

Winmostar™ チュートリアル

LAMMPS

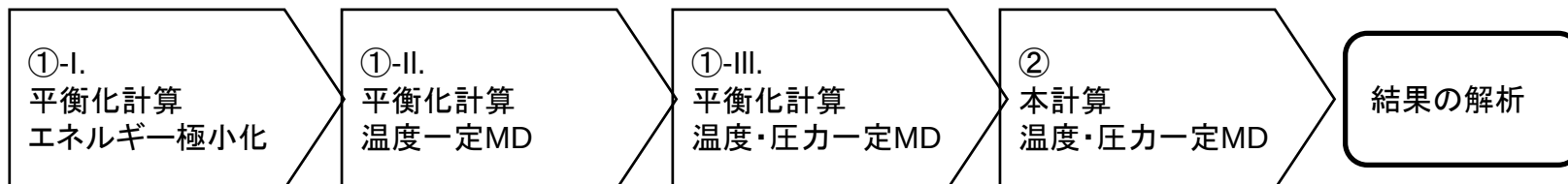
基礎編

V9.2.0

株式会社クロスアビリティ
2019年4月8日

概要

- 常温常圧のテトラヒドロフラン (THF) の液体について、系の作成と平衡化計算と本計算を実行し、エネルギーとトラジェクトリの確認、動径分布関数、自己拡散係数、比熱、体積弾性率の算出を行います。



注意点:

- 本チュートリアルでは、実施時間を短縮するため平衡化計算のステップ数を短めに設定しています。
- 同様の理由で計算精度は落とし、ソルバ間で完全に計算条件を一致させることは難しいため、他のソルバで計算した結果と異なることがあります。
- 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。
- 平衡化計算、本計算のステップ数が大きいほど、再現性が良く、信頼性の高い結果を取得することができます。
- 相互作用計算方法や力場の種類も、計算結果に大きく影響します。

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上で使用するソルバを、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バックの計算（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。

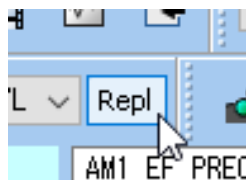
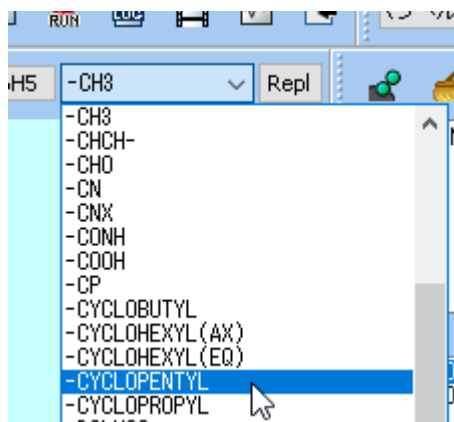
[ビルド済みのcygwin_wmをインストールする場合（推奨）](#)

[cygwin_wmをビルドする場合（非推奨、上級者向け）](#)

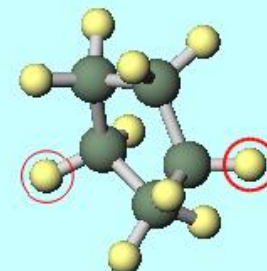
[Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合（ベータ版）](#)

1. 分子を作成

1. ファイルメニュー | 新規をクリックする。
2. ツールバーのフラグメントを選択プルダウンメニューで-CYCLOPENTYLを選択する。
3. Replボタンをクリックするとシクロペンタンが作成される。

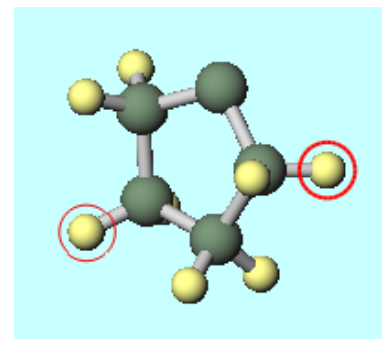
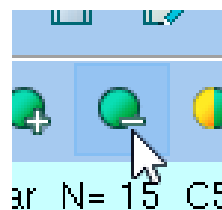
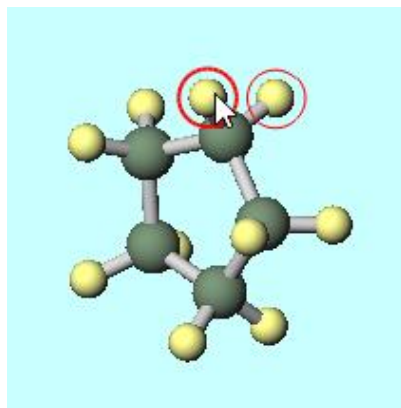
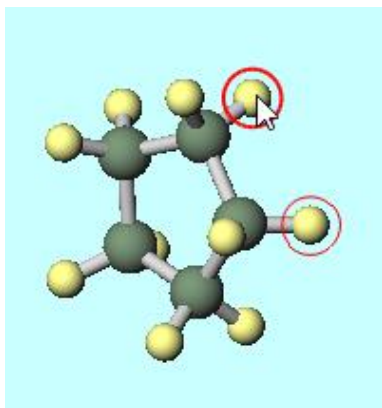


Winmostar N= 15 C5H10 M= 70.13
Marked Order: 2 - 15 - 1 - 2
Marked Atom: X= 1.1 Y= 0 Z= 0
Length= 4.1707 Angle= 10.069 Dihedral= 0 Lper= 0



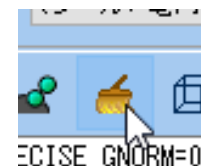
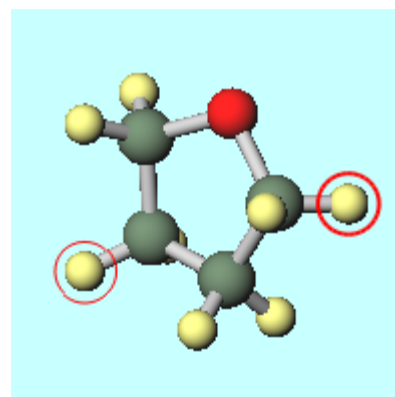
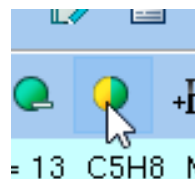
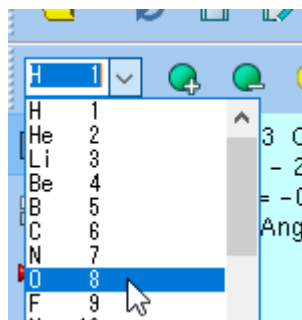
1. 分子を作成

1. ある炭素(緑)に接続した2つの水素(黄色)を続けて左クリックする。
2. 原子を削除ボタンを2回押す。



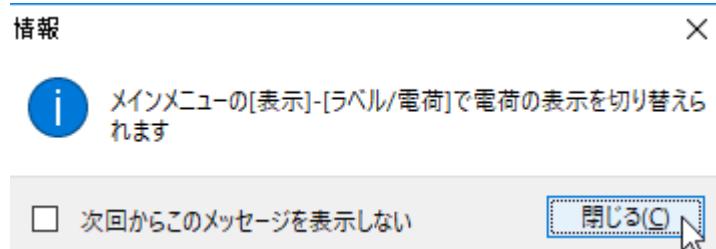
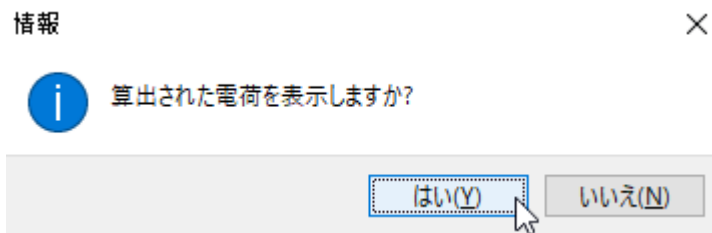
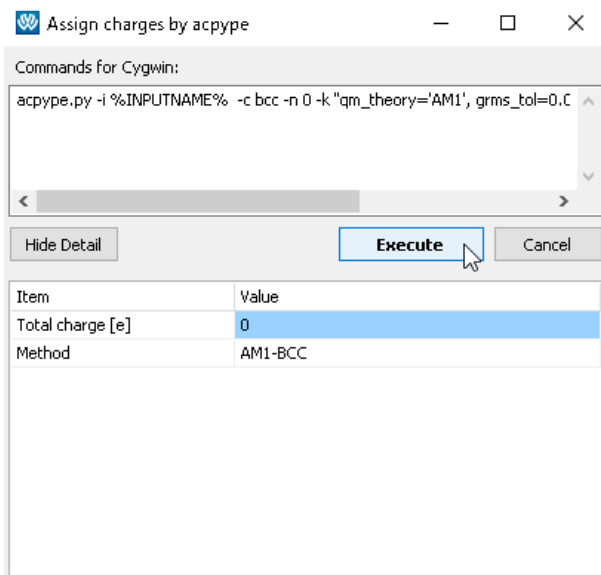
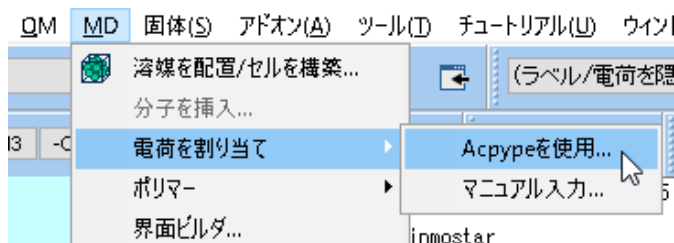
1. 分子を作成

1. 水素を削除した炭素を左クリックする。
2. 編集操作で適用される元素を選択プルダウンメニューからO 8を選択する。
3. 元素を変更ボタンをクリックするとTHF分子となる。
4. 簡易構造最適化ボタンを押し原子配置を自動調整する。



II. 電荷を割り当て

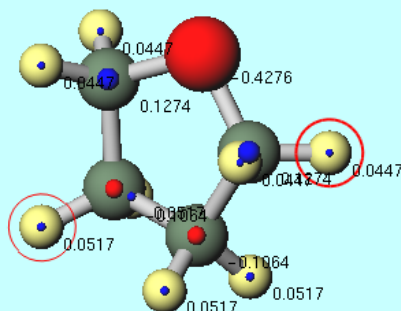
1. MDメニュー | 電荷を割り当て | Acpypeを使用をクリックする。
2. Assign charges by acpypeウインドウでExecuteボタンを押す。
3. 情報ダイアログが2回出現したらいずれもはいボタンを押す。



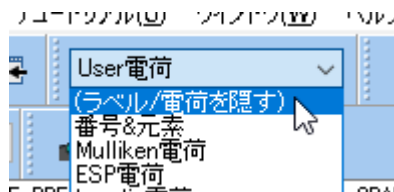
II. 電荷を割り当て

1. 分子表示エリア下部にCharges Avail: Userと表示され、割り当てられた電荷が表示されることを確認する。
2. ラベル/電荷プルダウンメニューで(ラベル/電荷を隠す)を選択し、電荷を非表示にする。

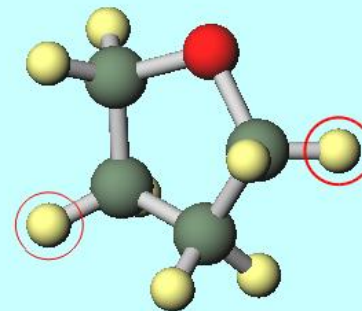
Winmostar N= 13 C4H8O M= 72.11 Qtot= 0.00
Marked Order: 2 - 13 - 0 - 0
Marked Atom: X= 1.1 Y= 0 Z= 0 Q= 0.0447
Length= 4.1707 Angle= * Dihedral= * Lper= *



Charges Avail: User



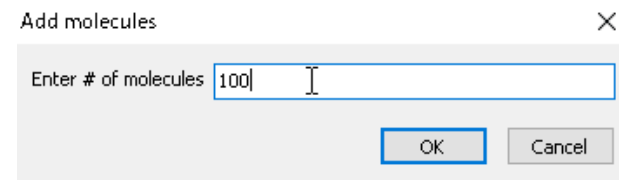
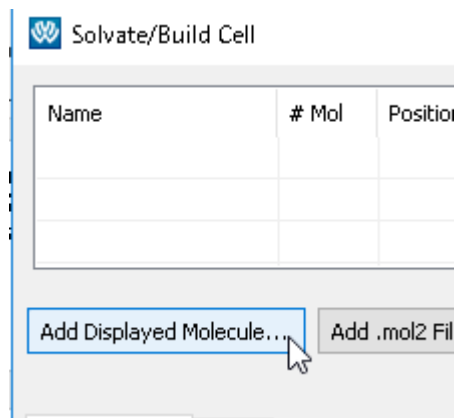
Winmostar N= 13 C4H8O M= 72.11
Marked Order: 2 - 13 - 0 - 0
Marked Atom: X= 1.1 Y= 0 Z= 0
Length= 4.1707 Angle= * Dihedral= * Lper= *



Charges Avail: User

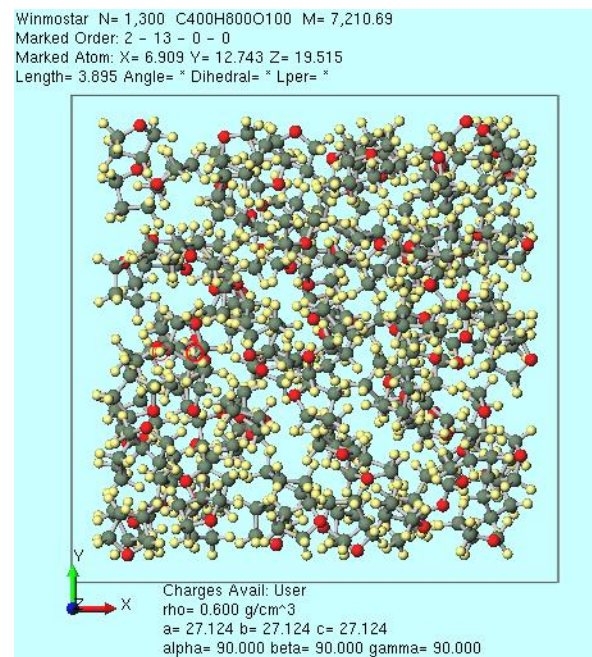
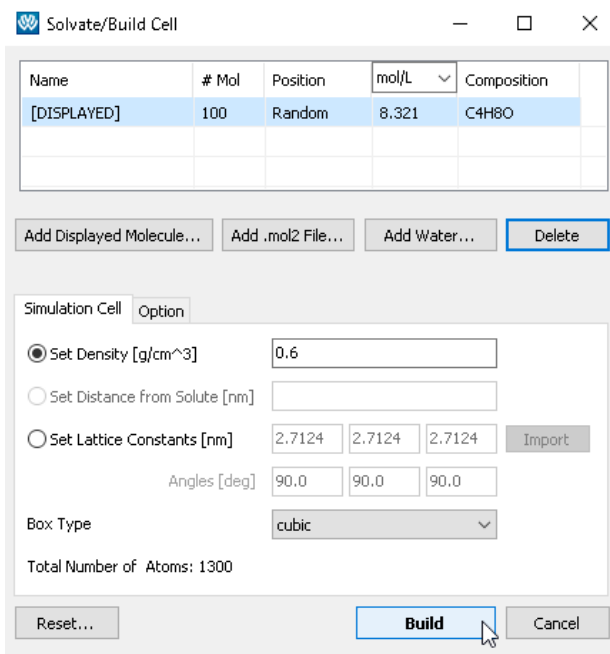
III. 液相を作成

1. 溶媒を配置/セルを構築ボタンをクリックする。
2. Add Displayed Moleculeボタンをクリックし、出現したダイアログで100と入力しOKボタンを押す。



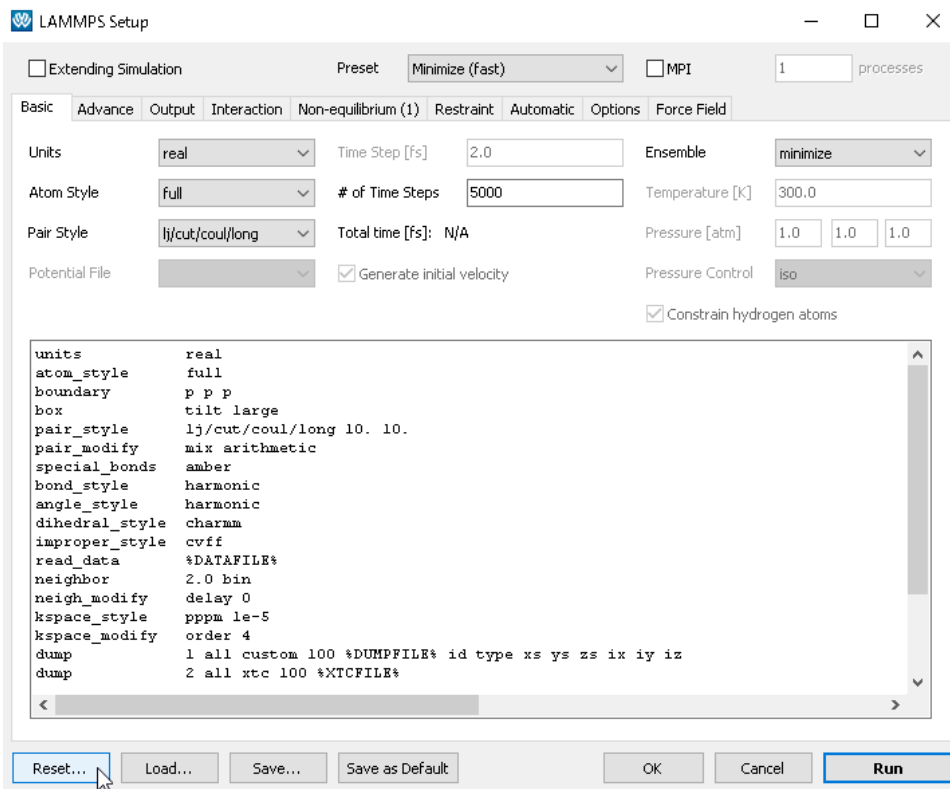
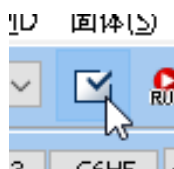
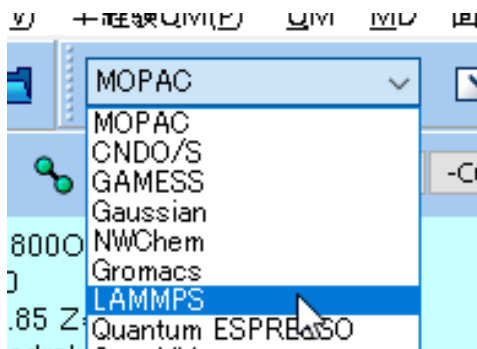
III. 液相を作成

1. **Lattice Constants [nm]**に作成される系のサイズが表示されるので、使用予定のカットオフ半径(今回は1.0 nm)の倍より大きいことを確認する。
2. **Build**ボタンを押すと黒いターミナルウィンドウが数秒間出現し、処理に成功するとTHF分子が0.6 g/cm³で100個並んだ系が出現する。系のサイズ、密度は分子表示エリア下部に表示される。



IV. 平衡化(エネルギー極小化)

1. ソルバを選択プルダウンメニューでLAMMPSを選択する。
2. キーワード設定ボタンを押す。
3. ウィンドウ左下のResetボタンを押し、警告ダイアログでははいボタンをクリックする。



IV. 平衡化(エネルギー極小化)

1. Force Fieldタブを開き、Generate parameters | Charge | Use user-defined chargesをクリックする。
2. ウィンドウ右下のRunボタンをクリックし、座標ファイルの名前を「thf_liquid」として入力し保存ボタンを押す。
3. ジョブマネージャが起動し、順次LAMMPSが開始される。

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

Charge

☐ Assign charges Method: AM1-BCC

☒ Use user-defined charges

OK Cancel **Run**

新規ジョブを開始する前に座標ファイルを保存してください

winmos9 > UserData > UserDataの検索

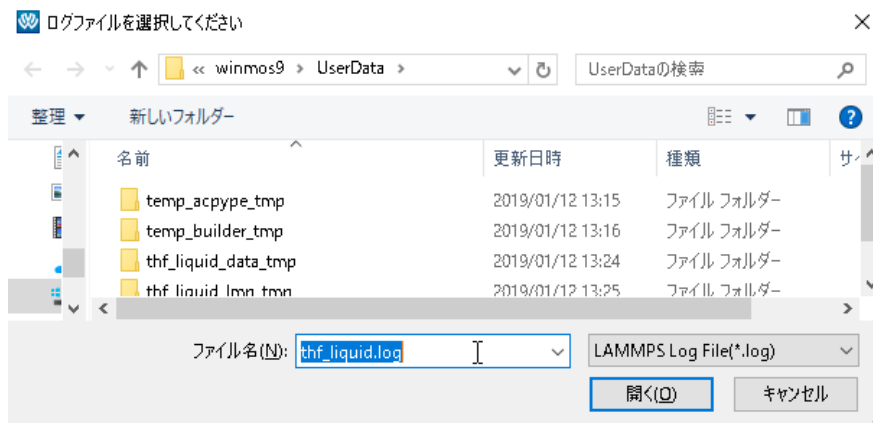
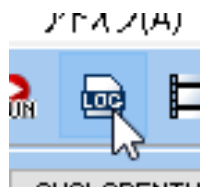
ファイル名(N): thf_liquid

ファイルの種類(T): LAMMPS data File (*.data)

フォルダーの参照(B) 保存(S) キャンセル

IV. 平衡化(エネルギー極小化)

1. ターミナルウィンドウが消えた後、ログを表示ボタンを押す。
2. 出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。
3. 先ほどの計算のログがテキストエディタで表示されるので、そこでエラーの表示がないことを確認し、テキストエディタを終了する。



thf_liquid.log - メモ帳

ファイル(F)	編集(E)	書式(O)	表示(V)	ヘルプ(H)
1040	1040	0	231.4877	0 231.4877 60.140033 -588.7638 19955.435
1050	1050	0	231.07533	0 231.07533 61.618412 -582.26704 19955.435
1060	1060	0	230.70439	0 230.70439 58.724392 -590.93655 19955.435
1066	1066	0	230.49946	0 230.49946 54.608826 -604.37378 19955.435

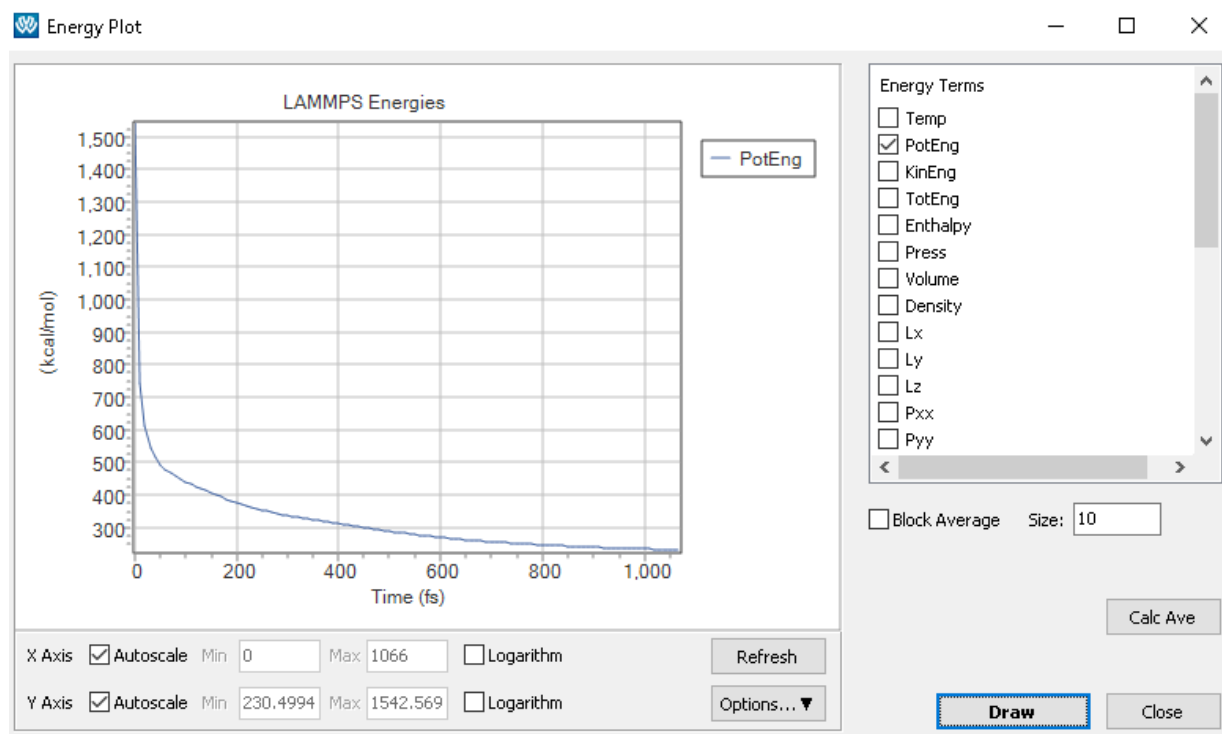
Loop time of 7.11046 on 8 procs for 1066 steps with 1300 atoms

86.8% CPU use with 8 MPI tasks x 1 OpenMP threads

Minimization stats:
 Stopping criterion = energy tolerance
 Energy initial, next-to-last, final = |
 1542.56940763 230.521618012 230.499457739
 Force two-norm initial, final = 1050.85 5.41652
 Force max component initial, final = 194.953 0.86552
 Final line search alpha, max atom move = 0.022115 0.019141
 Iterations, force evaluations = 1066 2131

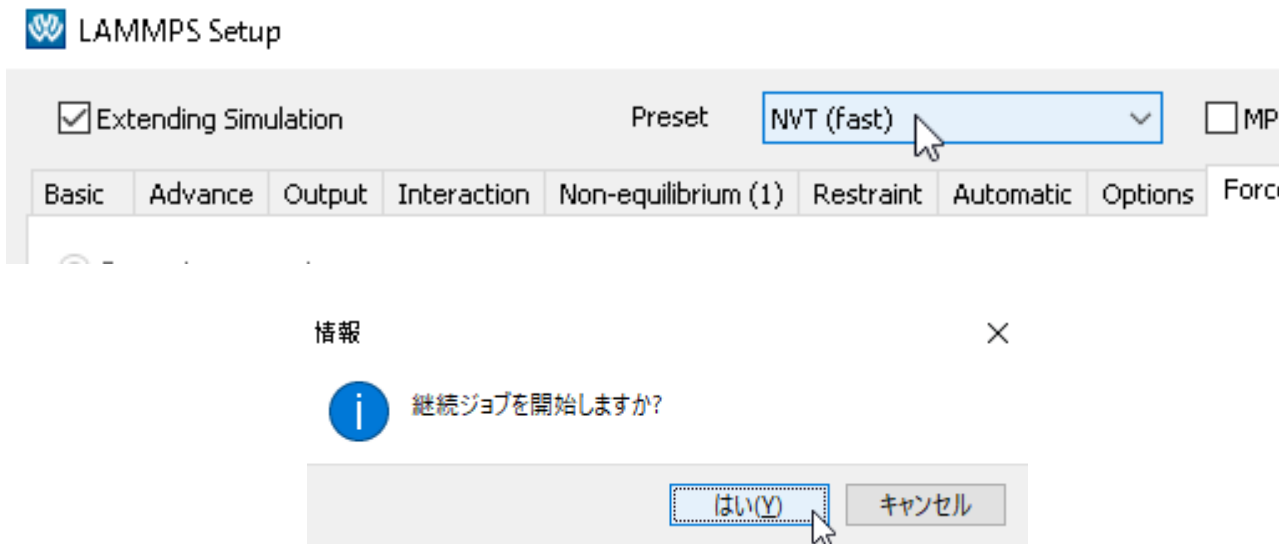
IV. 平衡化(エネルギー極小化)

1. エネルギー変化ボタンを押す。
2. 出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。
3. **Energy Terms**でPotEngにチェックを入れ**Draw**ボタンを押す。
4. グラフを確認した後右下の**Close**ボタンを押す。



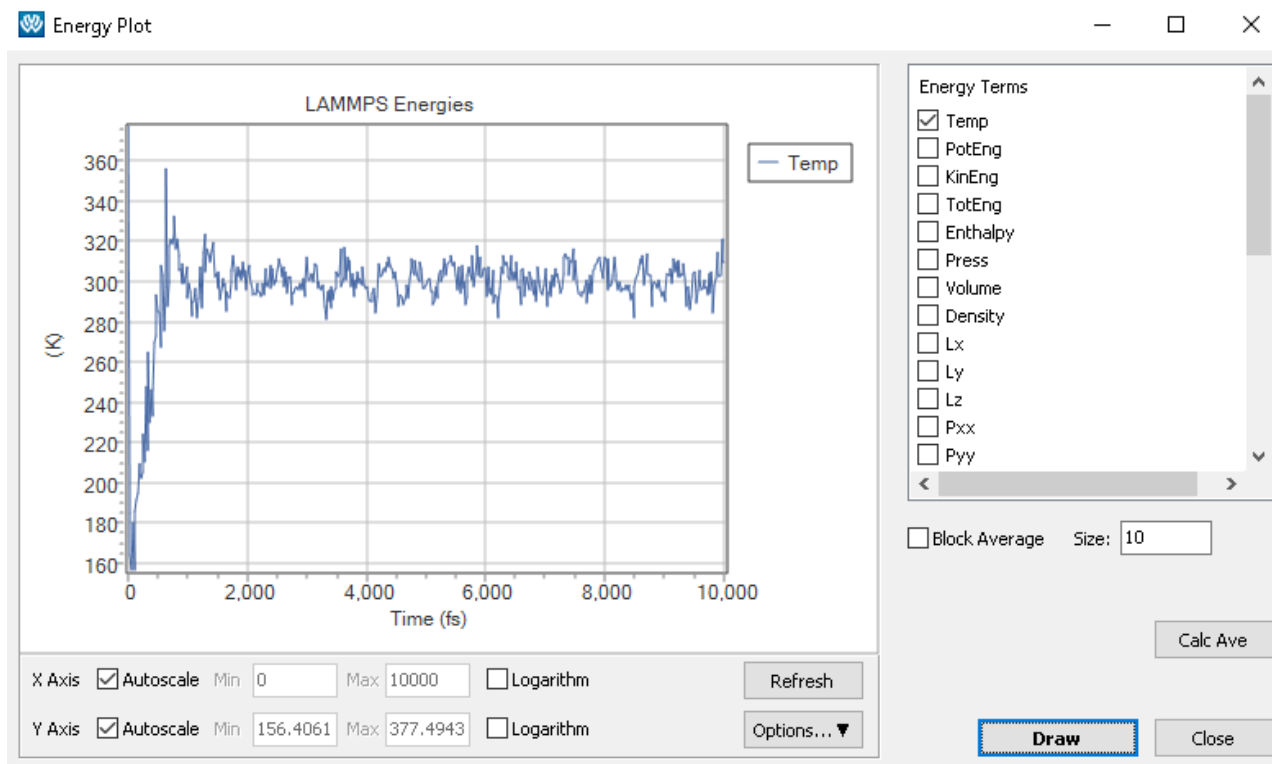
IV. 平衡化(温度一定)

1. 再びキーワード設定ボタンをクリックする。
2. 以下のように変更し、Runボタンを押す。
 - Extending Simulationをチェック
 - PresetはNVT (fast)
3. 出現したダイアログではいいボタンを押すと計算が実行される。
4. 計算終了後、エネルギー極小化の際と同様にログを確認する(以降も同じ)。



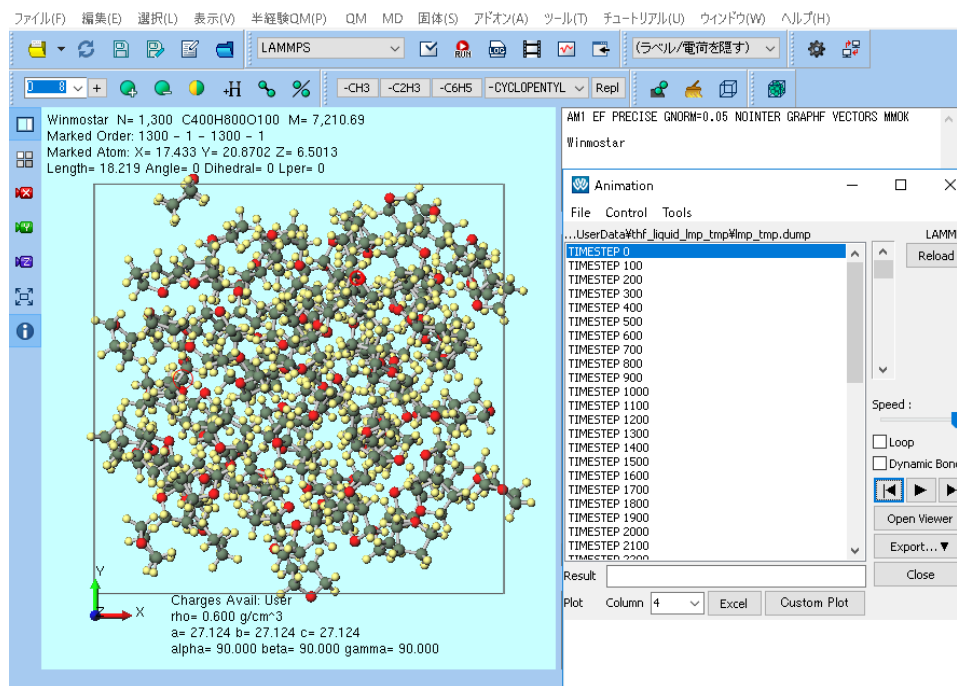
IV. 平衡化(温度一定)

1. エネルギー変化ボタンを押す。
2. 出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。
3. **Energy Terms**でTempにチェックを入れDrawボタンを押す。
4. グラフを確認した後右下のCloseボタンを押す。



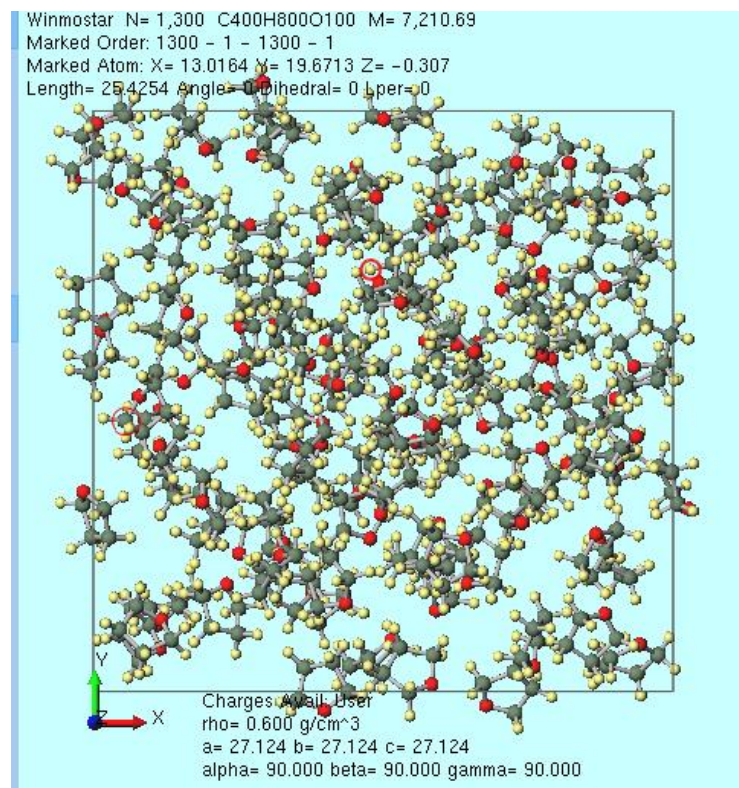
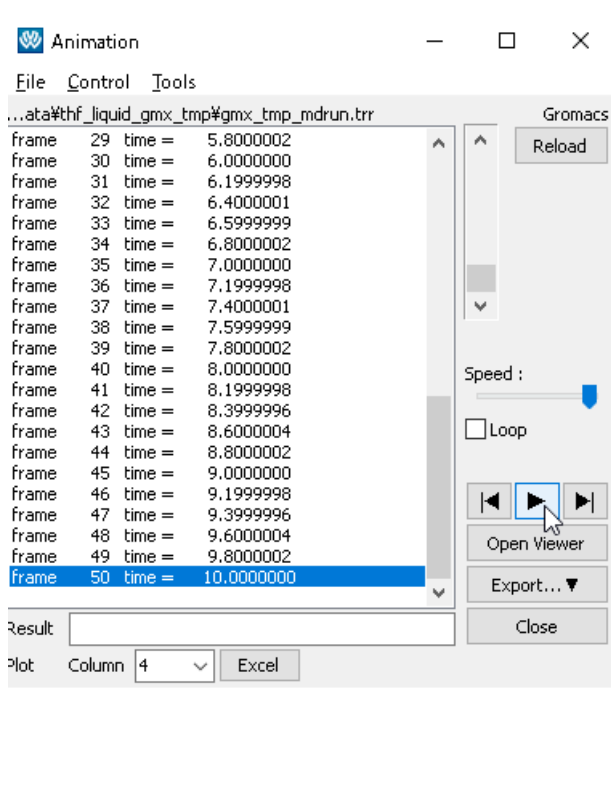
IV. 平衡化(温度一定)

1. アニメーションボタンを押す。
2. 変更を保存しますか？と聞かれた場合はいいえボタンを押す。
3. 出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。座標ファイルとトラジェクトリファイルそれぞれについてダイアログが開く。
4. Animationウィンドウが開く。Animationウィンドウが背面に隠れた場合はウィンドウメニュー | Animationを選択する。



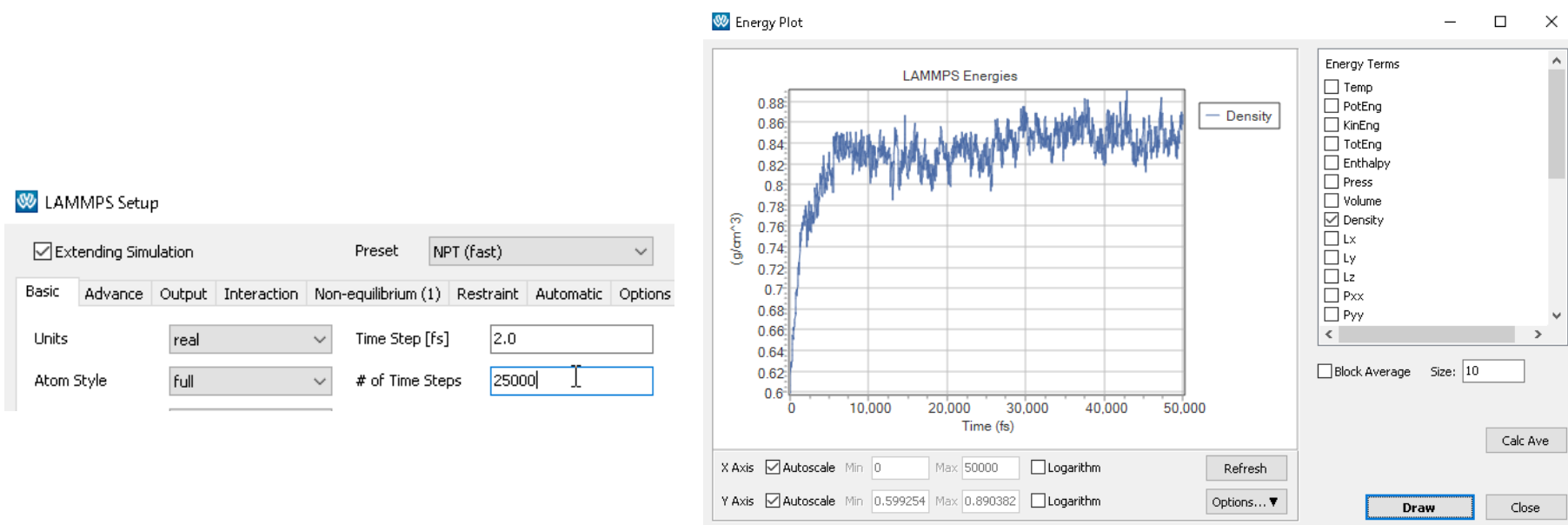
IV. 平衡化(温度一定)

1. Animationウインドウ右中断のPlay/Pause(右向き三角)ボタンを押すとトラジェクトリアニメーションが再生される。
2. アニメーションを確認した後Closeボタンを押す。



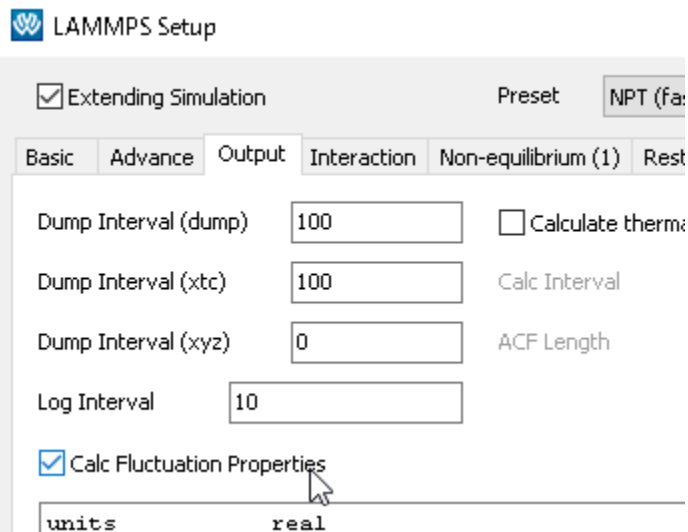
IV. 平衡化(温度・圧力一定)

1. キーワード設定ボタンをクリックする。
2. 以下のように変更し、Runボタンを押し先ほどと同様に計算を実行する。
 - PresetはNPT (fast)
 - Basicタブの# of Time Stepsは25000
3. 計算終了後、必要に応じてアニメーションを確認する(以降も同じ)。
4. エネルギー変化ボタンをクリックし、Densityのグラフを確認する。



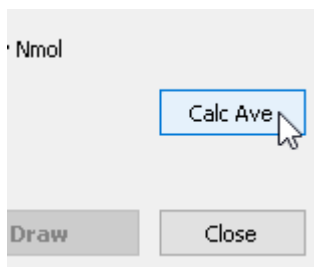
IV. 本計算＋結果解析

1. キーワード設定ボタンをクリックする。
2. 以下のように変更し、Runボタンを押し先ほどと同様に計算を実行する。
 - **OutputタブのCalc Fluctuation Properties**をチェック
3. 計算終了後、必要に応じてアニメーションを確認する(以降も同じ)。



IV. 本計算＋結果解析(基礎物性)

1. エネルギー変化ボタンをクリックする。
2. Calc Aveボタンをクリックする。
3. テキストファイルが開き、そこには各種熱力学量の平均値が出力されている。



energy_ave.log - メモ帳

# data	Average	Standard error
Temp (K)	299.763514096722370	0.190162642185275
PotEng (kcal/mol)	1114.843554916067700	0.703925690038922
KinEng (kcal/mol)	922.429160619501820	0.585166504173924
TotEng (kcal/mol)	2037.272716187046100	1.086089029501141
Enthalpy (kcal/mol)	2036.784976698641600	4.484640870542744
Press (atm)	0.544343835151879	21.253906140141174
Volume (Å ³)	14151.276768185454000	7.196668366983791
Density (g/cm ³)	0.845614902322143	0.000429645078788
Lx (Å)	24.180812566346912	0.009992534524524
Ly (Å)	24.180812566346912	0.009992534524524
Lz (Å)	24.180812566346912	0.009992534524524
Pxx (atm)	19.636501442386080	35.277203170676621
Pyy (atm)	-28.267691176982445	33.965558321311667
Pzz (atm)	10.264222077897747	34.365958602426195
Pxy (atm)	2.004022664628303	23.598153450390355
Pxz (atm)	-18.694882411175050	22.670192408524790
Pyz (atm)	-11.386043089252608	22.794371494620122
GamNsurf	3.578273699919789	9.959479569577396
E_pair (kcal/mol)	-682.278170163869060	0.414652681359241
E_vdwl (kcal/mol)	-621.817061722621180	0.368610154156571
E_coul (kcal/mol)	1183.072311990409900	0.480693241691497
E_long (kcal/mol)	-1243.533419784171200	0.498286552652022
E_tail (kcal/mol)	0.000000000000000	0.000000000000000
E_mol (kcal/mol)	1797.121725659473300	0.825651537441581
E_bond (kcal/mol)	150.233927226219460	0.197268994775482
E_angle (kcal/mol)	849.685489236611710	0.536646123220238
E_dihed (kcal/mol)	797.202308653077630	0.398676645748173
E_impro (kcal/mol)	0.000000000000000	0.000000000000000
Cvm (J/mol/K)	295.892077697106370	0.673116665506024
Cpm (J/mol/K)	295.916113576251070	0.673183527270181
betat (1e-10 m ³ /J)	7.573260539468429	0.023218743443143

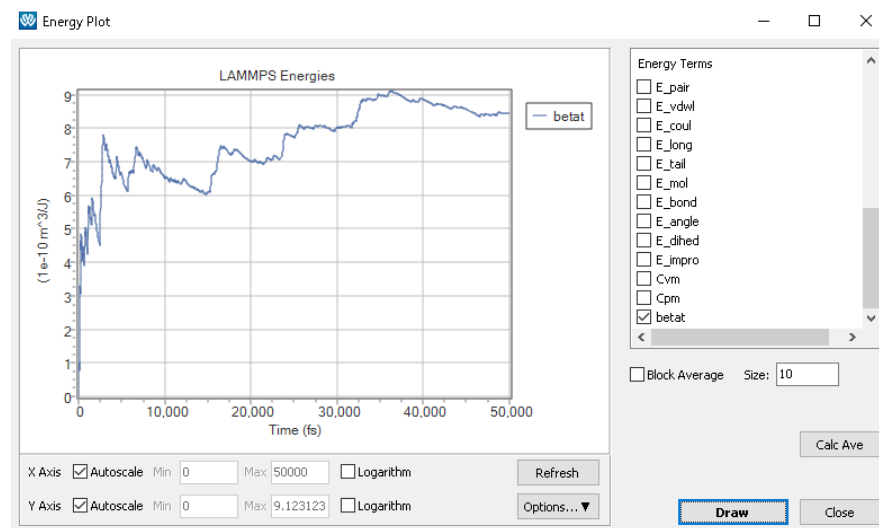
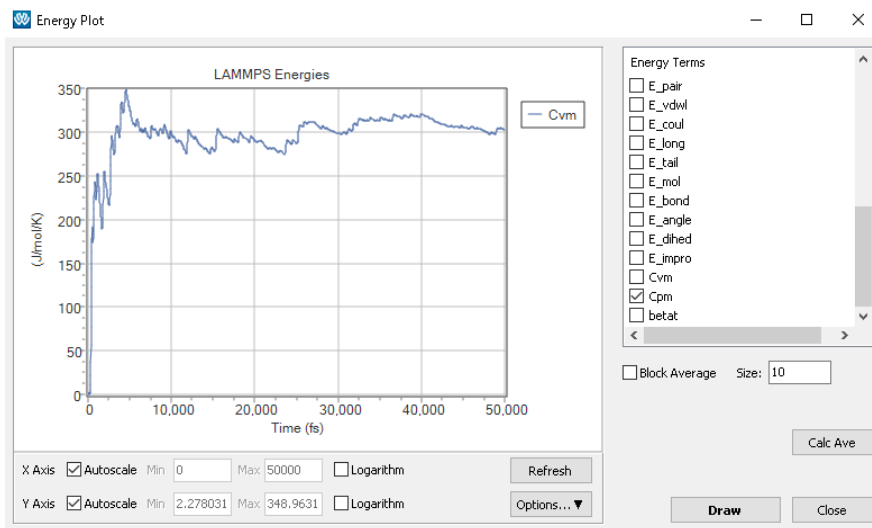
IV. 本計算＋結果解析（比熱など）

続けてEnergy PlotウィンドウでCpmとbetatにチェックを入れてDrawボタンを押すと、それぞれ定圧比熱と体積弾性率の積算平均値が得られる。

これらの値はすでに積算平均値となっているため、前のページの手順で表示される平均値に意味はない。

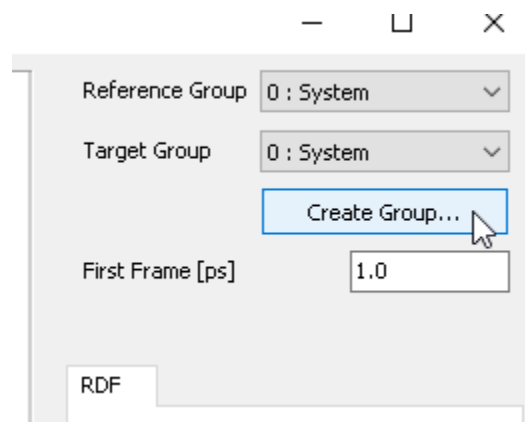
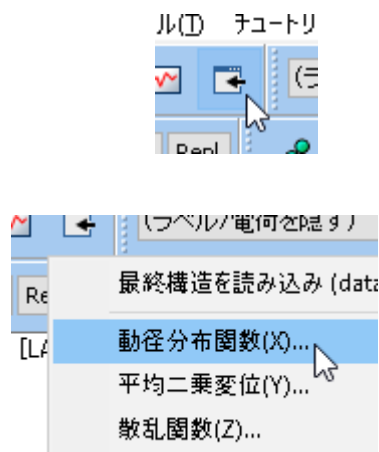
また、ここで使われる古典MD計算の熱力学量の揺らぎから計算する方法では、量子効果が含まれないため計算値が実験値よりも高くなる点が知られている。

（*J. Chem. Theory Comput.*, 2012, 8, 61–74など）



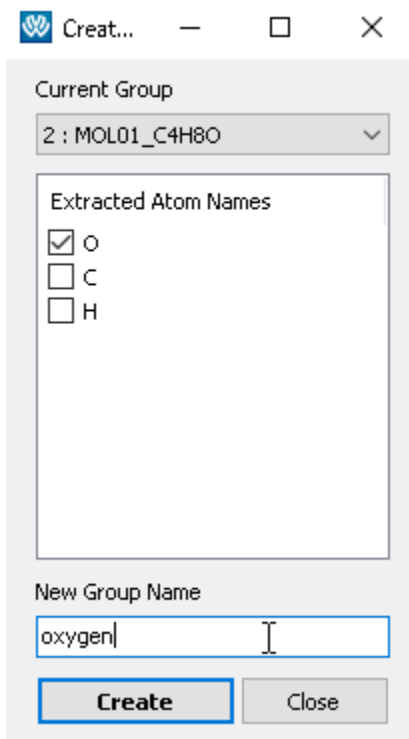
IV. 本計算＋結果解析（動径分布関数）

1. 結果解析ボタンから動径分布関数を選択し、出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。トラジェクトリファイルと座標ファイルとインデックスファイルそれぞれについてダイアログが開く。
2. Create Groupボタンをクリックし、出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。



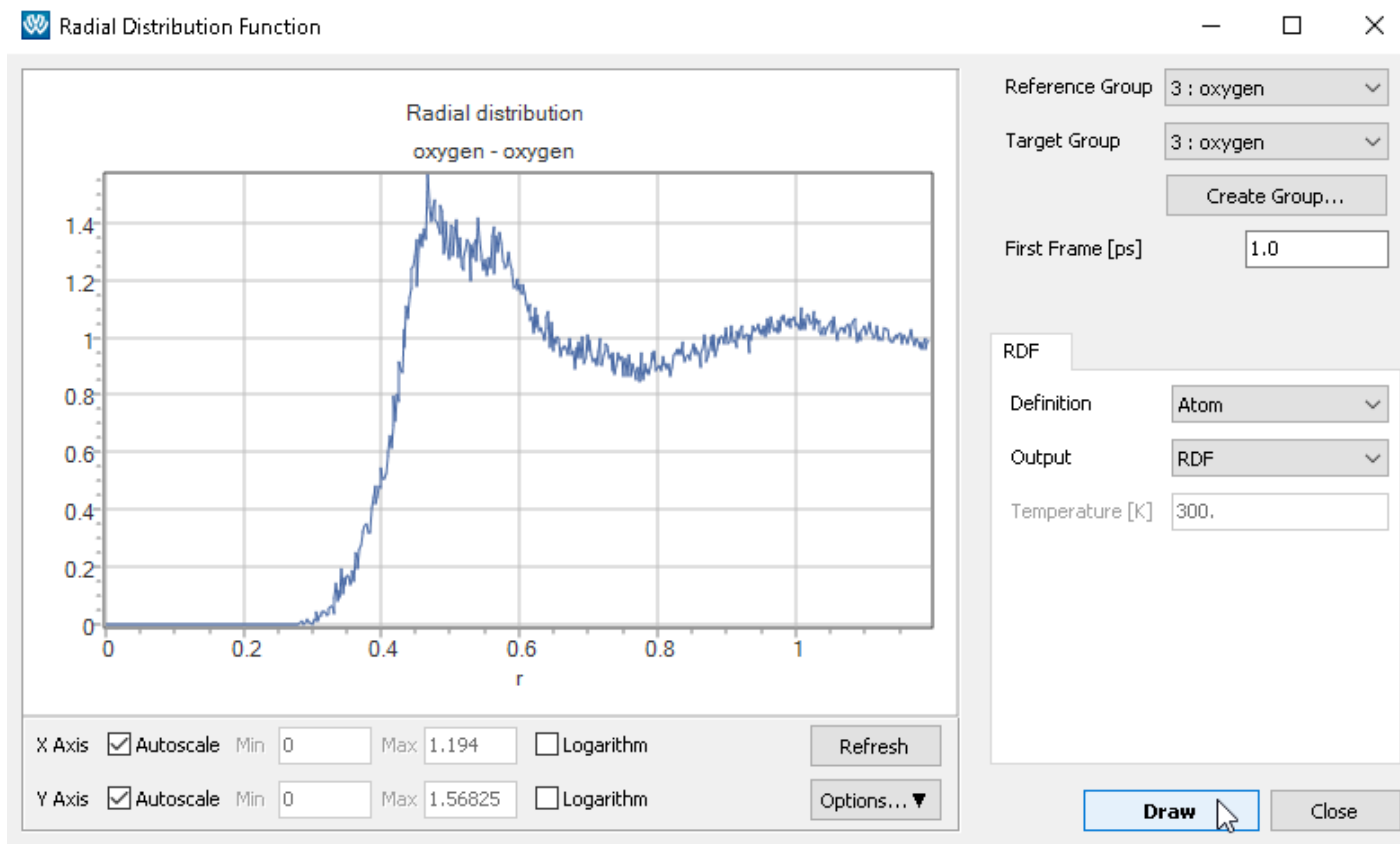
IV. 本計算＋結果解析(動径分布関数)

1. 開いたCreate Groupウィンドウにおいて、Current GroupにMOL01_C4H8O(今回はTHFを意味する)、Extracted Atom NamesにOを選択し、New Group Nameにoxygenと入力してCreateボタンをクリックする。
2. ターミナルウィンドウが出現し処理が終了したらCloseボタンを押す。



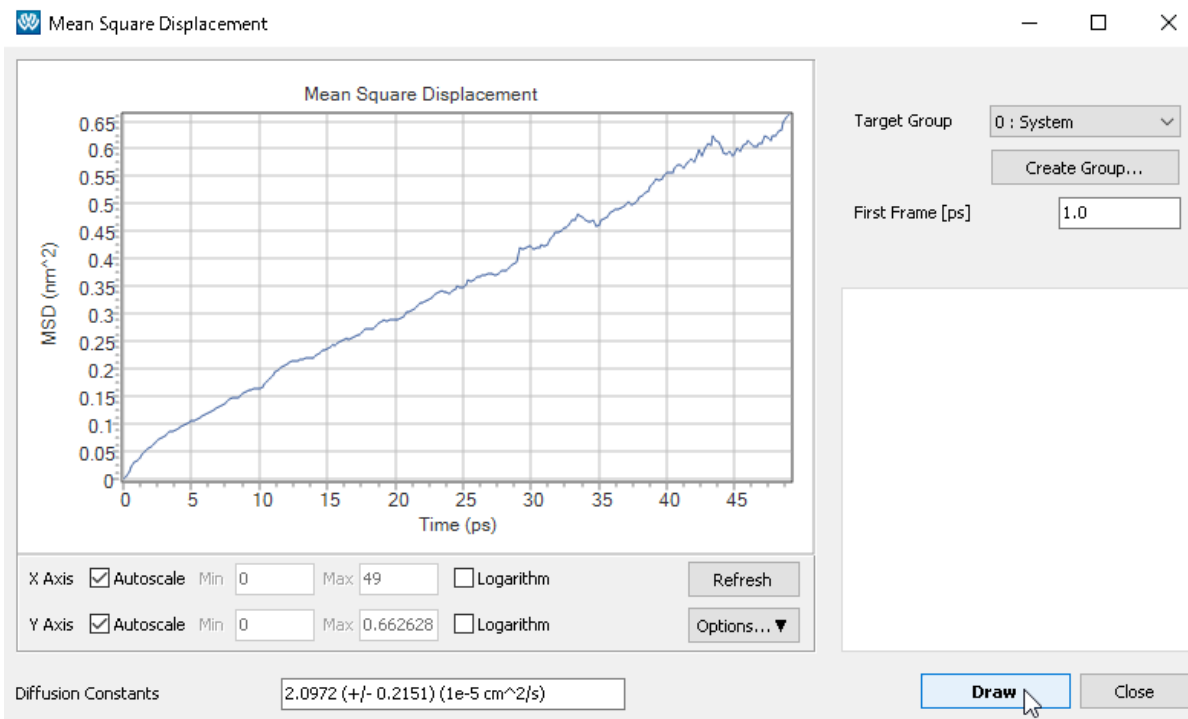
IV. 本計算＋結果解析（動径分布関数）

1. Reference GroupとTarget Groupに先ほど作成したoxygenを選択し、Drawボタンを押すと酸素-酸素間の動径分布関数が出力される。
2. グラフを確認後Closeボタンを押す。



IV. 本計算＋結果解析（自己拡散係数）

1. 結果解析ボタンから平均二乗変位を選択し、出現したダイアログでデフォルトで選択されたファイルを開く。トラジェクトリファイルと座標ファイルとインデックスファイルそれぞれについてダイアログが開く。
2. Drawボタンをクリックすると平均二乗変位のグラフが表示される。このグラフから計算される自己拡散係数(Diffusion Constants)がウインドウ下に表示される。



補足 高精度での計算結果

本チュートリアルの手順から以下のように変更して高精度に計算した際の結果を示す。

- Cutoff(vdw) =15, Cutoff(Coulomb) =15
- 平衡化(エネルギー極小化)
 - Preset=Minimize
- 平衡化(温度一定)
 - Preset=NVT, nsteps=40000
- 平衡化(温度圧力一定)、本計算
 - Preset=NPT, nsteps=200000

Density [kg/m ³]	878.7 +- 0.2
Diffusion constant [1e-5 cm ² /s]	1.7 +- 0.3

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

The screenshot displays the Facebook profile of X-Ability Co., Ltd. The header includes the Facebook logo and login options. The profile picture is the X-Ability logo. The cover photo features the company name and a message: "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.さんや他の友..." with buttons for "アカウント登録" and "ログイン".

The main post is dated November 14, 2020, at 20:30. It promotes a new textbook "フロンティアオービタルによる新有機化学教程" (New Organic Chemistry Textbook Based on Frontier Orbitals) by Yamaguchi Tetsuaki. The post includes a link to the Amazon page and a chemical structure diagram. The diagram shows a complex molecule with a central carbon atom bonded to various groups, including a phenyl ring and a methyl group.

A callout bubble with a thumbs-up icon and the text "いいね!" (Like!) is positioned over the post. The page also shows a sidebar with navigation options like "タイムライン", "基本データ", "写真", "いいね!", and "動画".