

WinmostarTM チュートリアル LAMMPS 固体壁面を含む系 _{V9.2.1}

株式会社クロスアビリティ 2019年4月30日



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。



動作環境設定

本機能を用いるためには、LAMMPSとCygwinのセットアップが必要です。

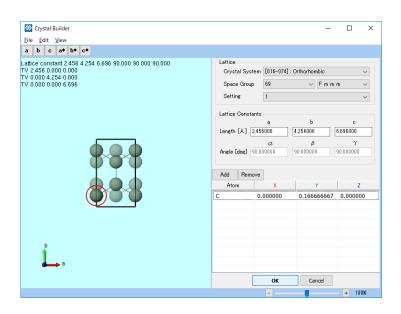
• https://winmostar.com/jp/download_jp.htmlのインストール方法のWindows用の LAMMPSとCygwinの設定手順に従います。

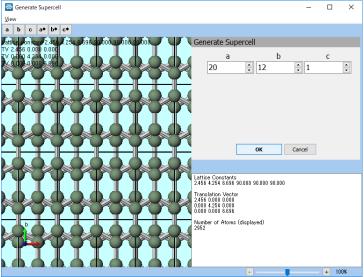
```
(6) Windows上で使用するソルパを、以下のリンク先の手順でインストールします。
GAMESS NWChem LAMMPS NAMD Quantum ESPRESSO FDMNES
※ Gromacs, Amber, MODYLAS, OpenMX(は(7)でインストールするcygwin_wmに含まれます。

(7) MDまたはSolidパックの計算(およびその他の一部の処理)を実行する場合は、以下のいずれかのリンク先の手順でCygwinの環境を構築します。
ビルド済みのcygwin_wmをインストールする場合(推奨)
cygwin_wmをビルドする場合(非推奨、上級者向け)
Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合(ベータ版)
```



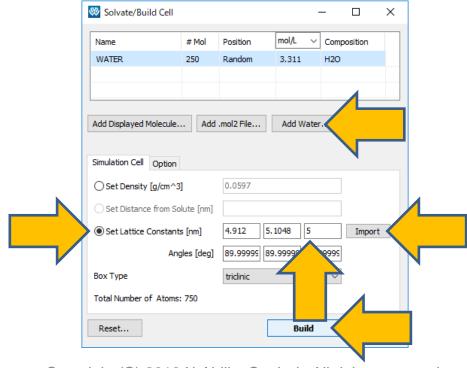
- 1. 固体 | 結晶ビルダをクリックする。
- 2. Orthorhombic 69 Fmmm、a=2.456 Å、b=4.254 Å、c=6.696 Å、(0.0, 0.166666667, 0.0)にC原子が置かれた結晶を作成し、OKをクリックする。
- 3. **固体 | スーパーセルを作成**をクリックする。
- 4. 20×12×1のスーパーセルを作成し、OKをクリックする。
- 5. ②(**名前を付けて保存**)をクリックし、graphene.cifとして保存する。







- 1. (溶媒を配置/セルを構築)をクリックする。
- 2. Add Waterをクリックし、250と入力してOKをクリックする。
- 3. Set Lattice Constants [nm]にチェックを入れ、Importをクリックする。
- 4. Importの左の0.6696を5に変更する。
- 5. Buildをクリックする。

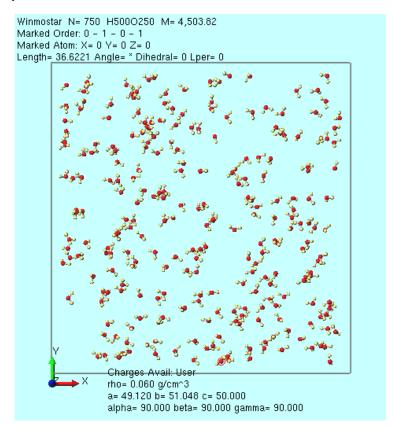


Copyright (C) 2019 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved.



水が配置された系が表示される。

- 1. **② (名前を付けて保存)**をクリックしwater.mol2として保存する。(必ずmol2形式で)
- 2. **MD | 界面ビルダ**をクリックする。



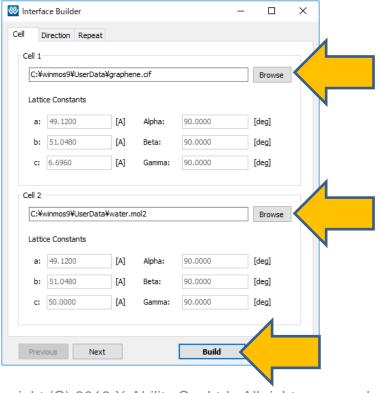




l. 系の作成

以下のように、グラフェンー水の界面を作成する。

- 1. Cell 1のBrowseをクリックし、graphene.cifを選択する。
- 2. Cell 2のBrowseをクリックし、water.mol2を選択する。
- 3. Buildをクリックし、graphene_water.mol2として保存する。



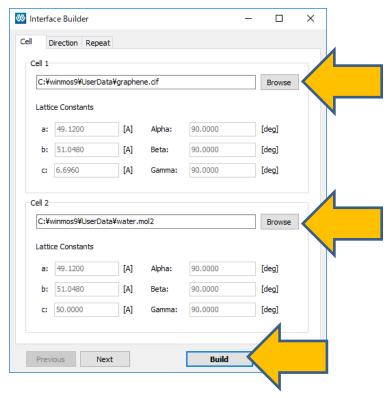
Copyright (C) 2019 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved.



l. 系の作成

以下のように、グラフェンー水ーグラフェンの界面を作成する。

- 1. Cell 1にgraphene_water.mol2、Cell 2にgraphene.cifを選択する。
- 2. Buildをクリックし、gwg.mol2として保存する。
- 3. Closeをクリックする。

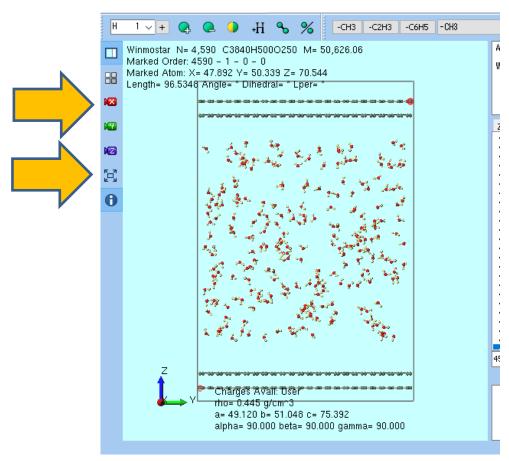


Copyright (C) 2019 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved.



l. 系の作成

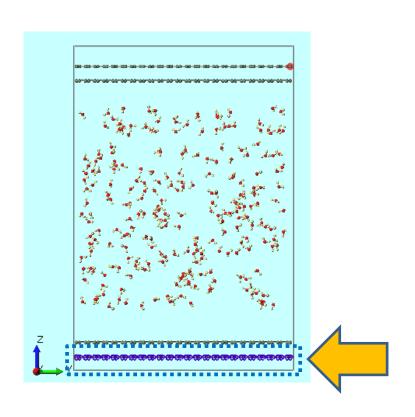
- 1. 図 (X軸方向から表示) をクリックする。
- 2. **冥** (ウィンドウに合わせる) をクリックする。

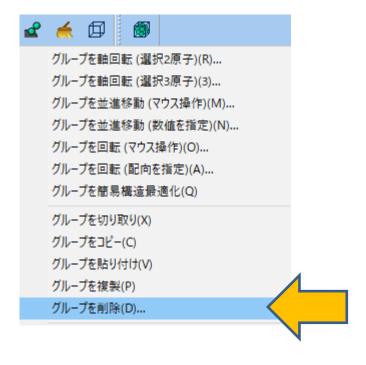


グラフェンに水の相が 挟まれている様子が分かる。



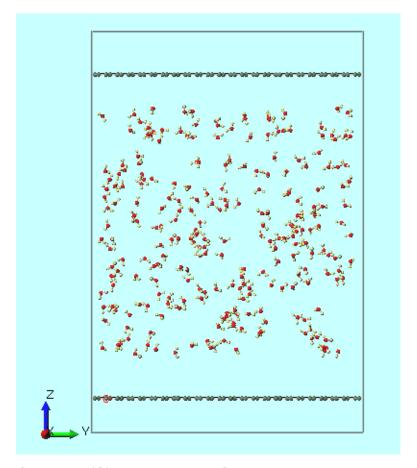
- 1. Ctrl+ドラッグで、下のグラフェン2層のうち下の1層を選択する。
- 2. **ぱ**(グループ編集) | グループを削除を選択する。
- 3. Deleteをクリックする。







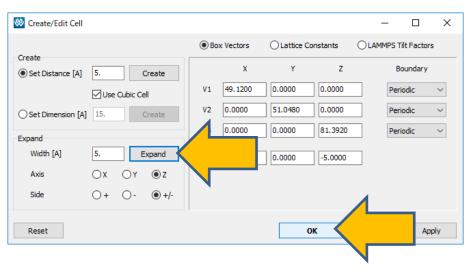
- 1. 同様にして、上のグラフェン2層のうちの上の1層も削除する。
- 2. (セルを作成/編集)を選択する。

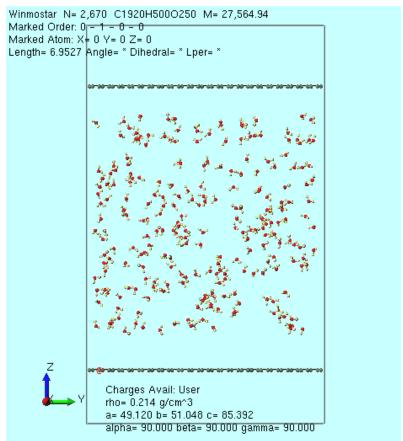


Copyright (C) 2019 X-Ability Co.,Ltd. All rights reserved.



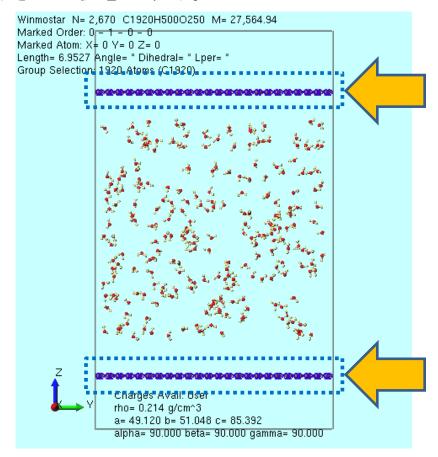
- 1. Expandをクリックする。
- 2. **OK**をクリックする。





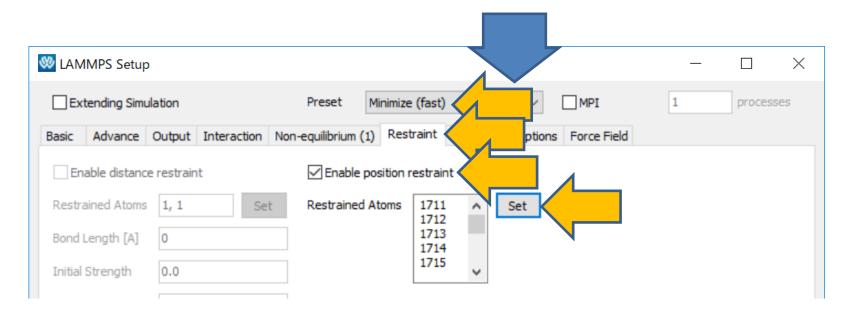


キーワード設定前に、メイン画面にて上下のグラフェンをどちらもCtrl+ドラッグで囲いグループ選択(青色)された状態にする。



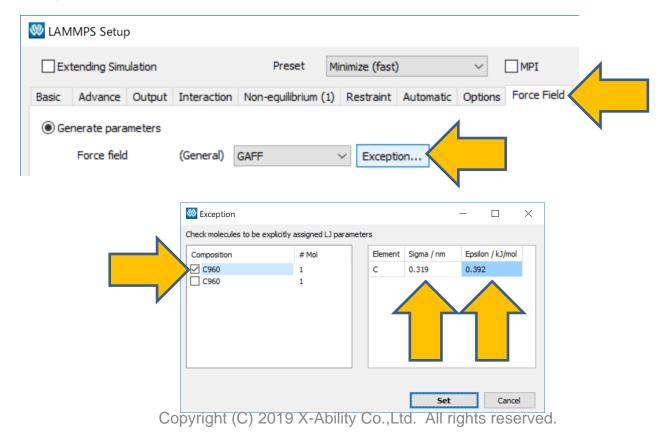


- 1. ソルバー覧からLAMMPSを選択し、**(キーワード設定**)をクリックする。
- 2. Resetをクリックする。
- 3. PresetにMinimize (fast)を選択する。
- 4. RestraintタブのEnable position restraintにチェックを入れ、Restrained AtomsのSetをクリックする。



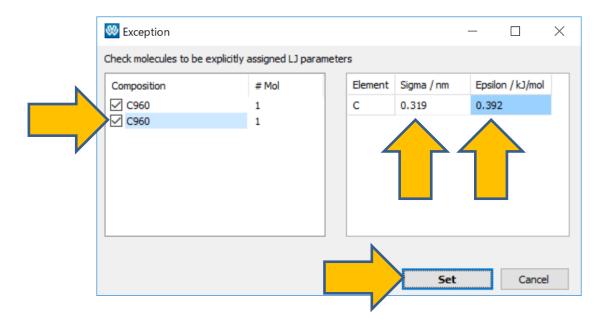


- 1. Force FieldタブのForce field (general)のExceptionをクリックする。
- 2. Exceptionウインドウの左側の1つ目のC960にチェックを入れ、 右側の欄に0.319、0.392と入力する。
 - (*J. Phys. Chem. B*, 107. 1345-1352, (2003).より)



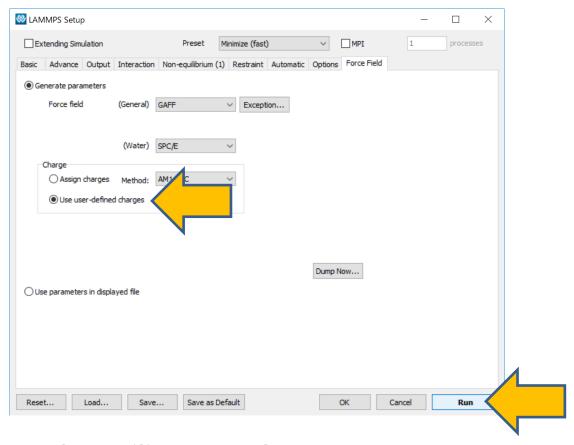


- 1. 同様に2つ目のC960にチェックを入れ、右側の欄に0.319、0.392と入力する。
- 2. **Set**をクリックする。



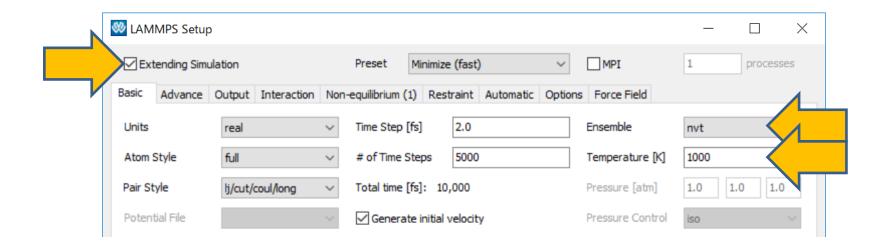


- 1. LAMMPS Setupウインドウにおいて、Use user−defined chargesを選択する。
- 2. Runをクリックする。保存時のファイル名はgwg.dataとする。



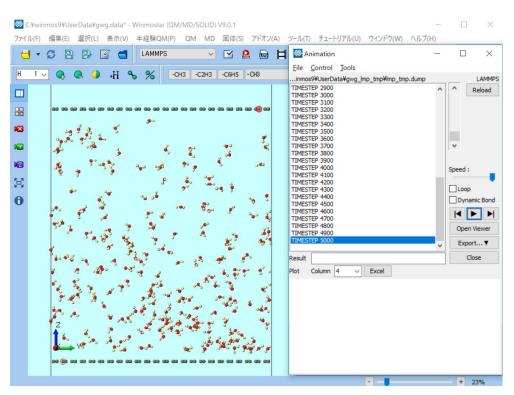


- 計算終了後、
 (キーワード設定)をクリックする。
- 2. Extending Simulationにチェックを入れる。
- 3. BasicタブのEnsembleにnvtを選択し、Temperatureを1000とする。
- 4. Runをクリックする。





- 1. 計算終了後、**口** (トラジェクトリ読み込み)をクリックし、 デフォルトで選択されるdata, dumpファイルを開く。
- 2. 🚾 (X軸方向から表示)をクリックする。
- 3. ▶ (再生)をクリックする。

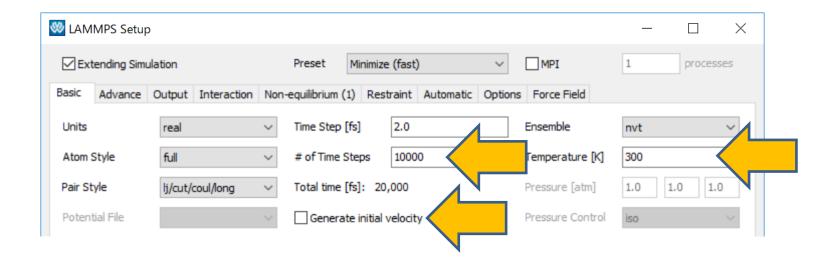


超臨界状態の水がグラフェンの間でほぼ一様に広がる様子が分かる。



Ⅲ. プロダクトラン

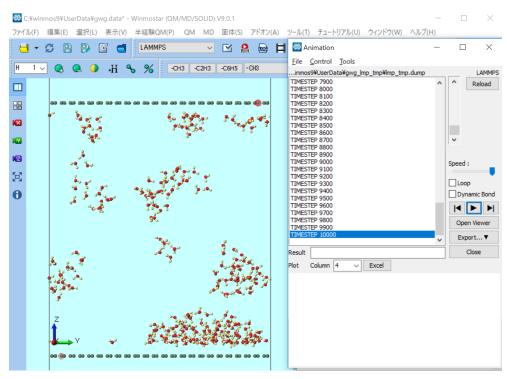
- 1. (キーワード設定)をクリックする。
- 2. # of Time Stepsを10000とし、Generate initial velocityのチェックを外し、Temperatureを300に変更する。
- 3. **Run**をクリックする。





Ⅲ. プロダクトラン

- 1. 計算終了後、**口**(トラジェクトリ読み込み)をクリックし、 デフォルトで選択されるdata, dumpファイルを開く。
- 2. メイン画面で **図** (**X軸方向から表示**)を選択しクリックする。
- 3. ▶ (再生)をクリックする。



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。



https://www.facebook.com/X-Ability-CoLtd-168949106498088/



Copyright (C) 2019 X-Ability Co., Ltd. All rights reserved.