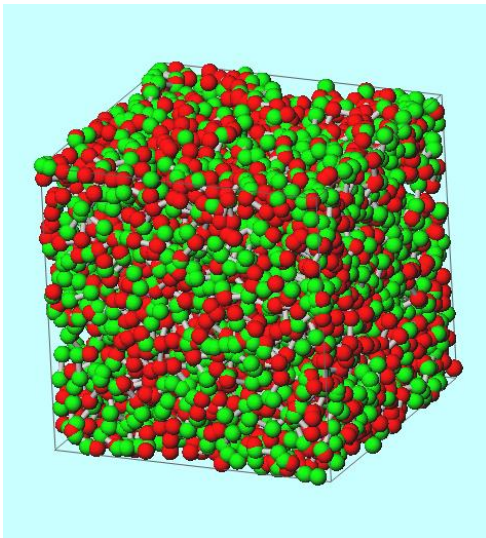


Winmostar™ チュートリアル
LAMMPS
散逸粒子動力学(DPD)
V9.2.1

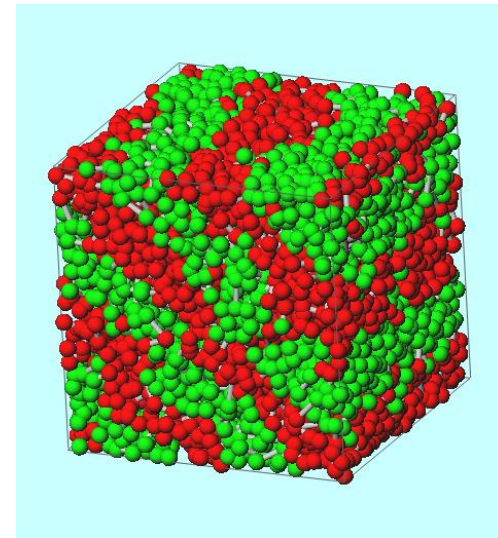
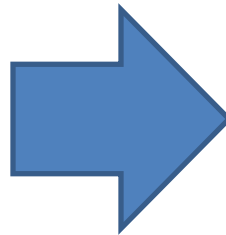
株式会社クロスアビリティ
2019年4月30日

概要

- ジブロックコポリマーの相分離構造を、DPD法により予測する手順を示します。構造の定量的な評価方法の一つとしてここでは散乱関数を算出します。
参考文献: R. D. Groot and T. J. Madden, J. Chem. Phys, 108, 20, (1998), 8713.



初期構造



得られる構造

- ※ 全原子MDの構造にマッピングする方法を本資料最後の示しています。
- ※ DPDパラメータの算出方法はGromacsチュートリアルをご参照ください。

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。

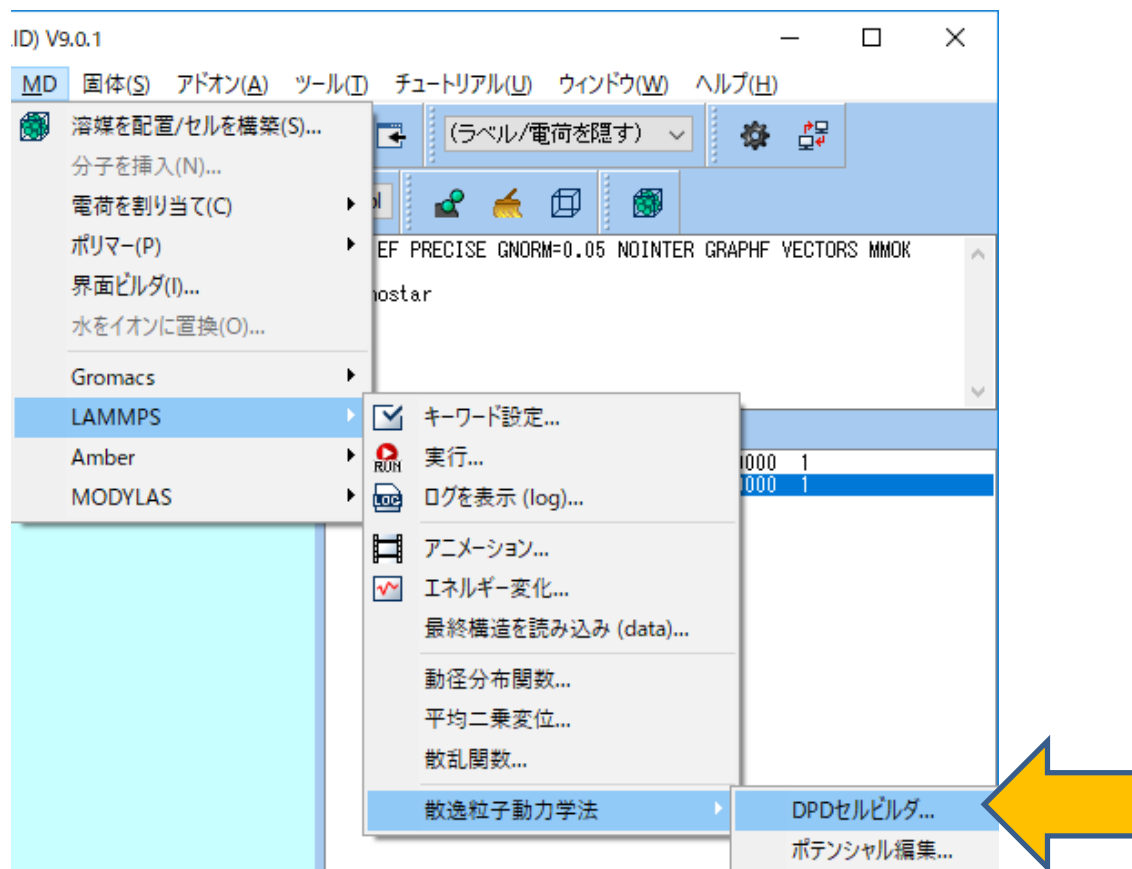
ビルド済みのcygwin_wmをインストールする場合（推奨）

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）

I. 初期座標の作成

MD | LAMMPS | 散逸粒子動力学法 | DPDセルビルダをクリックする。



I. 初期座標の作成

1. **Monomers Available**の**A**を選択し、
of Monomersに**3**を入力して**Add**をクリックする。
2. 同様に**B**を選択し、**# of Monomers**に**3**を入力して**Add**をクリックする。

The screenshot shows the 'DPD Cell Builder' window. On the left, the 'Monomers Available' list contains A, B, C, D, E, and F. Monomer B is highlighted with a blue selection bar. A large yellow arrow points from B to the '>> Add >' button. Another yellow arrow points from the '# of Monomers' input field (which contains the value '3') to the same button. The 'Monomers Used' list on the right shows 'A x 3' and 'B x 3'. Below this list is a 'Clear' button. To the right of the 'Monomers Used' list is the 'Polymers Used' section, which includes a '>> Add >>' button, a '# of Polymers' input field (containing '1'), a '<< Delete <<' button, and a 'Density' input field (containing '5.0'). At the bottom right are 'Build' and 'Close' buttons. A 'Reset...' button is located at the top right of the window.

I. 初期座標の作成

of Polymersに1440を入力してAddをクリックする。

The screenshot shows the 'DPD Cell Builder' window. It is divided into three main sections: 'Monomers Available', 'Monomers Used', and 'Polymers Used'. In the 'Monomers Available' section, a list of monomers A, B, C, D, E, and F is shown, with 'B' selected. Below this list are buttons for '>> Add >>' and '<< Delete <<'. In the 'Monomers Used' section, the contents 'A x 3' and 'B x 3' are listed. Below this is a text input field for '# of Monomers' containing the value '3', and buttons for '<< Delete <<' and 'Clear'. In the 'Polymers Used' section, there is a large empty box, a button for '>> Add >>', and a text input field for '# of Polymers' containing the value '1440'. Below this is a button for '<< Delete <<'. At the bottom right, there is a 'Density' input field with the value '5.0', and buttons for 'Build' and 'Close'. A 'Reset...' button is located in the top right corner. Two large yellow arrows point to the '>> Add >>' button and the '# of Polymers' input field, indicating the next steps in the process.

Monomers Available	Monomers Used	Polymers Used
A B C D E F	A x 3 B x 3	

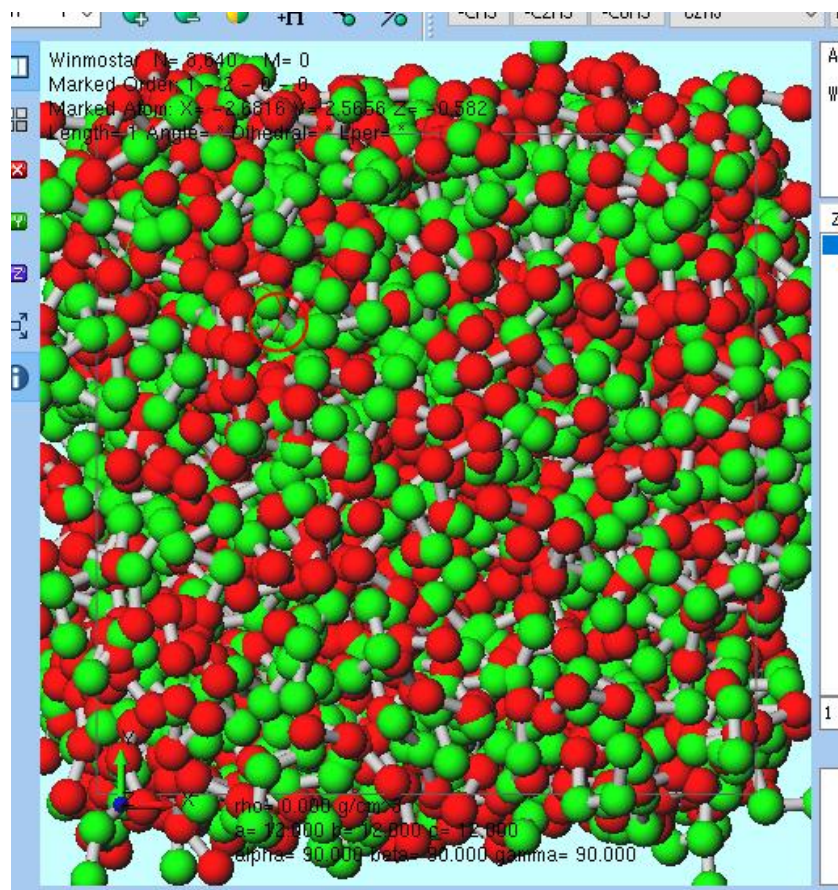
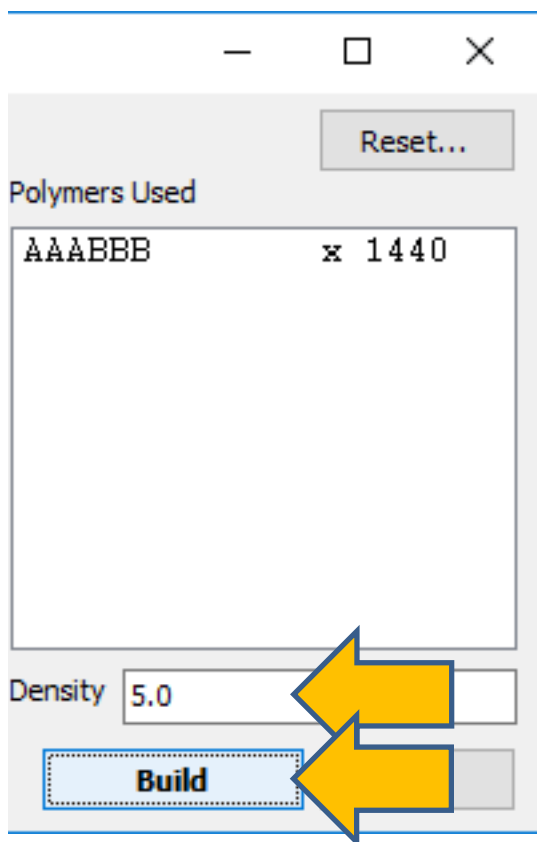
of Monomers: 3

of Polymers: 1440

Density: 5.0

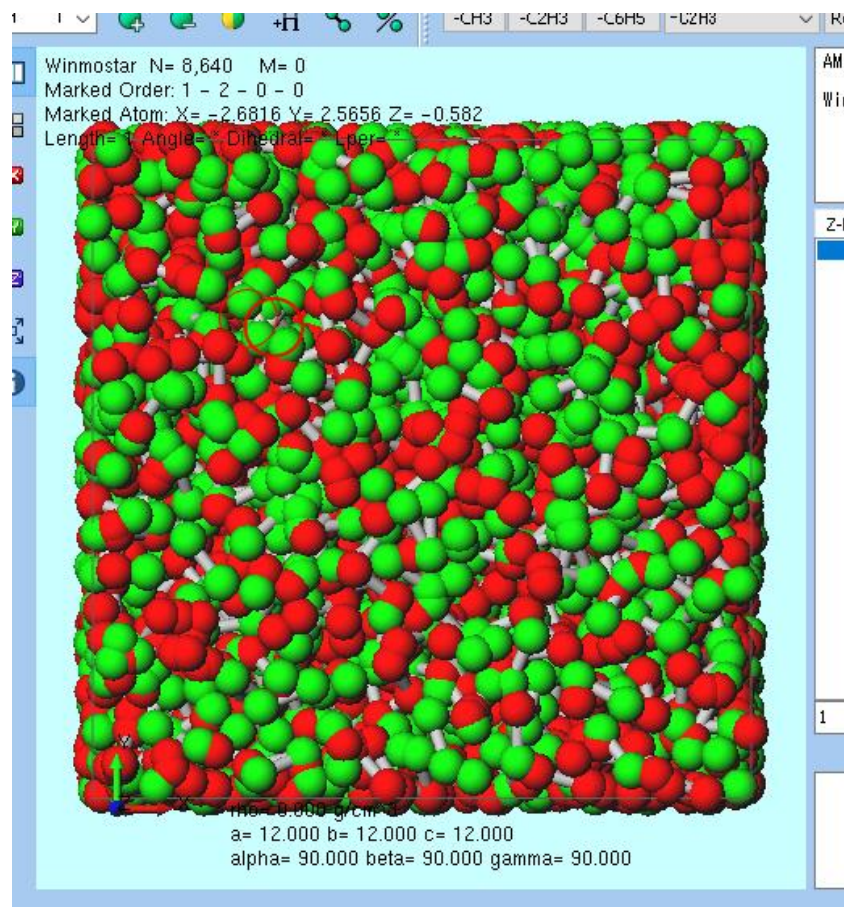
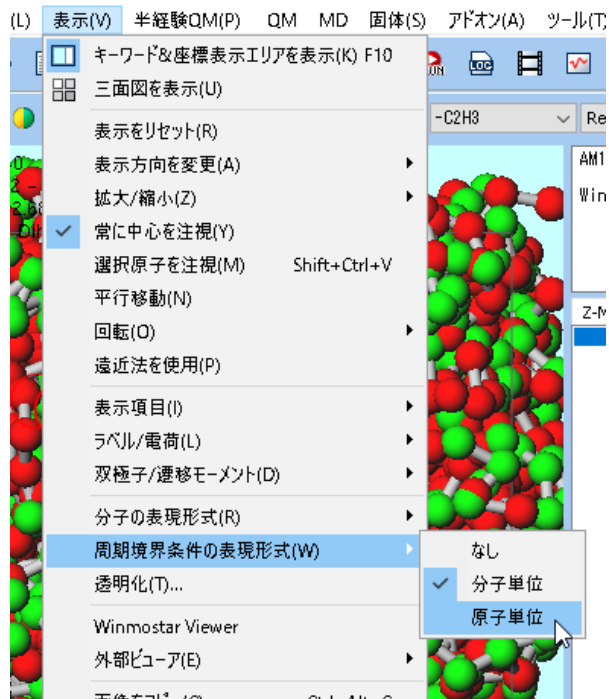
I. 初期座標の作成

Densityに5(単位は無次元)を入力して**Build**を押す。



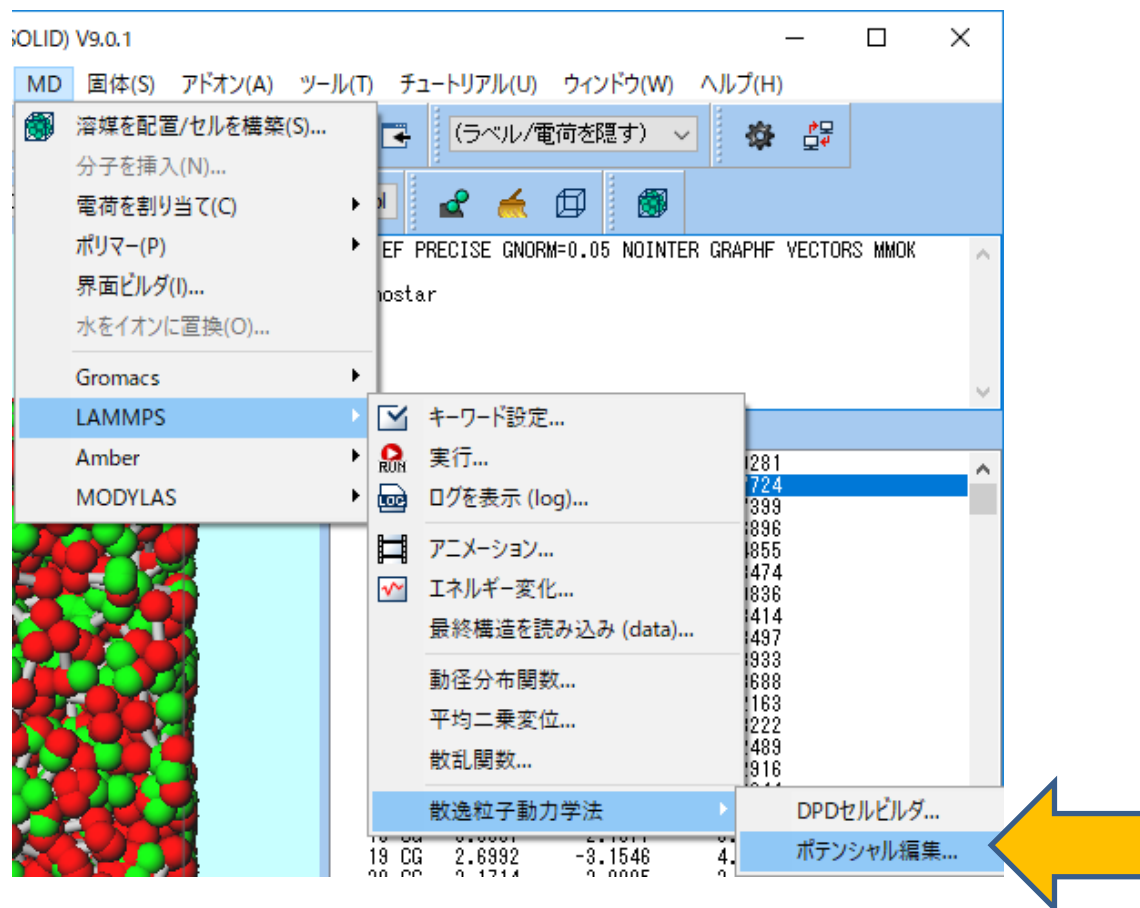
I. 初期座標の作成

表示 | 周期境界条件の表現形式 | 原子単位を選択すると、粒子A, Bの分布が見やすくなる。



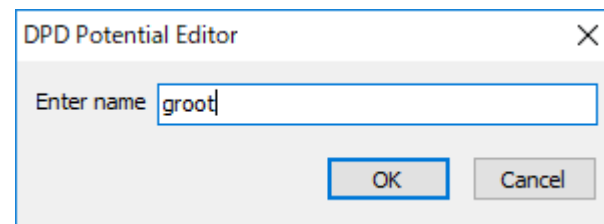
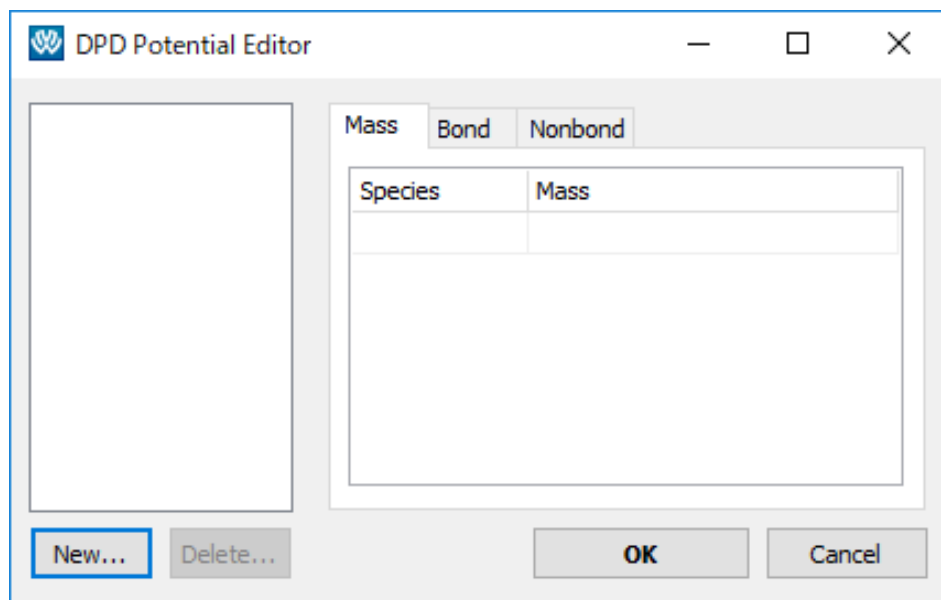
II. ポテンシャルの設定

MD | LAMMPS | 散逸粒子動力学 | ポテンシャル編集をクリックする。



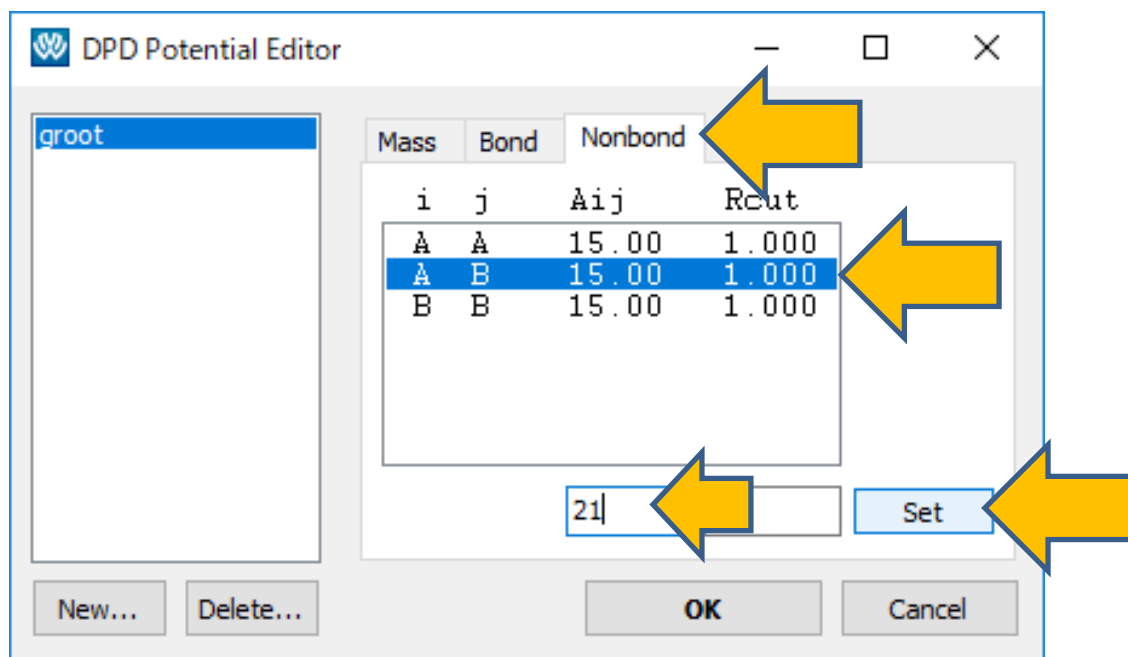
II. ポテンシャルの設定

1. **New**をクリックし、ポテンシャルファイルを新たに作成する。
2. **Enter name**でgrootと入力し、**OK**をクリックする。



II. ポテンシャルの設定

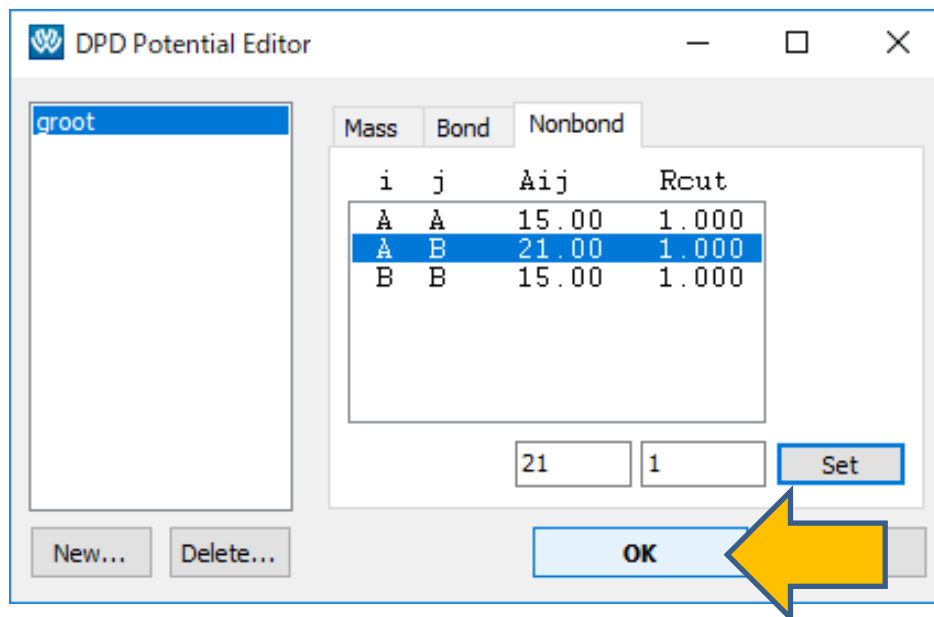
1. **Nonbond**タブを選び、リストから「A B 15.00 1.00」と表示された行をクリックする。
2. その下の左側のテキストボックスの値を15から21に変更し、**Set**をクリックする。
(**Aij**、**Rcut**ともに単位は無次元)



任意のモノマーについて**Aij**を決める方法は何通りかあるが、
例えば「Winmostar™ Gromacsチュートリアル 溶解度・ χ ・DPDパラメータの算出の方法がある。

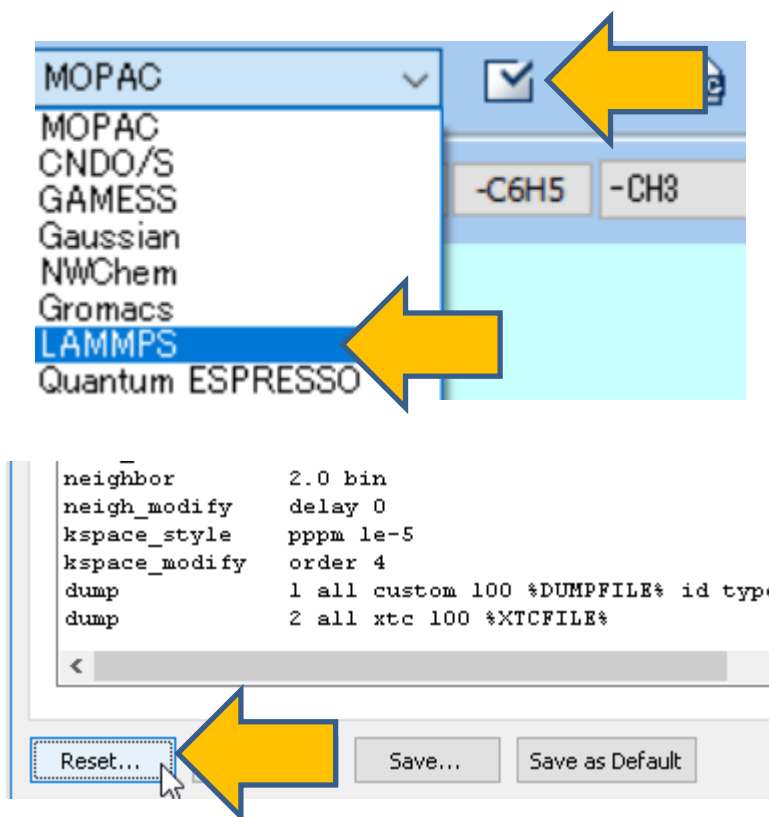
II. ポテンシャルの設定

OKをクリックし、DPD Potential Editorを終了する。



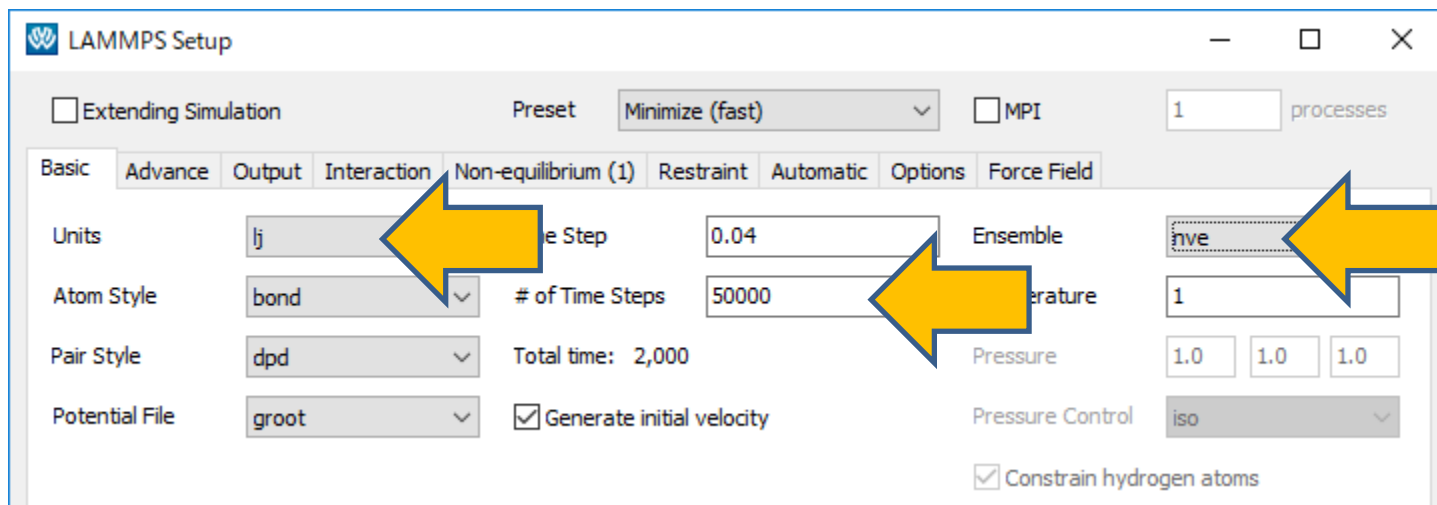
III. LAMMPSの設定

ソルバー一覧から**LAMMPS**を選択し、☒ (キーワード設定)をクリックする。
Resetボタンを押し設定をリセットする。



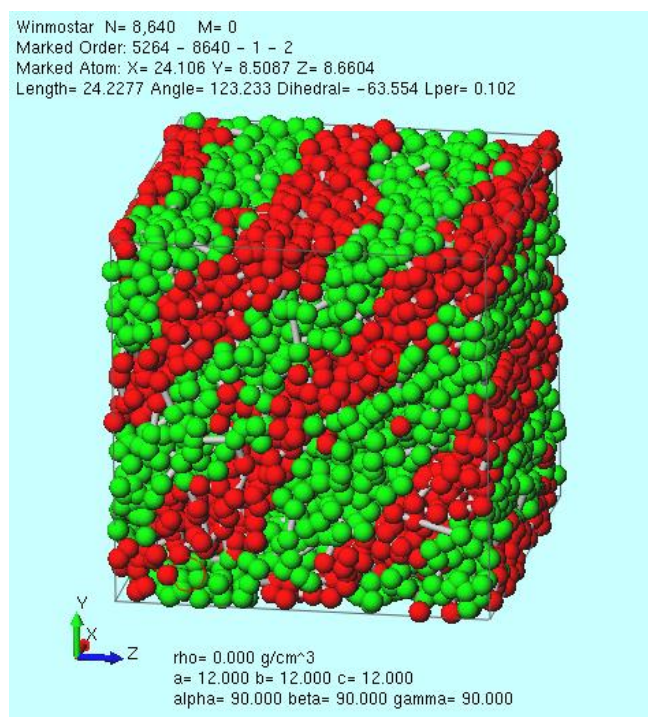
III. LAMMPSの設定

1. **Units**をljに変更する。(表示される温度・圧力・時間は無次元)
2. **Ensemble**をnveに変更
3. **# of Time Steps**を50,000に変更
4. **Run**をクリックする。ファイル名はDPDとし、保存する。



V. 結果の表示

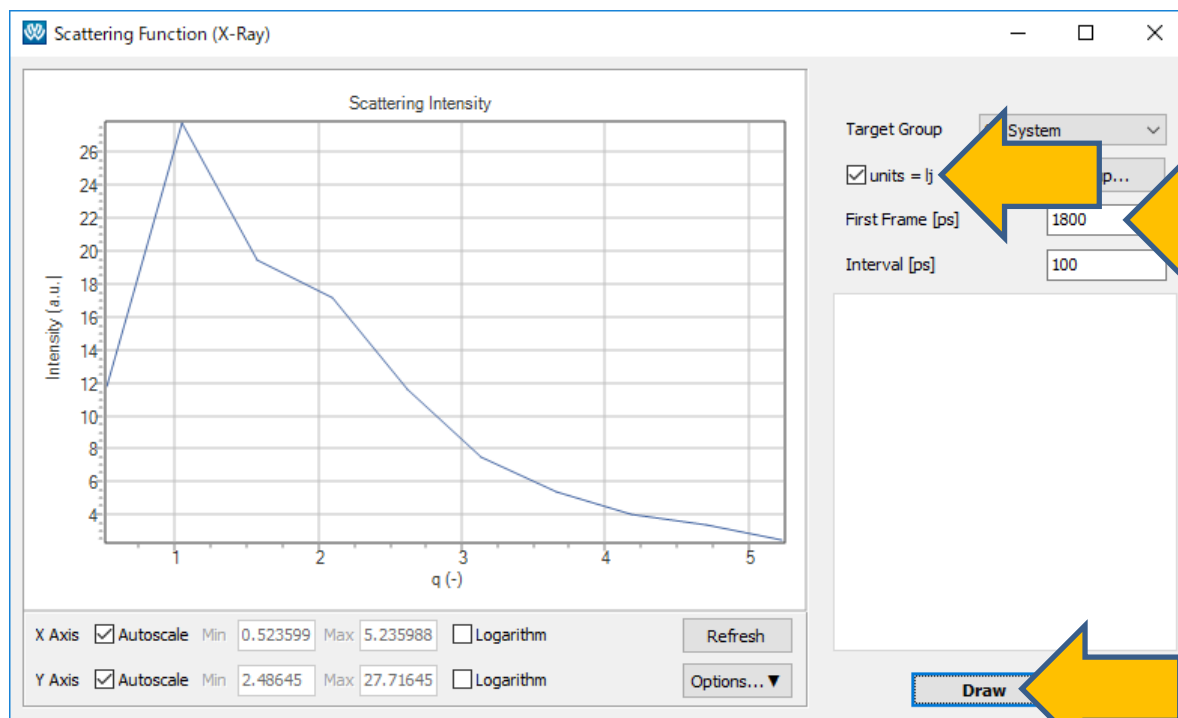
1.  (トラジェクトリ読み込み)をクリックし、デフォルトで選択されたファイルを開く。
2.  (再生)をクリックする。



ミクロ相分離を起こし、ラメラ相が表れていることが分かる。

V. 結果の表示

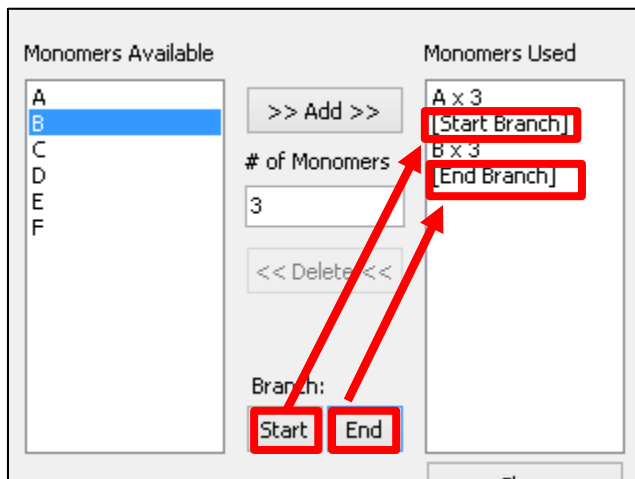
1.  (結果解析) | 散乱関数をクリックし、デフォルトで選択されたファイルを開く。
2. **units = lj**にチェックを入れ、**First Frame**に**1800**と入力する。
3. **Draw**をクリックすると散乱関数が表示される。



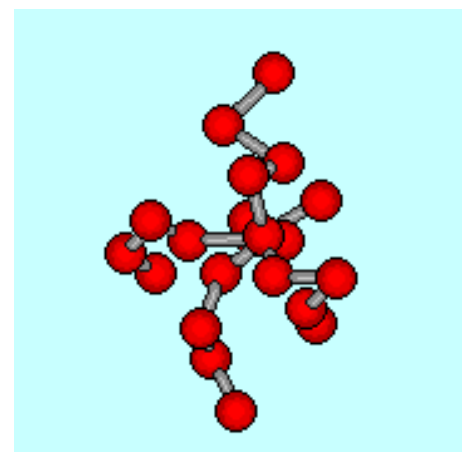
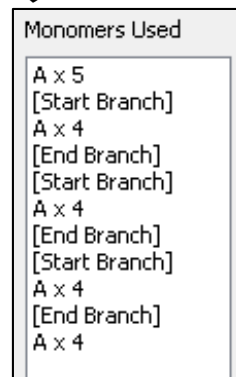
ピークが波数 $q=1 \sim 2$ 、
すなわち、長さ $l=6.42 \sim 3.14$ 程度
($l = 2\pi/q$)のところに現れている。
これは実際に出現したラメラ構造
の繰り返し単位に一致する。

補足1: 分岐の作成

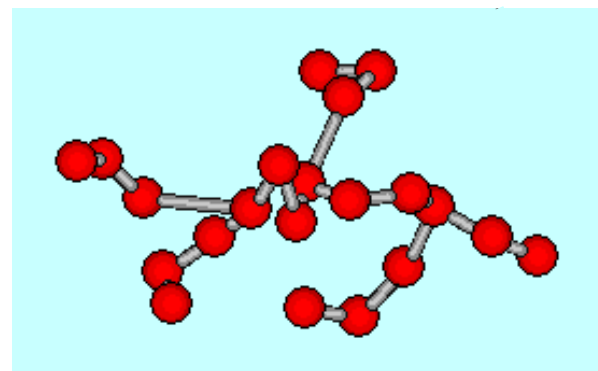
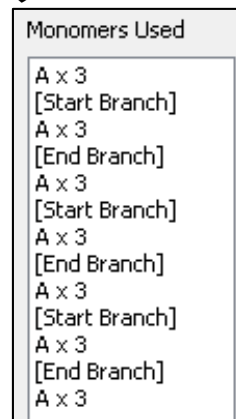
Startおよび**End**により分子に分岐(Branch)を導入できる。



例) 星形ポリマー



楕形ポリマー



Start: 直前の粒子から分岐を発生

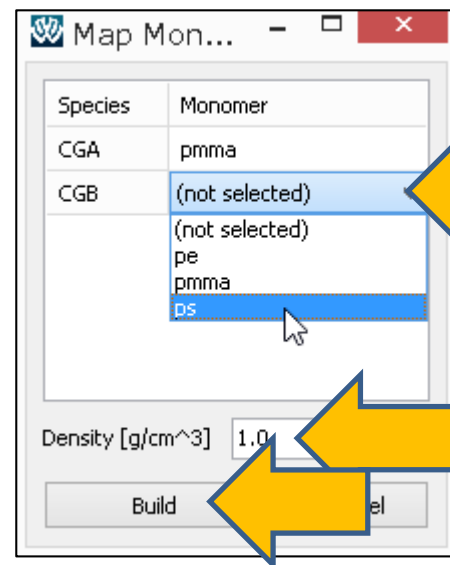
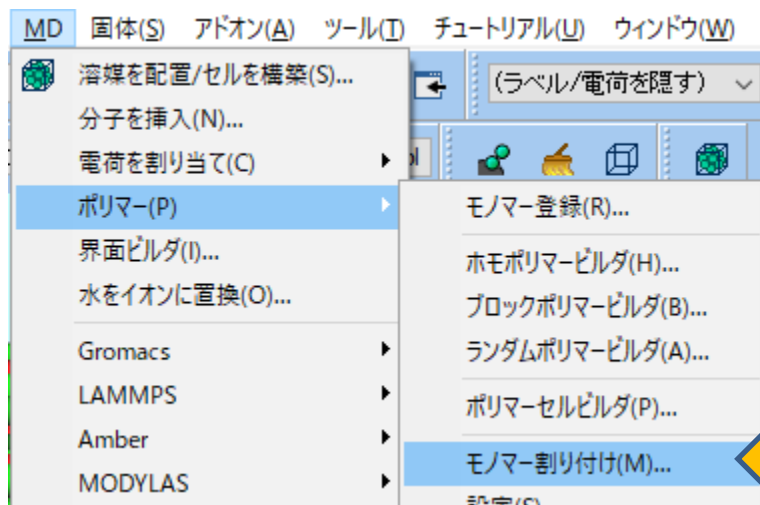
End: **Start**で開始した分岐を終了

補足2: 古典MDの座標への変換

DPDで取得した粒子配置から、古典(全原子)MDの座標を取得したい場合は、**MD | ポリマー | モノマー割り付け**を選ぶ。

Monomer欄において、各粒子に対してどのモノマーを割り付けるか指定し、**Density**を指定した後、**Build**する。

モノマーは、**MD | ポリマー | モノマー登録**にて登録されている必要がある。
(詳細は「Winmostar™ LAMMPSチュートリアル ガラス転移温度(ポリマー)」を参照)
ただし、粒子数が多いほど変換に長い処理時間が必要となる。



<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 navigation menu with tabs for 'タイムライン' (Timeline), '基本データ' (Basic Data), '写真' (Photos), 'いいね!' (Likes), and '動画' (Videos).

On the left sidebar, there are sections for 'ユーザー' (Users) with 138 likes, '情報' (Info) with the website URL <http://x-ability.jp/>, '写真' (Photos) showing a grid of images, and 'ビジター投稿' (Visitor Posts).

The main post is from X-Ability Co., Ltd. dated November 14, 2020, at 20:30. The text of the post mentions a new chemistry textbook by Yamaguchi Tetsuaki, published by Frontiers Orbital, and notes that it uses Winmostar software developed by the company. A link to the Amazon page is provided. The post image shows a molecular structure diagram with the title '山口 達明' (Yamaguchi Tetsuaki) and '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 by Frontiers Orbital).

A callout bubble with a thumbs-up icon and the text 'いいね!' (Like!) is positioned over the post. Below the post, there are buttons for 'いいね!' (Like), 'コメントする' (Comment), and 'シェア' (Share).

At the bottom, another post from X-Ability Co., Ltd. is partially visible, dated November 9, 2020, at 21:38, mentioning the company's location at the University of Tokyo campus.