

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。

 <u>https://winmostar.com/jp/download_jp.html</u>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。
- Orthorhombic 69 Fmmm、a=2.456 Å、b=4.254 Å、c=6.696 Å、 (0.0, 0.1666666667, 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。

Ι.

🥺 Crystal Builder	– 🗆 X	🥺 Generate Supercell —	
<u>F</u> ile <u>E</u> dit <u>V</u> iew		View	
a b c a* b* c*		a b c a* b* c*	
Lattice constant 2.456 4.254 6.696 90.000 90.000 90.000 TV 2.456 0.000 0.000 TV 0.000 4.254 0.000 TV 0.000 0.000 6.696	Lattice Crystal System [016-074]: Orthorhombic Space Group 69 Settine 1 Lattice Constants a b c	Attraction Generate Supercell TV 2.856 0.000 0.000 0.000 TV 0.456 0.000 0.000 0.000 V.4.000 0.000 0.0000 V.4.000 0.000	C
***	Length [A] 2456000 4254000 6.596000 Angle [deg] 90.00000 90.00000 90.00000 Add Remove	OK Cancel	
	Atom X Y Z C 0.000000 0.166666667 0.000000	Lattice Constants 2456 4254 6.858 90.000 90.000 90.000	
a a	OK Capel	Participation of Atoms (displayed)	
	- + 100%	R. 400. 400. 400. 400. 400. 400. 400. 40	+ 100%



- 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。

Ι.

- 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。

Name	# Mol	Position	mol/l ~	Composit	ion
Ivalle	# 1101	POSICION	0.014	Composit	
WATER	250	Random	3.311	H2O	
Add Displayed Malagula	٨.٢	mal 2 File	Add Water		
Add Displayed Molecule	Auu		Auu water	· \	
Simulation Cell Option					
⊖ Set Density [g/cm^3]		0.0597			
Cat Distance from Cal	the formal				
Set Distance from Solu	ite (nmj				
Set Lattice Constants	[nm]	4.912 5.	1048 5	I	import
Angle	es [deg]	89.99995 89	.99999	9999	
Pay Type		Anti-State	Z		
box Type		triclinic		× .	
Total Number of Atoms:	750				1
			Build		



水が配置された系が表示される。

- 2. MD | 界面ビルダをクリックする。



Ι.





I. 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。

ell 1-					/	
C:¥	winmos9¥UserDa	ata¥graphe	ne.cif		Browse	
atti	ce Constants					
a:	49.1200	[A]	Alpha:	90.0000	[deg]	
b:	51.0480	[A]	Beta:	90.0000	[deg]	
c:	6 6960	[4]	Camma:	00.0000	[dea]	
ell 2 C:¥\	winmos9¥UserDa	ata¥water.r	nol2	50.0000	Browse	
ell 2 C:¥i	winmos9¥UserDa	ata¥water.r	nol2	50.0000	Browse	
ell 2 C:¥i Lattic	winmos9¥UserDa ce Constants	ata¥water.r	nol2	90.0000	Browse	
ell 2 C:¥\ .attic a:	winmos9¥UserDa ce Constants 49.1200	ata¥water.r	nol2 Alpha:	90.0000	[deg]	
ell 2 C:¥v attic a: b:	winmos9¥UserDa ce Constants 49,1200 51.0480	ata¥water.r [A]	nol2 Alpha: Beta:	90.0000	[deg] [deg]	
ell 2 C:¥\ Lattic a: b: c:	winmos9¥UserDa ce Constants (49, 1200 (51,0480 (50,0000)	[A]	Alpha: Beta: Gamma:	90.0000 90.0000 90.0000	[deg] [deg] [deg]	
ell 2- C:¥i a: b: c:	winmos9¥UserDa ce Constants (49.1200 (51.0480) (50.0000)	[A] [A] [A] [A]	nol2 Alpha: Beta: Gamma:	90.0000 90.0000 90.0000 90.0000	[deg] [deg] [deg]	



I. 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。

::¥1	winmos9¥UserDa	ata¥grapher	ne.cif		Browse	
atti	ce Constants					
a:	49.1200	[A]	Alpha:	90.0000	[deg]	
b:	51.0480	[A]	Beta:	90.0000	[deg]	
c:	6.6960	[A]	Gamma:	90.0000	[deg]	
2- ::¥\	vinmos9¥UserDa	ata¥water.n	nol2		Browse	
l 2 C:¥i	winmos9¥UserDa ce Constants	ata¥water.n	nol2		Browse	
l 2- C:¥i atti	winmos9¥UserDa ce Constants 49,1200	ata¥water.n	nol2 Alpha:	90.0000	Browse [deg]	
l 2- C:¥i attii a: b:	winmos9¥UserDa ce Constants 49.1200 51.0480	ata¥water.n [A] [A]	nol2 Alpha: Beta:	90.0000	Browse [deg] [deg]	



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

Ι.



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. **2** (グループ編集) | グループを削除を選択する。

Ι.

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。

Ι.

2. (ロルを作成/編集)を選択する。



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



Ι.

- 1. Expandをクリックする。
- 2. OKをクリックする。

🥨 Create/Edit Cell						_	- 🗆	×
		● Bo	ox Vectors	O Lattice Co	onstants		PS Tilt Facto	ors
Create Set Distance [A]	5. Create		x	Y	Z		Boundary	/
O secondance [A]		V1	49.1200	0.0000	0.0000		Periodic	\sim
O Set Dimension [A]	15. Create	V2	0.0000	51.0480	0.0000		Periodic	\sim
Expand		Λ	0.0000	0.0000	81.3920		Periodic	\sim
Width [A]	5. Expand			0.0000	-5.0000			
Axis	Ox Oy ⊛z							
Side	○+ ○- ●+/-							
Reset				C	ж		A	pply





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、M(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。
- 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。

🥨 LAMMPS Setup		- 🗆 ×
Extending Simulation	Preset Minimize (fast)	1 processes
Basic Advance Output Interaction Non	n-equilibrium (1) Restraint ptions Force Field	
Enable distance restraint	Enable position restraint	
Restrained Atoms 1, 1 Set	Restrained Atoms 1711 A Set	
Bond Length [A] 0	1713 1714	
Initial Strength 0.0	1715 🗸	



- 1. Force FieldタブのForce field (general)のException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)

🥙 lam	IMPS Setup	þ									
Ex	tending Sim	ulation		Preset	Minimize	e (fast)		~	MPI		
Basic	Advance	Output	Interaction	Non-equilibrium	(1) Res	traint	Automatic	Options	Force F	ield	
() Ge	nerate para	meters									
	Force field	I	(General)	GAFF	~ E	Exceptio	on				
			😻 Exception					- 0	×		
			Check molecule	s to be explicitly assign	ed LJ paramete	rs					
			Composition	# Ma		Element	Sigma / nm	Epsilon / kJ	/mol		
			C960	1		C	0.319	0.392			
							Set	G	ancel		
		Co	opvriaht (C) 2019 X-	Ability (CoLt	td. All ri	ahts re	serve	d.	



- 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。

Ex	tending Simul	lation		Preset	Minimize (f	ast)	\sim	MPI	1	process	ses	
Basic	Advance	Output	Interaction	Non-equilibrium	(1) Restrai	int Autom	atic Options	; Force Field	d			
● Ge	enerate paran	meters										
	Force field		(General)	GAFF	✓ Exc	eption						
			(Water)	SPC/E	\sim							
Г	Charge											
	O Assign d	charges	Method:	AM1 C	~							
	Use use	er-defined	charges									
							Dump	Now				
OUs	e parameters	s in displa	yed file				Dump	Now				
OUs	e parameters	s in displa	yed file				Dump	Now				
OUs	e parameters	s in displa	yed file				Dump	Now				
OUs	e parameters	s in displa	yed file				Dump	Now				
OUs	e parameters	s in displa	yed file				Dump	Now				
Ous	e parameters	s in displa	yed file		2.6.4		Dump	Now	General			1



- 1. 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。

🥙 lam	MPS Setur	D								_		×
Ext	ending Sim	ulation			Preset	1inimize	(fast)	\sim	MPI	1	process	es
Basic	Advance	Output	Interaction	Nor	n-equilibrium (1)	Rest	raint Auton	matic Options	s Force Field			
Units		real		\sim	Time Step [fs	5]	2.0		Ensemble	nvt		
Atom 9	Style	full		\sim	# of Time Ste	eps	5000		Temperature [K]	1000		
Pair St	yle	lj/cut/o	coul/long	\sim	Total time [fs	s]: 10	,000		Pressure [atm]	1.0	1.0 1.0	
Potent	ial File			\sim	🗹 Generate	initial	/elocity		Pressure Control	iso		\sim



- 計算終了後、□ (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. 図(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。

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



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。

🥨 lam	MPS Setup	þ									_	C) ×
✓ Ext	tending Sim	ulation			Preset	Minim	nize (fast))	~	MPI	1	pr	ocesses
Basic	Advance	Output	Interaction	Non	-equilibrium (1) R	estraint	Automatic	Options	s Force Field			
Units		real		\sim	Time Step	[fs]	2.0			Ensemble	nvt		~
Atom S	Style	full		\sim	# of Time \$	Steps	1000	0		[emperature [K]	300		
Pair St	yle	lj/cut/	coul/long	\sim	Total time	[fs]:	20,000			Pressure [atm]	1.0	1.0	1.0
Potent	tial File			\sim	Genera	te initi	al velocit	y 🖊 🗌		Pressure Control	iso		\sim



III. プロダクトラン

- 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。
 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/

