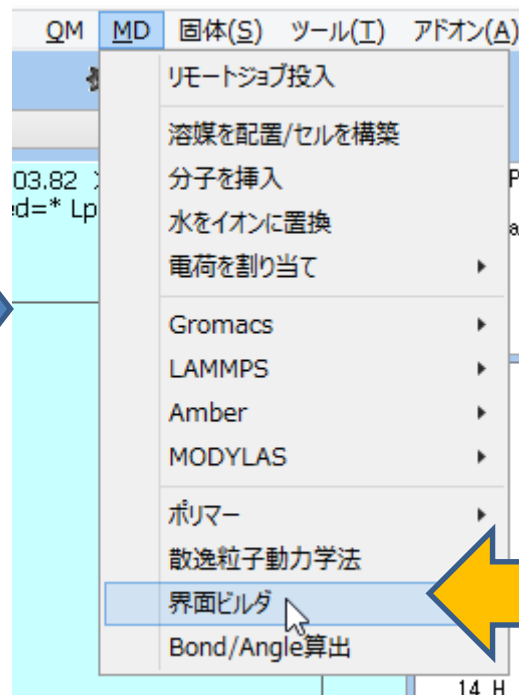
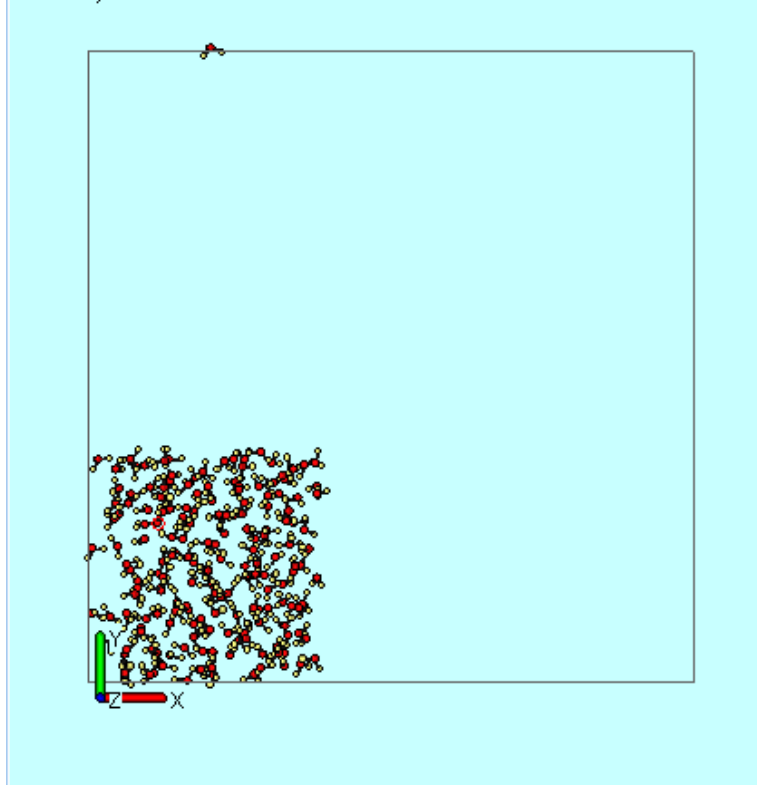
「Put the molecule on main window as solute」のチェックを外し、「Add Water」ボタンを押して「250」と入力して「OK」を押す。次に「Set Box Size」にチェックを入れ、先に「Import」ボタンを押してから、その横の「0.6696」を「5」に変更して「Build」ボタンをクリックする。



# I. 系の作成

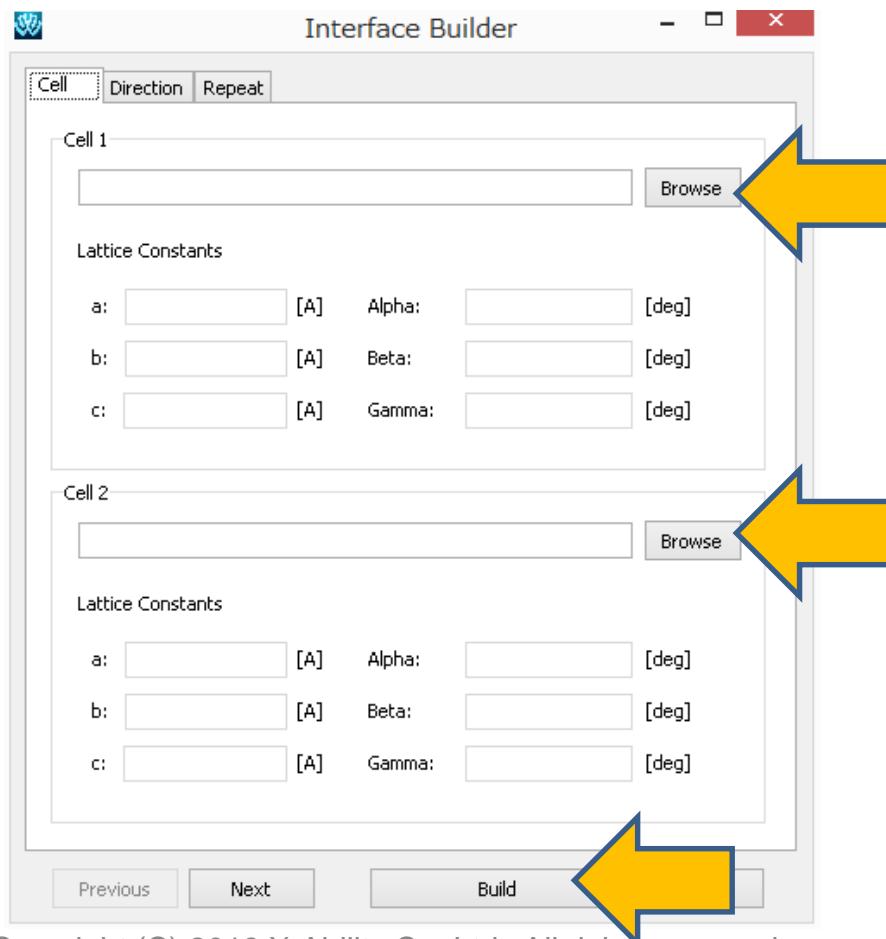
水が配置された系が表示される。[ファイル]-[名前を付けて保存]にて「water.mol2」として保存する(必ずmol2形式で)。次に[MD]-[界面ビルダ]を選択する。

```
Generated 750 H5000250 MASS=4,503.82 X=* Y=* Z=*
O-1-2-0 Leng=18.184 Ang=54.885 Dihed=* Lper=*
Vol=125,373.8880 Rho=0.0597
```



# I. 系の作成

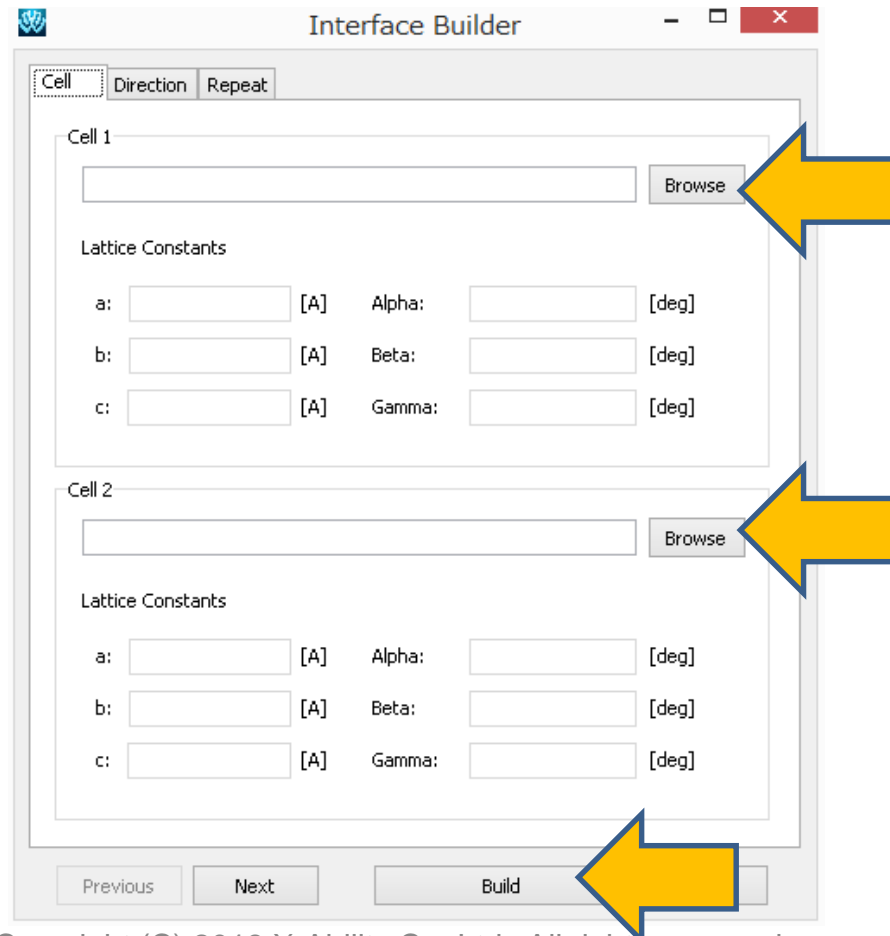
「Cell 1」の「Browse」ボタンまたはドラッグアンドドロップで「graphene.cif」を選択する。  
同様に「Cell 2」に「water.mol2」を選択し、「Build」ボタンを押し「graphene\_water.mol2」  
として保存する。





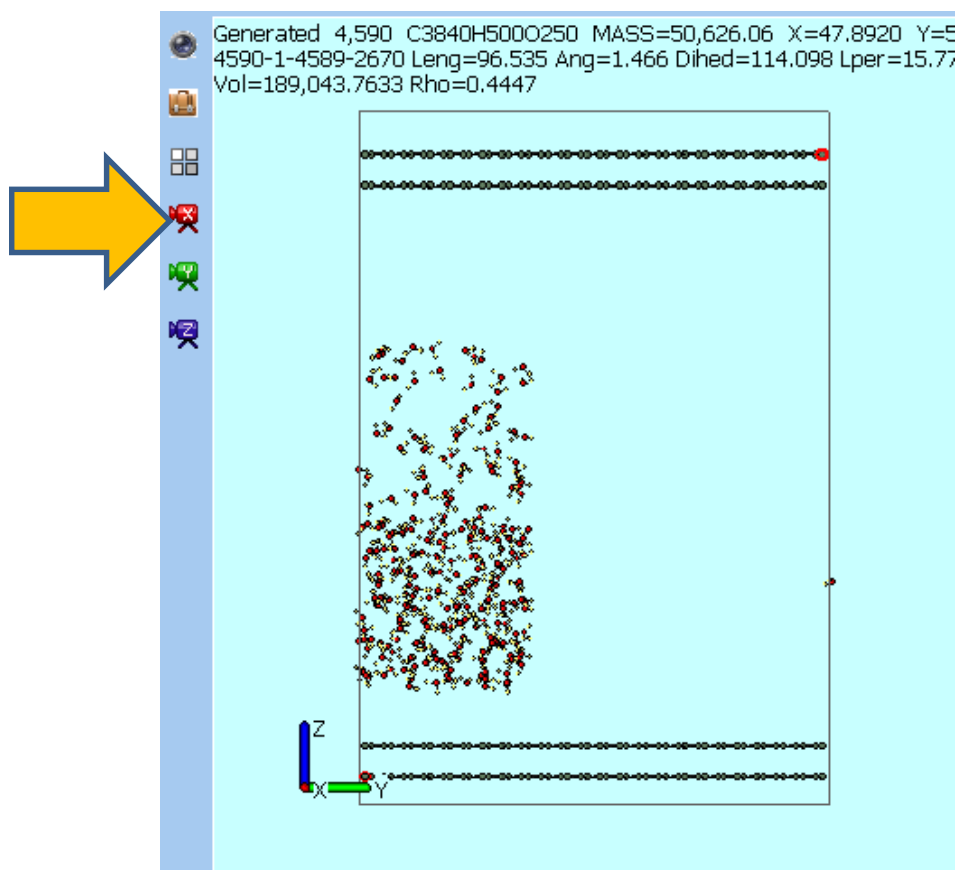
# I. 系の作成

続けて界面ビルダにて、「Cell 1」に「graphene\_water.mol2」、「Cell 2」に「graphene.cif」を選択し、「Build」ボタンを押し「gwg.mol2」として保存し、「Close」ボタンを押す。



# I. 系の作成

メイン画面で赤いカメラボタンをクリックし、カメラを遠ざけると、グラフィックに水の相が挟まれている様子が分かる。



# I. 系の作成

Ctrl+ドラッグで、下のグラフエン2層のうち下の1層を選択する。次に、  
[編集]-[部分編集]-[部分削除]を選択し、「Delete」ボタンをクリックする。

Generated 4,590 C3840H5000O250 MASS=50,626.06 X=47.8920 Y=50 AM1 EF PF  
4590-1-4589-2670 Leng=96.535 Ang=1.466 Dihed=114.098 Lper=15.774  
Vol=189,043.7633 Rho=0.4447

1896 C  
1897 C  
1898 C  
1899 C  
1900 C  
1901 C  
1902 C  
1903 C  
1904 C  
1905 C  
1906 C  
1907 C  
1908 C  
1909 C  
1910 C  
1911 C  
1912 C  
1913 C  
1914 C  
1915 C  
1916 C  
1917 C  
4590 C  
 XYZ

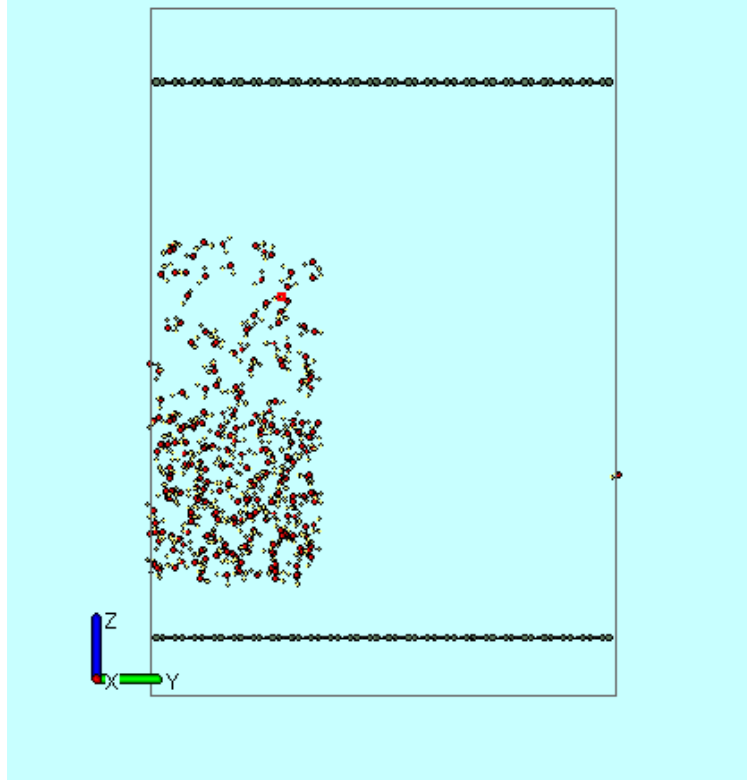
(E) 編集(E) 表示(V) 半経験QM(P) QM MD 固体(S) ツール(I) アドオン(A)

- 元に戻す(U) Ctrl+Z
- やり直し(B) Ctrl+Y
- テキストを戻す(I)
- 直接編集(E)
- 原子(A)
- 結合(B)
- 水素付加(A)
- 水素削除(D)
- 部分編集(P)
  - 部分回転(B) Ctrl+R
  - 結合角変更(A) Ctrl+A
  - 部分移動(M) Ctrl+M
  - 部分自由回転(E) Ctrl+F
  - 部分クリーン(G) Ctrl+L
  - 部分重心
  - 部分配向
  - 部分切り取り(X) Ctrl+X
  - 部分コピー(C) Ctrl+C
  - 部分貼り付け(V) Ctrl+V
  - 部分複製(Y)
  - 部分削除(D) Ctrl+D
- 変更(S)
- 環構築(R) F9
- 部品
- 番号交換 Ctrl+E
- 原子の並び替え
- 配向(O)
- Z-Matrix
- クリーン Ctrl+G
- 座標反転
- 鏡像体生成
- 分子種単位で選択

# I. 系の作成

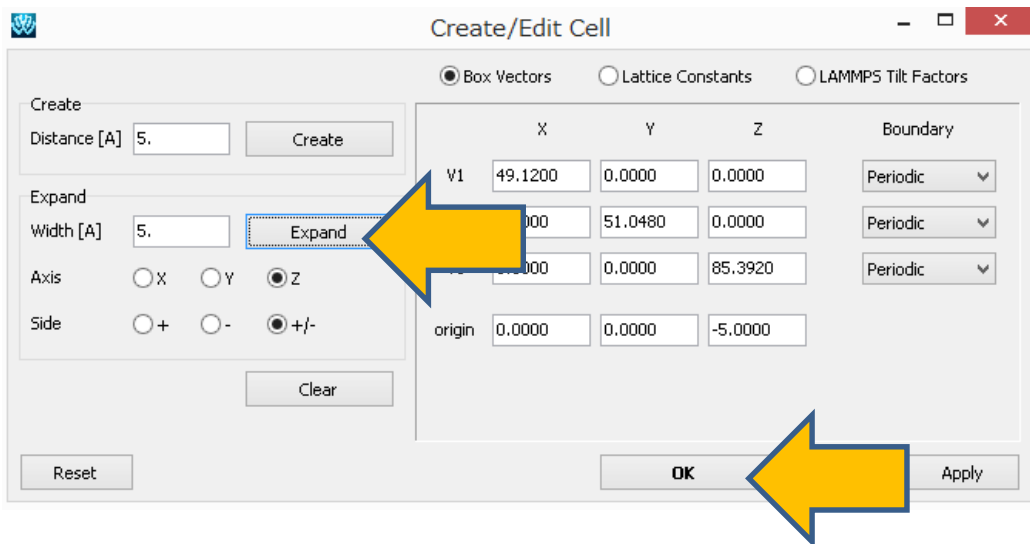
同様に上のグラフェン2層のうちの上の1層も削除すると下の左図のようになる。  
次に、[編集]-[セルを作成/編集]を選択する。

Generated 2,670 C1920H5000250 MASS=27,564.94 X=9.4900 Y=14.4  
1710-0-0-0 Leng=\* Ang=\* Dihed=\* Lper=\* H  
Vol=189,043.7633 Rho=0.2421

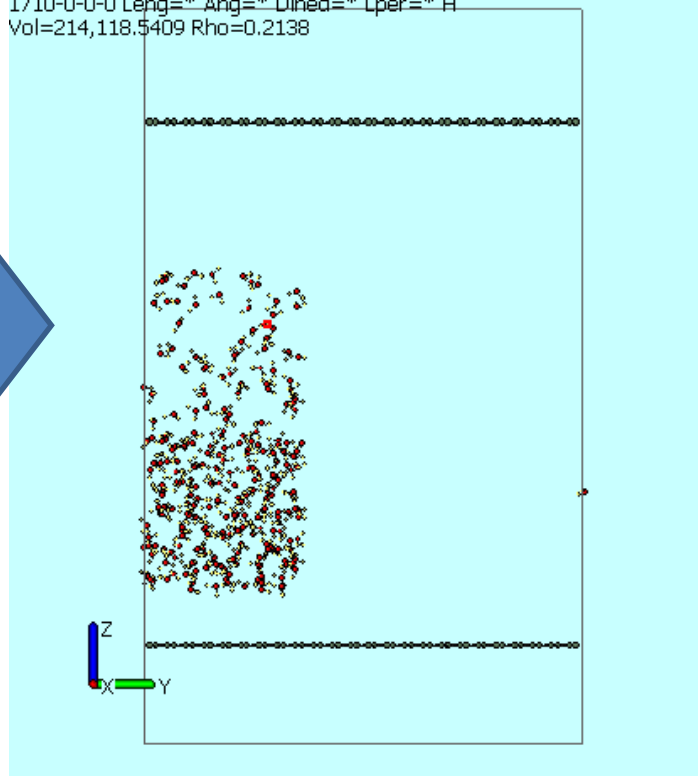


# I. 系の作成

「Expand」ボタンをクリックし、「OK」ボタンをクリックする。

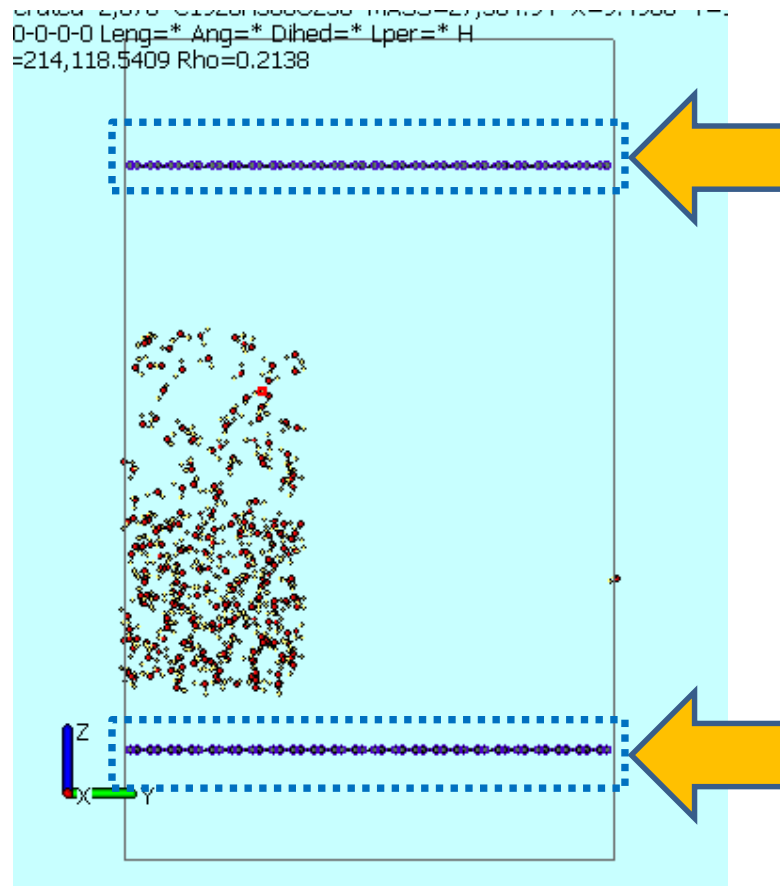


Generated 2,670 C1920H5000O250 MASS=27,564.94 X=9.4900 Y=14.  
1710-0-0-0 Leng=\* Ang=\* Dihed=\* Lper=\* H  
Vol=214,118.5409 Rho=0.2138



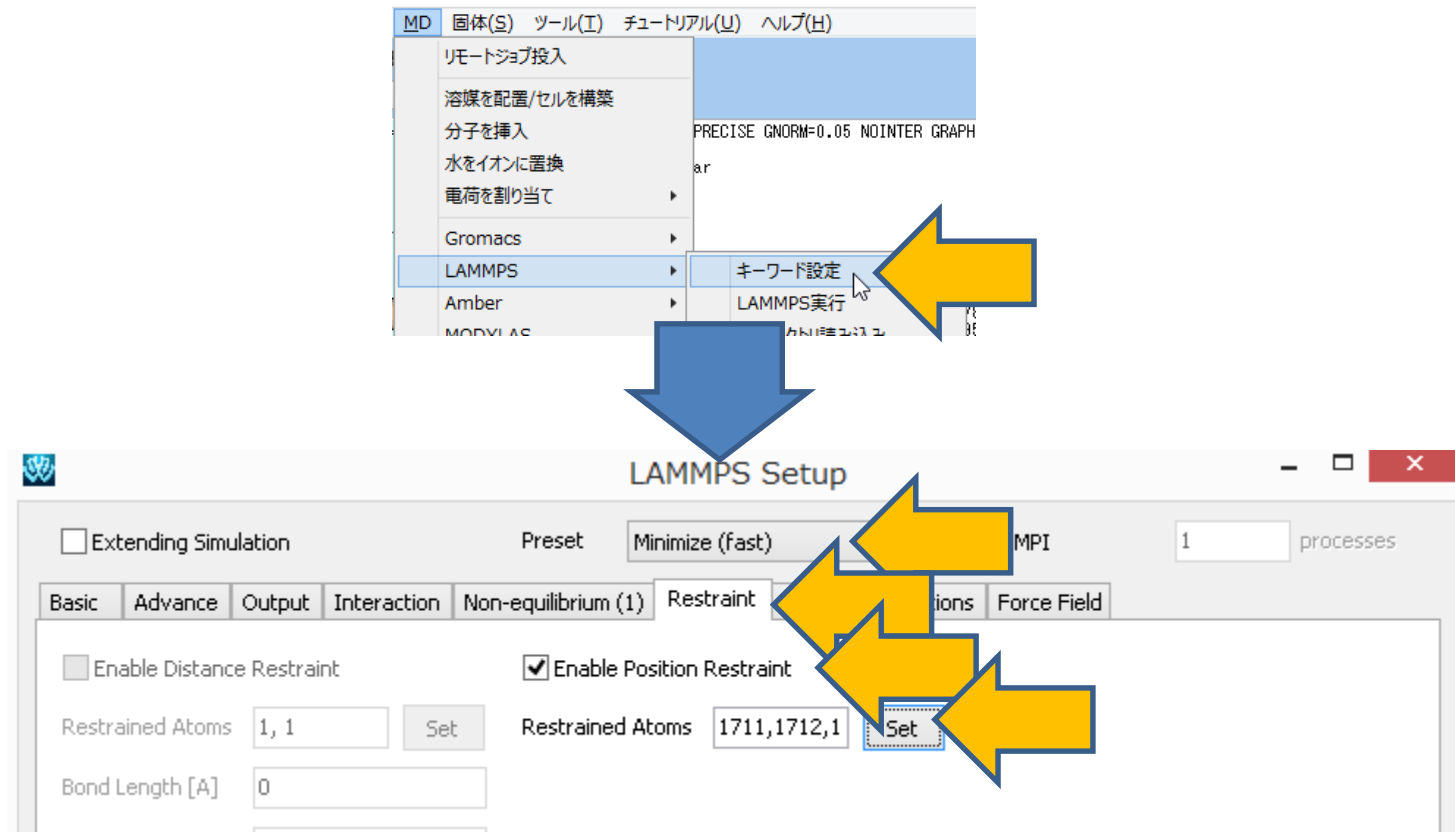
## II. 平衡化計算

キーワード設定前に、メイン画面にて上下のグラフェンをどちらもCtrl+ドラッグで囲い青色で選択された状態にする。



## II. 平衡化計算

[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックする。「Preset」に「Minimize (fast)」、「Restraining」タブの「Enable Position Restraint」にチェックを入れ、「Restrained Atoms」の「Set」ボタンをクリックする。



## II. 平衡化計算

続けて「Force Field」タブの「Force field (general)」の「Exception」ボタンをクリックする。Exceptionウインドウの左側の1つ目の「C960」にチェックを入れ、右側の欄に「0.319」、「0.392」と入力する。( *J. Phys. Chem. B*, 107. 1345–1352, (2003).より)

The image shows two screenshots from the LAMMPS software interface. The top screenshot is the 'LAMMPS Setup' dialog box, with the 'Force Field' tab selected. A yellow arrow points to the 'Force Field' tab, and another points to the 'Exception' button. The bottom screenshot is the 'Exception' dialog box, showing a table of molecules to be assigned LJ parameters. A yellow arrow points to the 'C960' row in the table, and two yellow arrows point to the 'Sigma / nm' and 'Epsilon / kJ/mol' columns, which contain the values '0.319' and '0.392' respectively.

**LAMMPS Setup**

Extending Simulation  Preset: Minimize (fast)  MPI

Basic Advance Output Interaction Non-equilibrium (1) Restraint Automatic Options Force Field

Generate parameters

Force field (General) GAFF Exception

(Water) SPC/E

**Exception**

Check molecules to be explicitly assigned LJ parameters

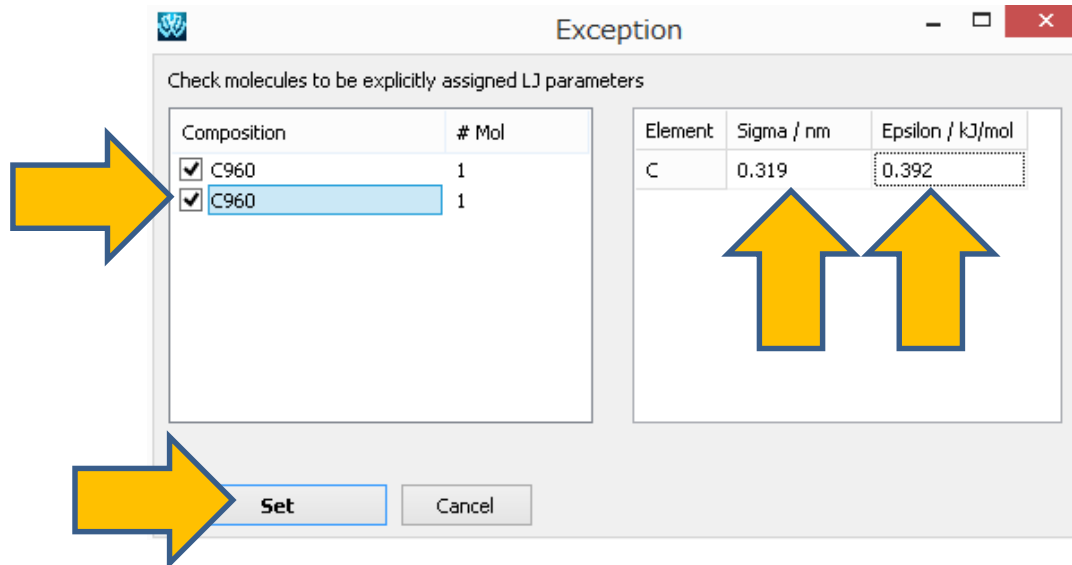
Composition	# Mol	Element	Sigma / nm	Epsilon / kJ/mol
<input checked="" type="checkbox"/> C960	1	C	0.319	0.392
<input type="checkbox"/> C960	1			

Set Cancel



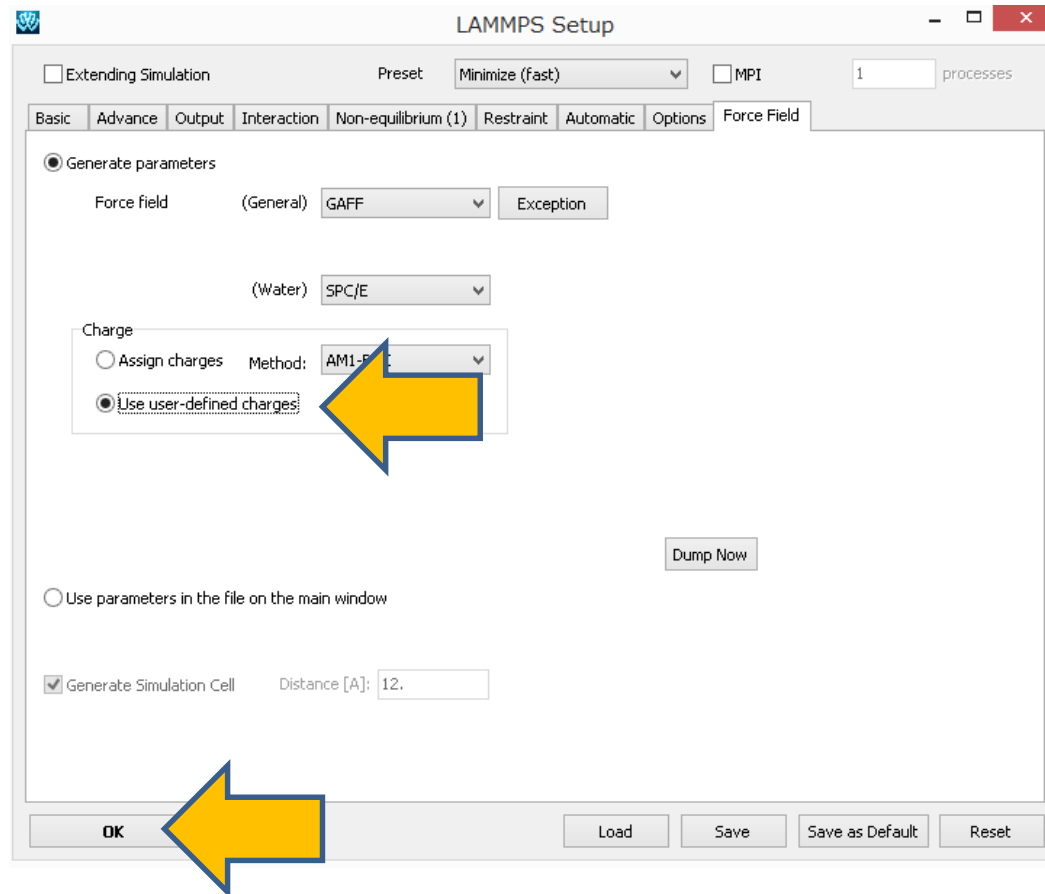
## II. 平衡化計算

同様に2つ目の「C960」にチェックを入れ、右側の欄に「0.319」、「0.392」と入力し、「Set」ボタンをクリックする。



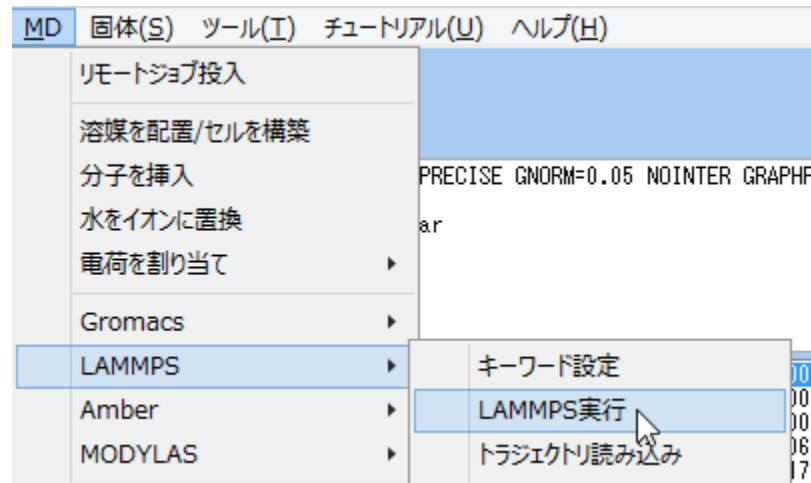
## II. 平衡化計算

戻ってきた「LAMMPS Setup」ウィンドウにおいて「Use user-defined charges」を選択し、「OK」ボタンを押す。



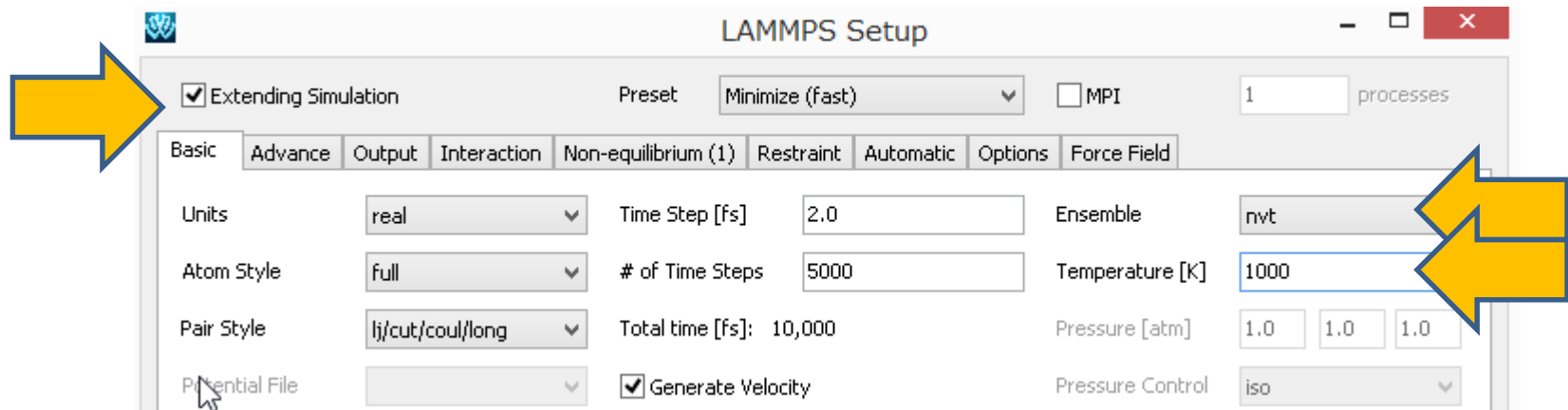
## II. 平衡化計算

[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックし、保存する.dataファイルの名前を指定すると計算が開始される。ここでは仮に「gwg.data」とする。



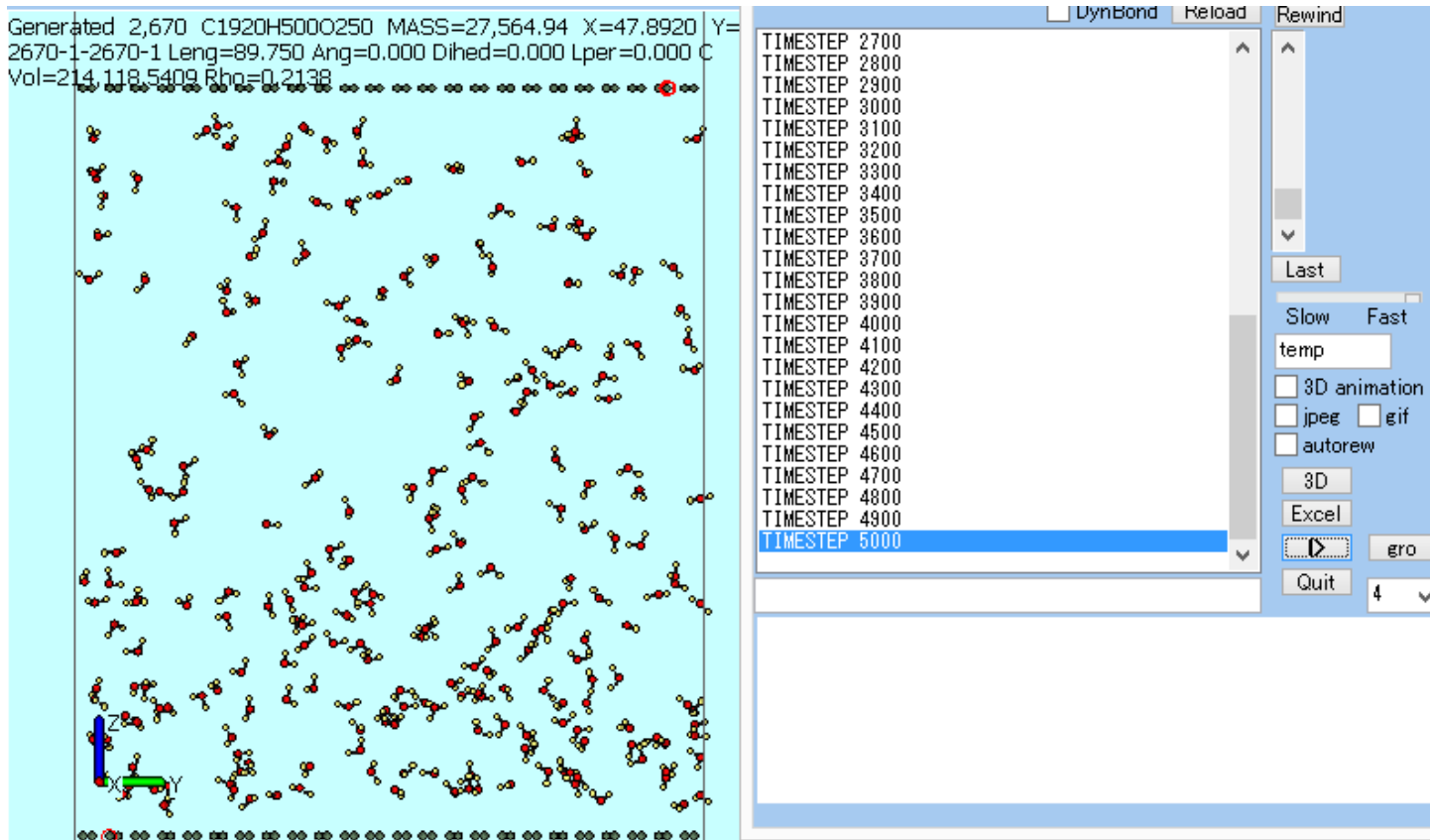
## II. 平衡化計算

計算終了後再び[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックする。  
「Extending Simulation」にチェックを入れ、「Basic」タブの「Ensemble」に「nvt」を  
選択し、「Temperature」を「1000」として「OK」する。  
そして、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックする。



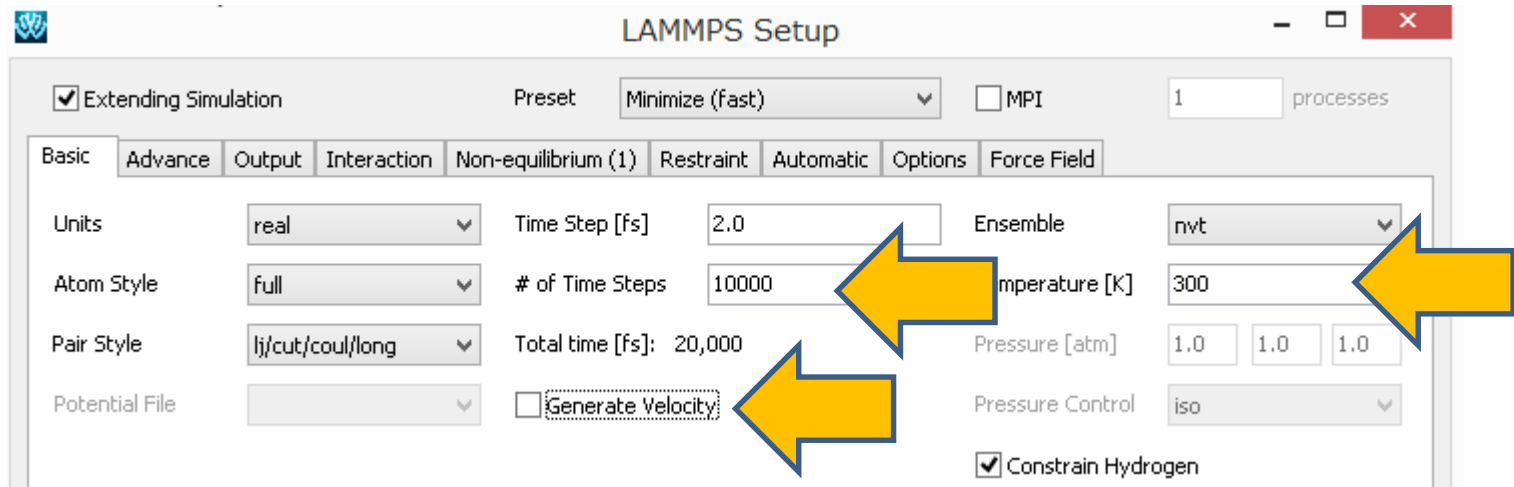
## II. 平衡化計算

計算終了後、[MD]-[LAMMPS]-[トラジェクトリ読み込み]でデフォルトで選択される data, dumpファイルを開く。メイン画面で赤色のカメラを選択しz方向を縦にとる。超臨界状態の水がグラフェンの間でほぼ一様に広がる様子が分かる。



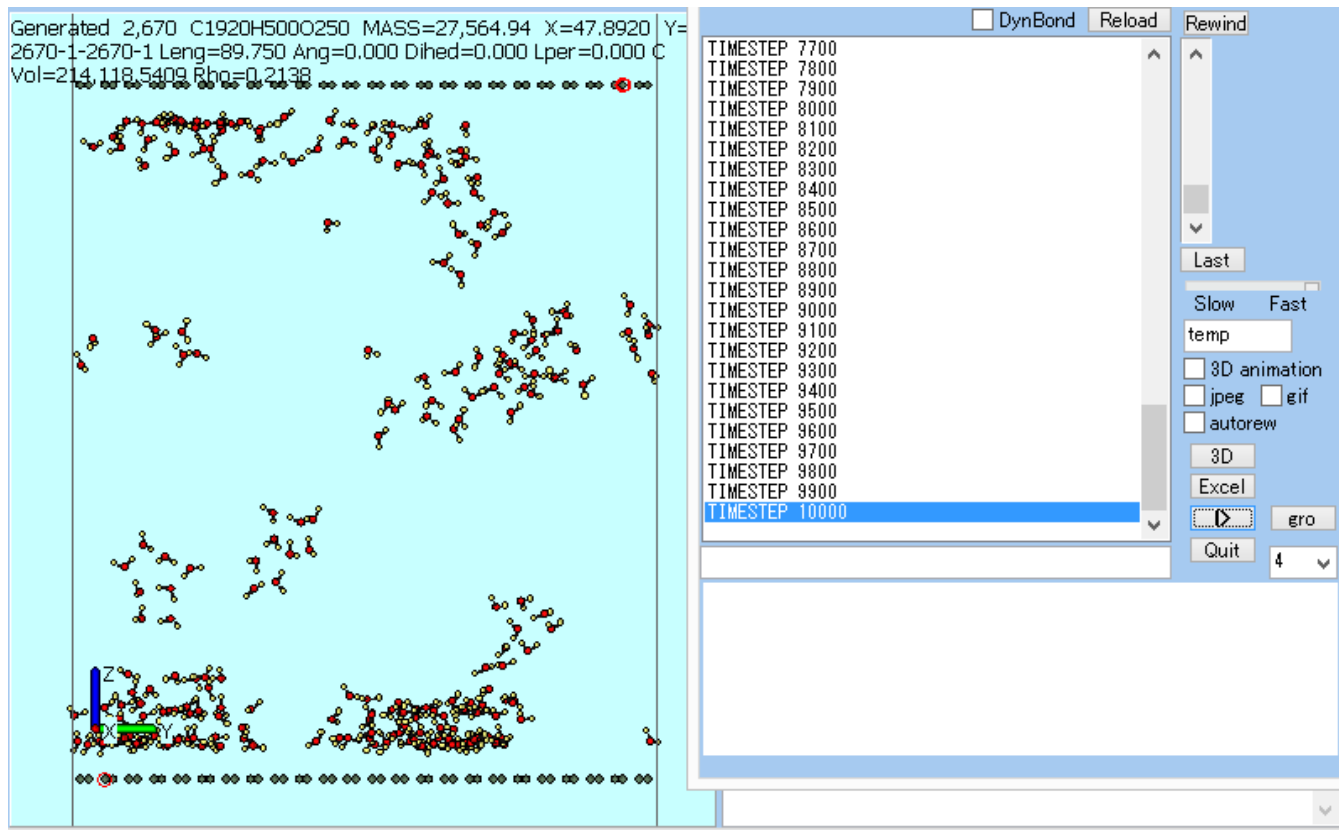
### III. プロダクトラン

再び[MD]-[LAMMPS]-[キーワード設定]をクリックする。  
「# of Time Steps」を「10000」とし、「Generate Velocity」のチェックを外し、  
「Temperature」を「300」として「OK」する。  
そして、[MD]-[LAMMPS]-[LAMMPS実行]をクリックする。



### III. プロダクトラン

計算終了後、[MD]-[LAMMPS]-[トラジェクトリ読み込み]でデフォルトで選択される data, dumpファイルを開く。メイン画面で赤色のカメラを選択しz方向を縦にとる。冷却により水分子は凝集し、一部はグラフェンに吸着している様子が分かる。



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!