

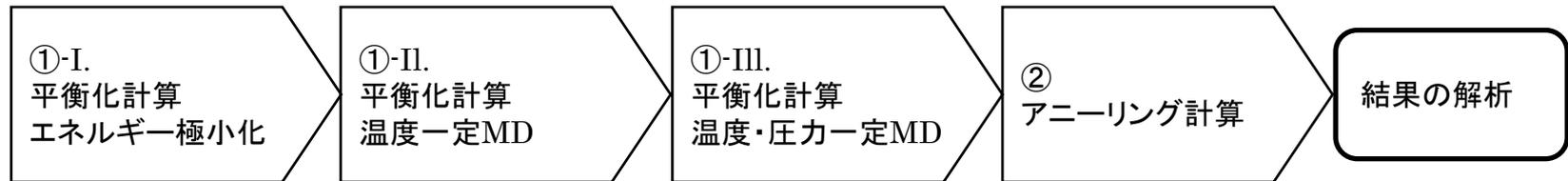
Winmostar™ チュートリアル
LAMMPS
ガラス転移温度算出(ポリマー)
V9.2.1

株式会社クロスアビリティ

2019年4月30日

概要

- ポリプロピレン溶融体の冷却過程からガラス転移温度を算出します。処理のフローを以下に示します。温度・圧力一定MDは、平衡化に掛かるステップ数を短縮するために、一旦高圧(200 atm)に制御した後常圧に戻します。



注意点:

- 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。
- 相互作用の計算方法、力場、電荷の算出方法も結果に影響を与えます。
- 重合度(鎖長)、降温(昇温)速度も結果に影響を与えます。
- チュートリアルという性質上、ここではポリマー系の平衡化に十分なステップ数の計算を実施しません。

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。

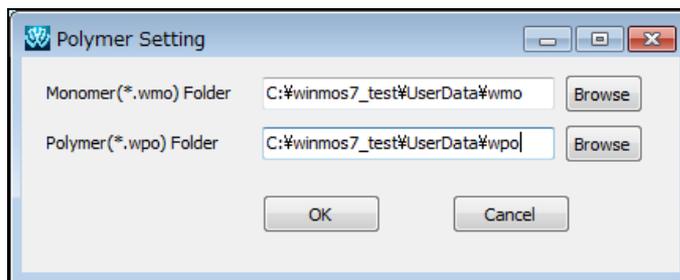
(7) MDまたはSolidバックの計算（およびその他の一部の処理）を実行する場合は、以下のいずれかのリンク先の手順でCygwinの環境を構築します。

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）

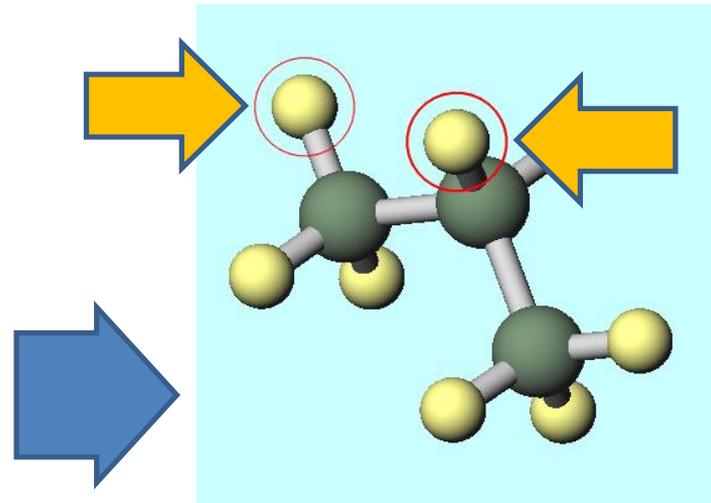
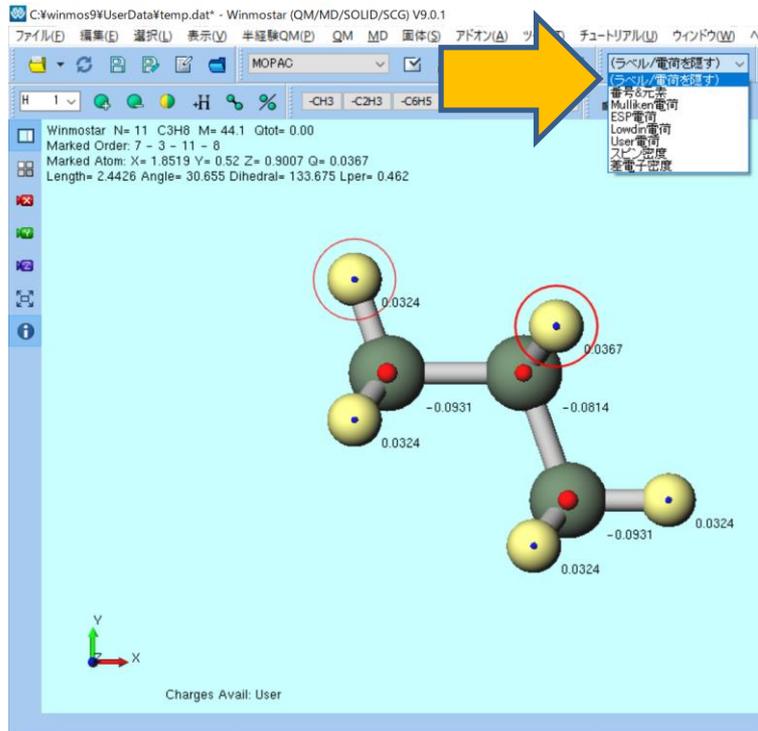
Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合（ベータ版）

- 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。



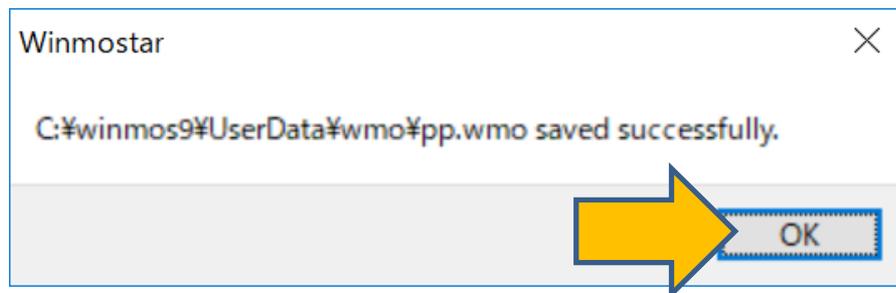
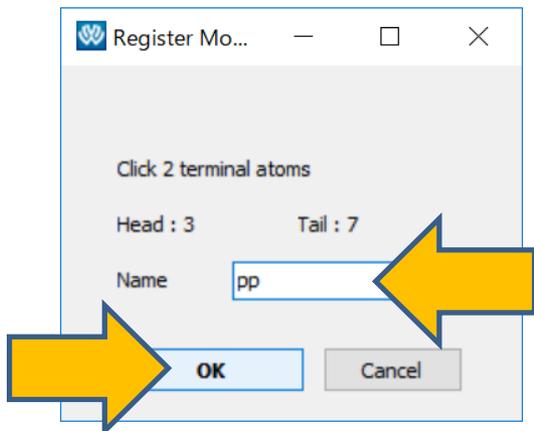
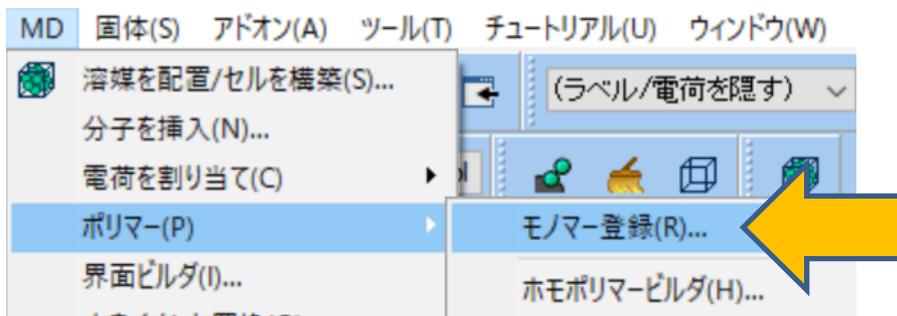
I. モノマーを登録

1. ポリプロピレンのモノマー(プロパン、 C_3H_8)をメイン画面上で作成する。
2. MD | 電荷を割り当て | Acptypeを使用をクリックし、Executeをクリックする。
3. 電荷を非表示にする場合はラベル/電荷メニューからラベル/電荷を隠すを選ぶ。
4. 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。



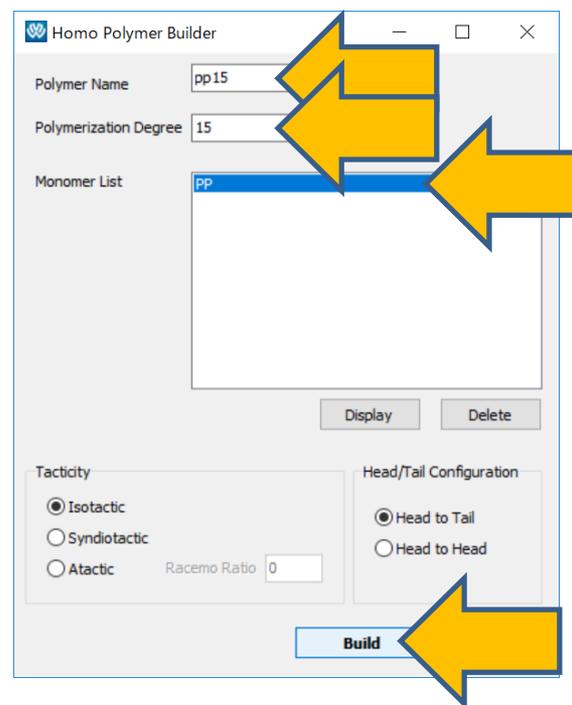
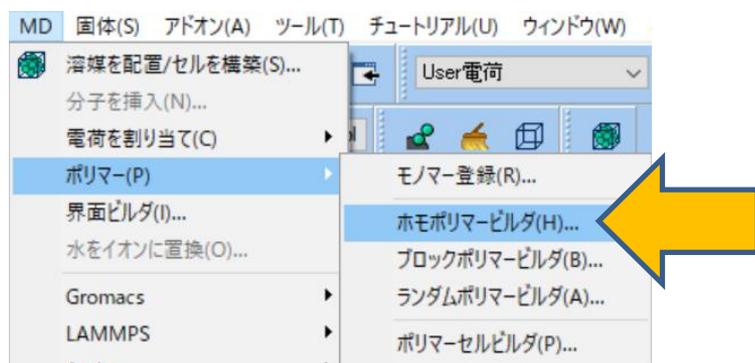
I. モノマーを登録

1. MD | ポリマー | モノマー登録にて、Nameにppと入力しOKをクリックする。
2. 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。



II. ポリマーを定義

1. MD | ポリマー | ホモポリマービルダにて以下のように入力する。
Polymer Nameにpp15
Polymerization Degreeに15
Monomer Listでpp
2. Buildをクリックした後Closeをクリックする。



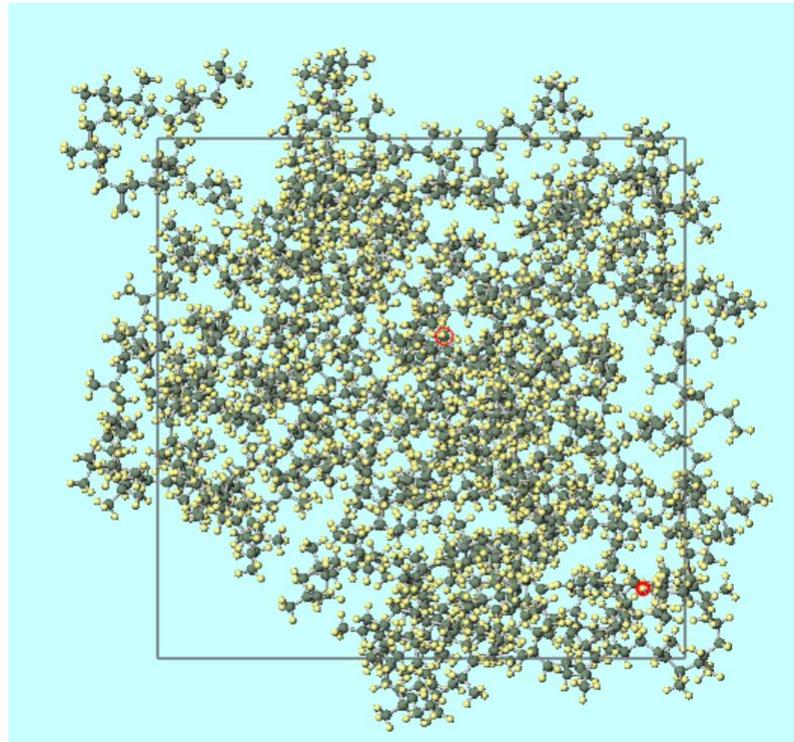
III. 系を作成

1. MD | ポリマー | ポリマーセルビルダにて、
Polymers Availableからpp15を選択し、Numberを30としAddをクリックする。
2. Buildをクリックする。保存時のファイル名はpp15_30.mol2とする。

The screenshot illustrates the steps to create a polymer system. The 'MD' menu is open, and the 'ポリマー(P)' option is selected, leading to the 'ポリマーセルビルダ(P)...' dialog. In the 'Polymer Cell Builder' dialog, the 'Polymers Available' list shows 'PP15' selected. The 'Number' field is set to '30'. The '>> Add >>' button is highlighted, and the 'Build' button is also highlighted. The 'Polymers Used' table shows the result: 'PP15' with a 'Number' of '30'.

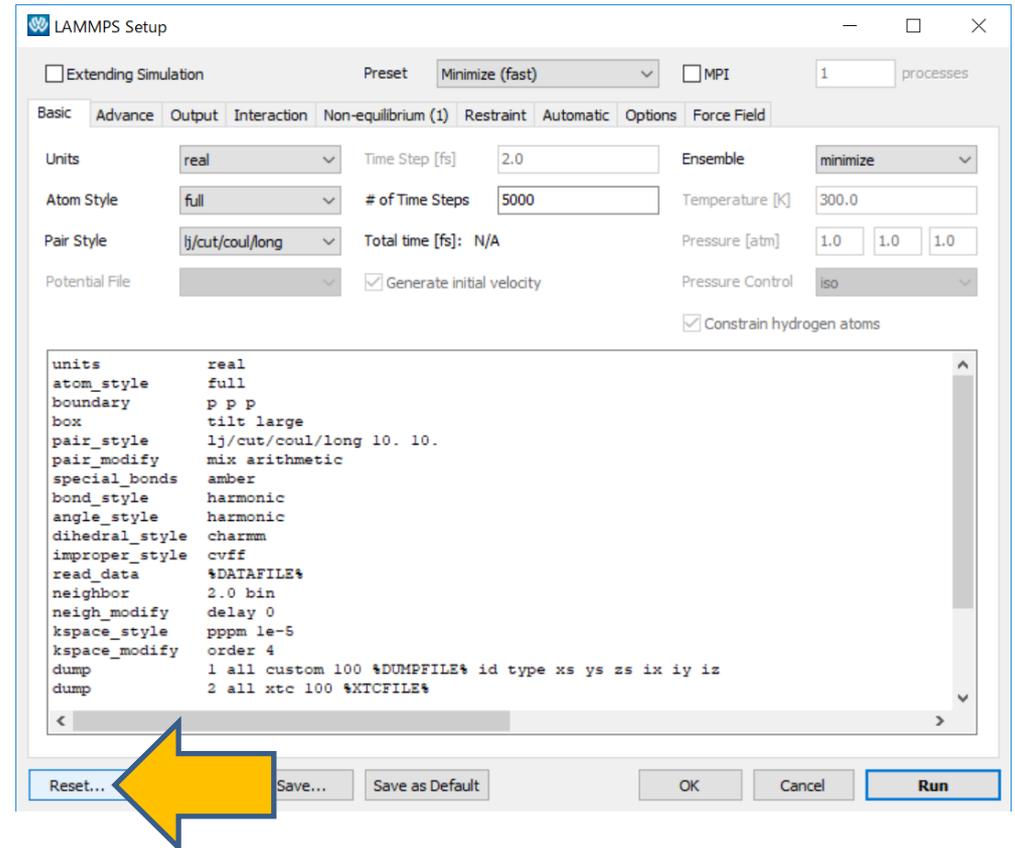
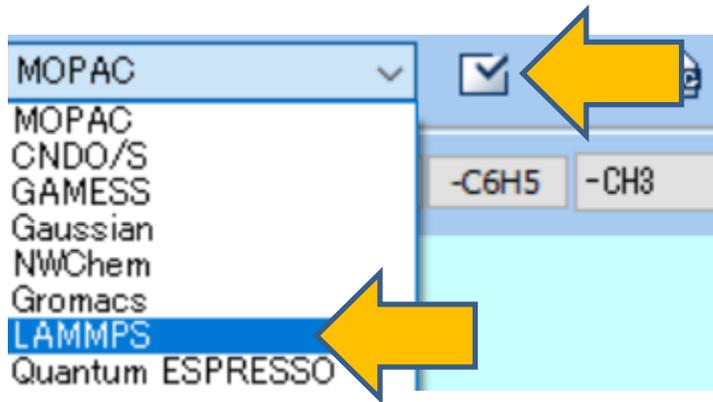
III. 系を作成

作成が成功したことを告げるダイアログを閉るとメイン画面に系が表示される。
ポリマーセルビルダでCloseをクリックする。



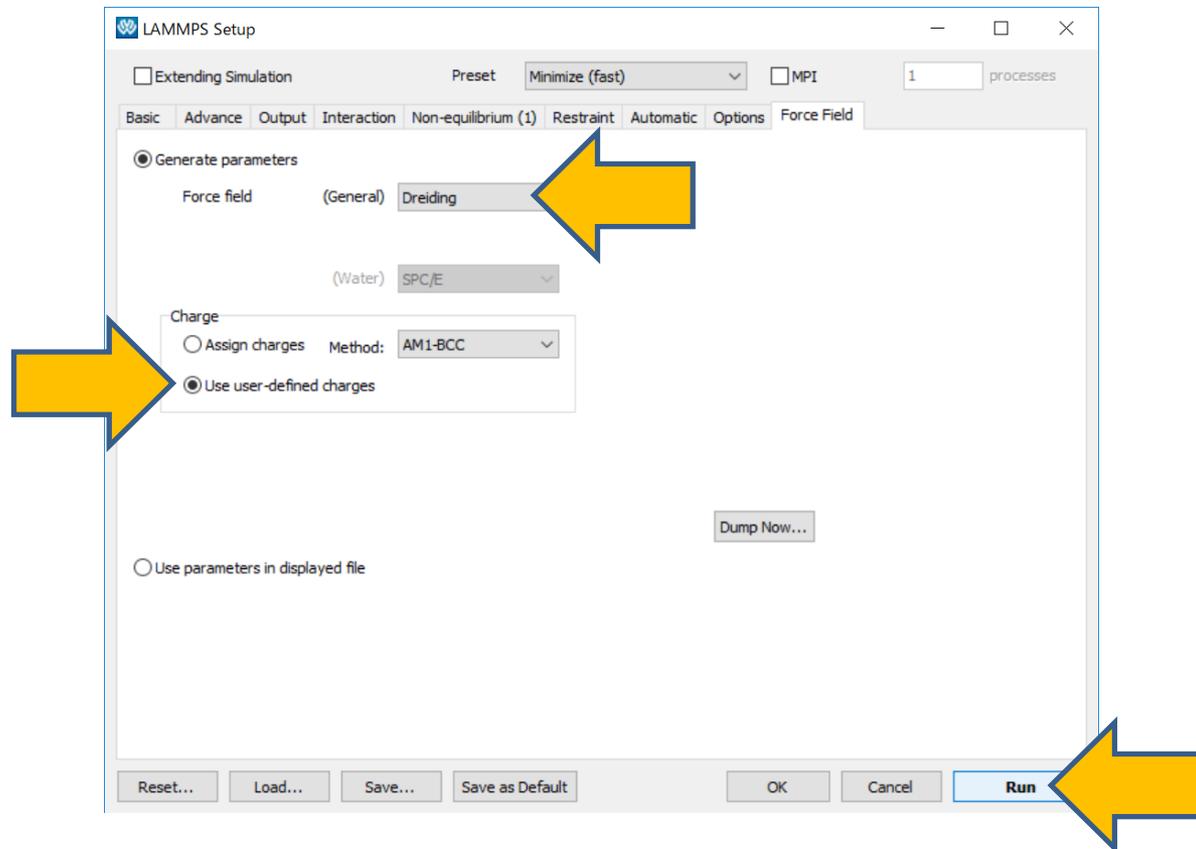
IV. 平衡化計算

1. ソルバー一覧で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。



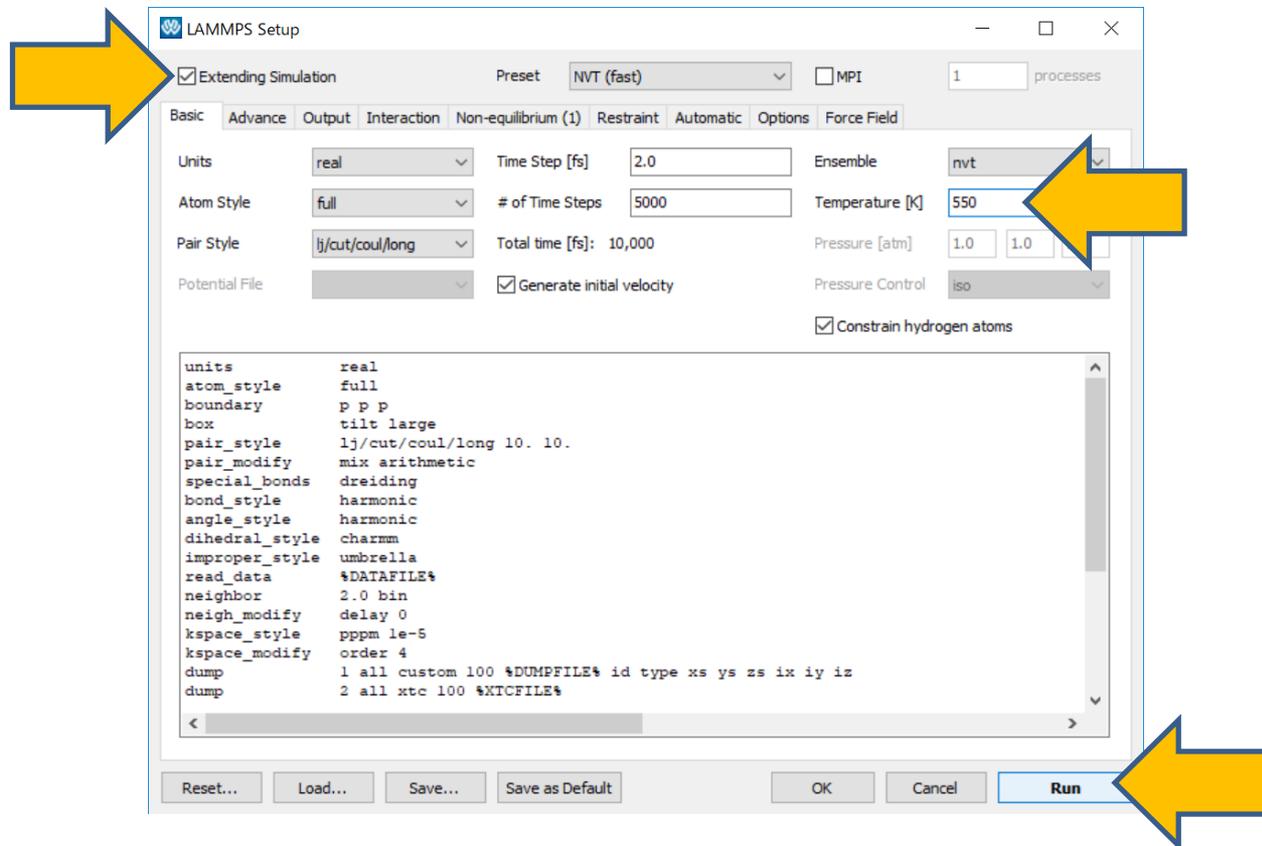
IV. 平衡化計算

1. Force Fieldタブを選択し、Force FieldにDreiding、Chargeに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pp15_30.dataとする。



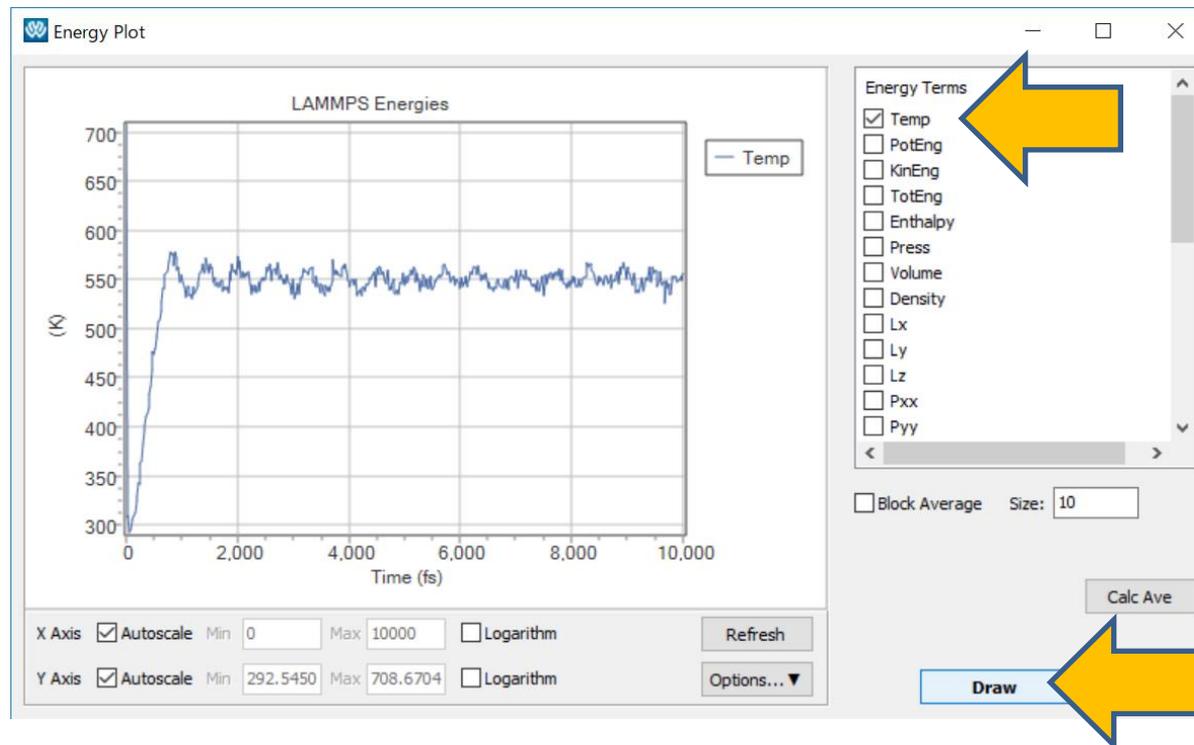
IV. 平衡化計算

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、PresetにNVT (fast)を指定する。
3. Temperatureは550に変更してRunをクリックする。



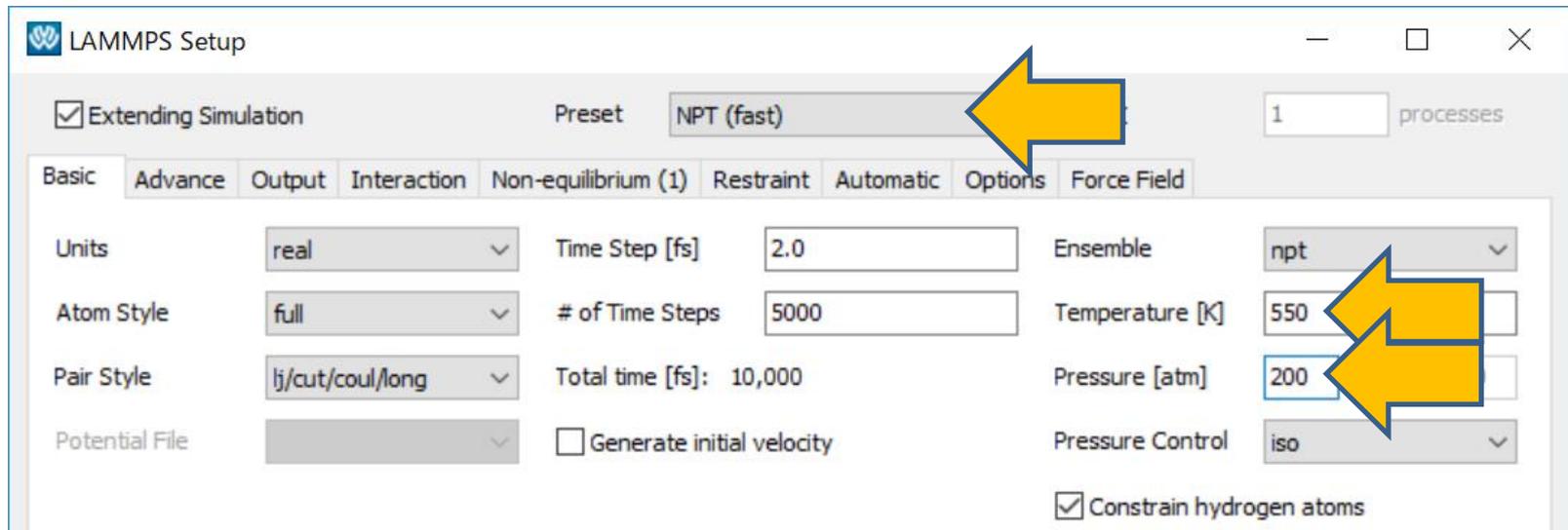
IV. 平衡化計算

1. 計算終了後、 (エネルギー変化)をクリックし、デフォルトで選ばれるファイルを選ぶ。
2. Energy TermsにてTempにチェックを入れる。
3. Drawをクリックする。温度が目標温度付近に制御されていることを確認する。
4. Closeをクリックする。



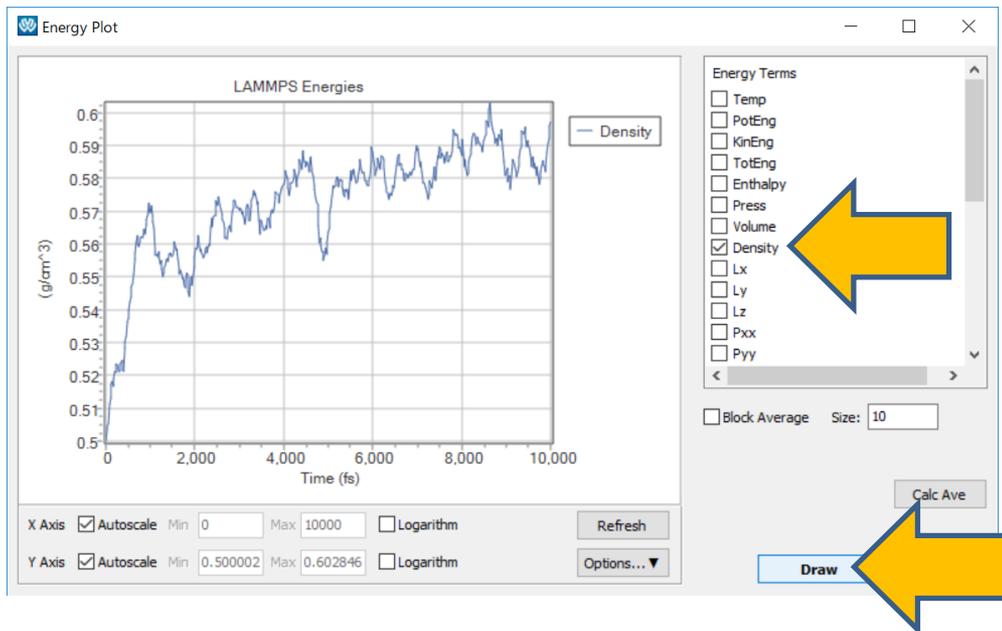
IV. 平衡化計算

1. (キーワード設定)をクリックする。
2. PresetにNPT (fast)を指定し、Temperatureを550、Pressureを200に変更する。
3. Runをクリックする。



IV. 平衡化計算

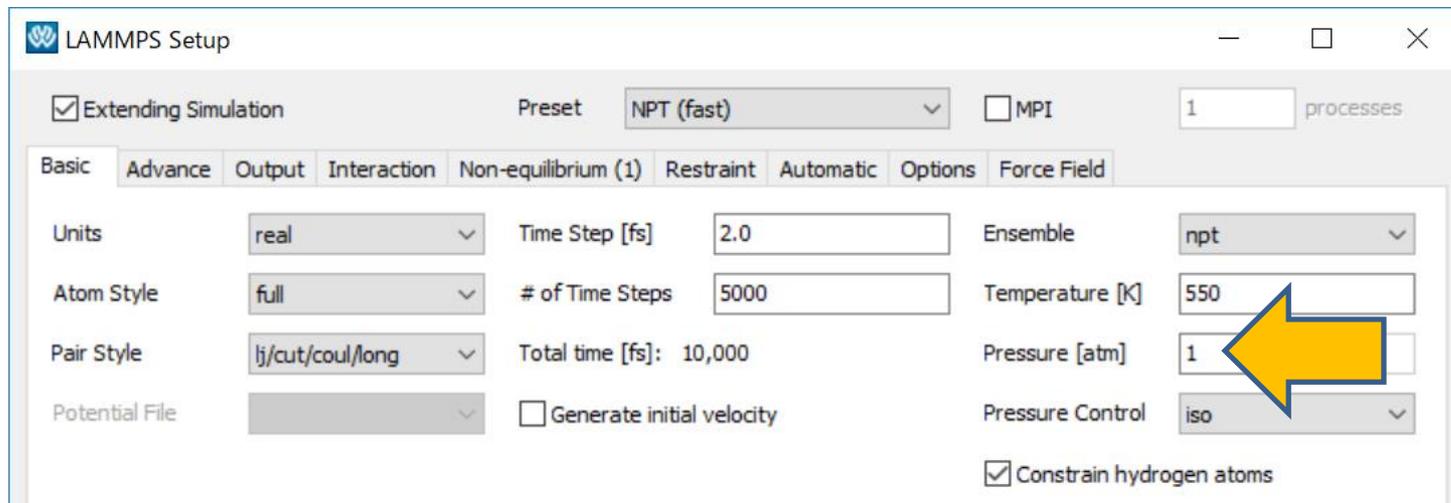
1. 計算終了後、 (エネルギー変化) をクリックし、デフォルトで選ばれるファイルを選ぶ。
2. Energy termsにてDensityにチェックを入れる。
3. Drawをクリックし、密度が一定値付近に収束していることを確認する。
4. Closeをクリックする。



今回の結果からは収束しているとは判断し難いが、ここではチュートリアルのため、そのまま先に進む。

IV. 平衡化計算

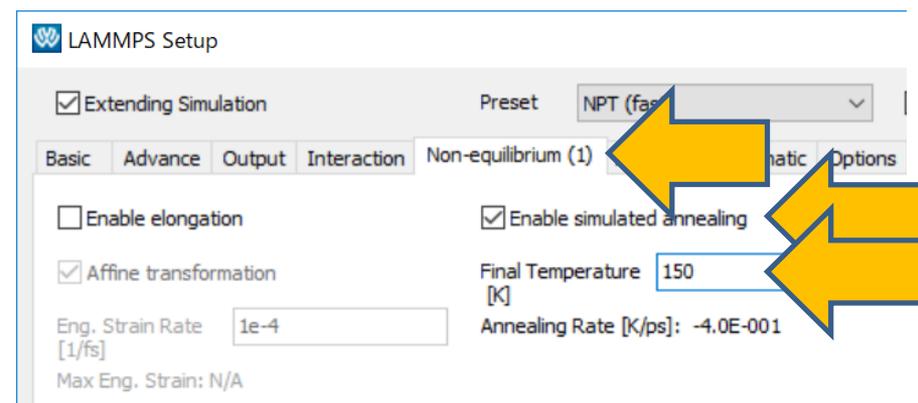
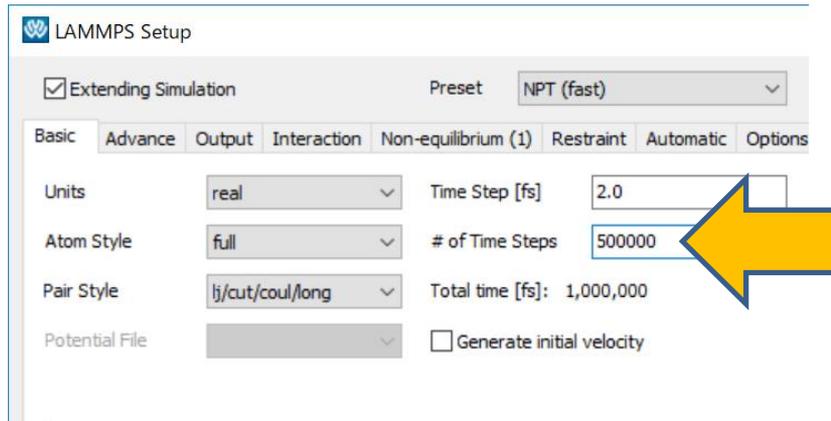
1. (キーワード設定) をクリックする。
2. **Basic**タブのPressureを1に変更する。
3. **Run**をクリックする。



V. アニーリング計算

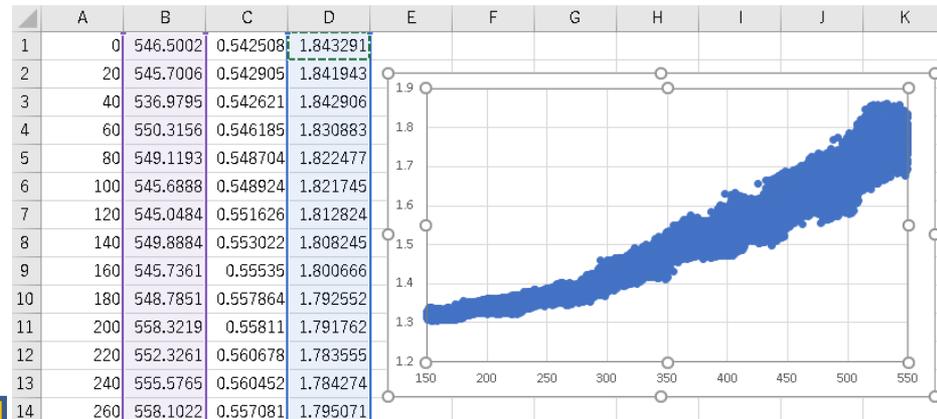
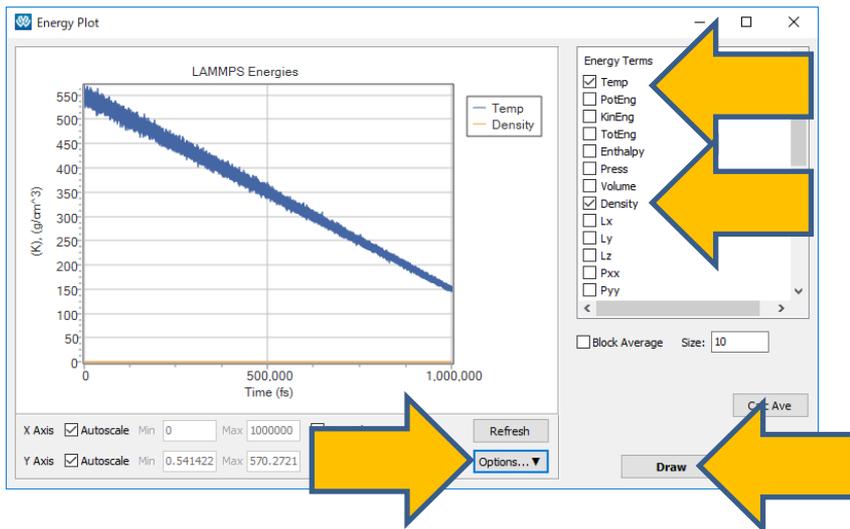
ガラス転移温度算出を目的として、アニーリング（温度を徐々に下げる）計算を行う。

1. (キーワード設定) をクリックする。
2. **Basic**タブにて、以下のように設定する。
 # of Time Stepsを500000（計算時間を短縮したい場合は小さい値にする）
Non-equilibrium (1)タブの**Enable Simulated Annealing**にチェックを入れる
Final Temperatureを150にする
3. **Run**をクリックする。



V. アニーリング計算

1. 計算終了後、 (エネルギー変化)をクリックし、デフォルトで選ばれるファイルを選ぶ。
2. Energy TermsにてTempとDensityにチェックを入れる。
3. Drawをクリックし、Options | Open Excelをクリックする。
4. 出力されたcsvファイルの2カラム目を横軸、3カラム目の逆数を縦軸にプロットする。
(温度-比容(specific volume)曲線が得られる)
5. 各種のフィッティングでこの曲線の変曲点(250~300K付近)を求める。
変曲点の値がガラス転移温度の推測値となる。



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

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.さんや他の友
アカウント登録 ログイン

X-Ability
クロスアビリティ

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! 138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 · 公開

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_au_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 · 公開