

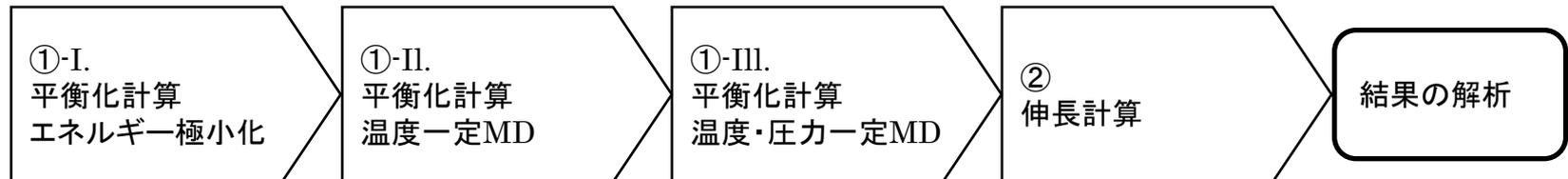
Winmostar™ チュートリアル
LAMMPS
伸長計算(ポリマー)
V9.2.1

株式会社クロスアビリティ

2019年4月30日

概要

- ポリエチレン溶融体の伸長過程を計算し、ひずみ-応力の取得を行います。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、一旦高压(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)、分子数、伸長速度、圧力制御(ポアソン比)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。

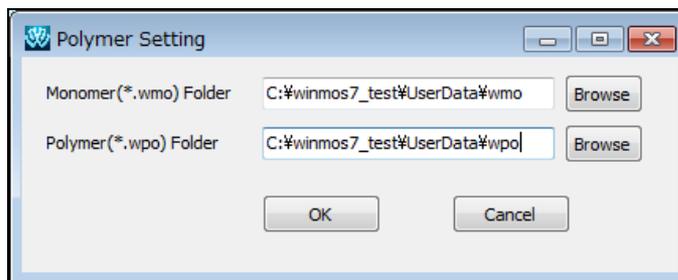
ビルド済みのcygwin_wmをインストールする場合（推奨）

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）

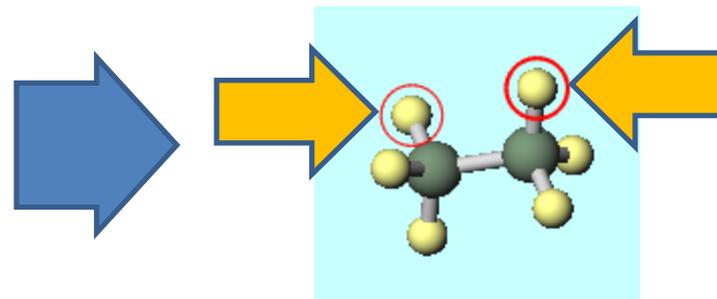
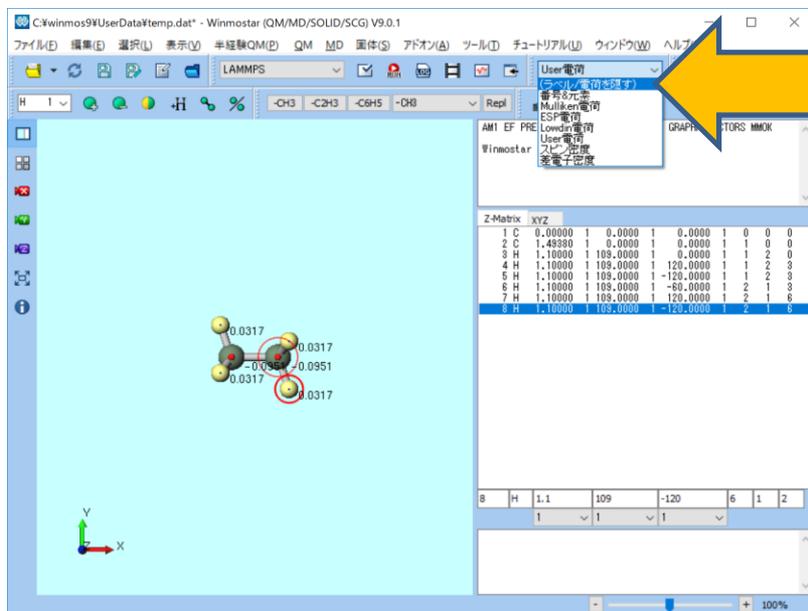
- ポリマーツールの設定

[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。



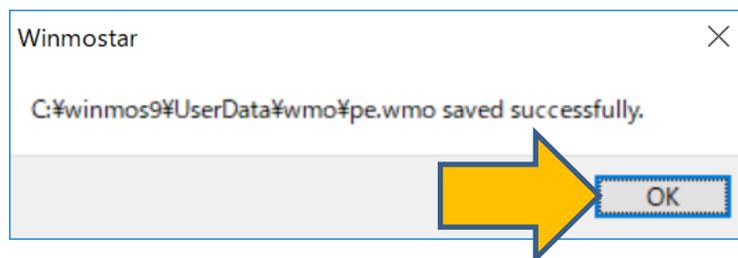
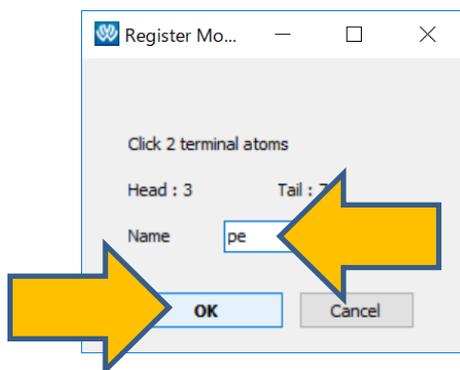
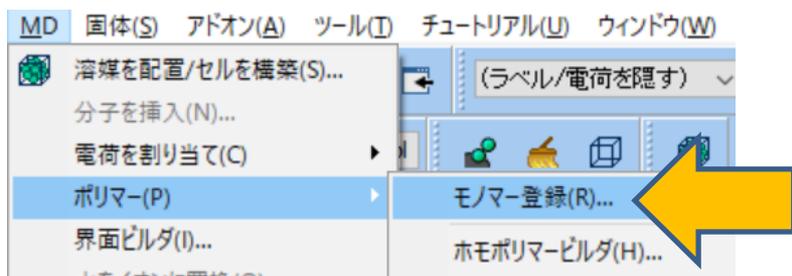
I. モノマーを登録

1. ポリエチレンの繰り返し構造(エタン、 C_2H_6)をメイン画面上で作成する。
2. MD | 電荷割り当て | Acpypeを使用をクリックし、Executeをクリックする。
3. 電荷を非表示にしたい場合はラベル/電荷から(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。



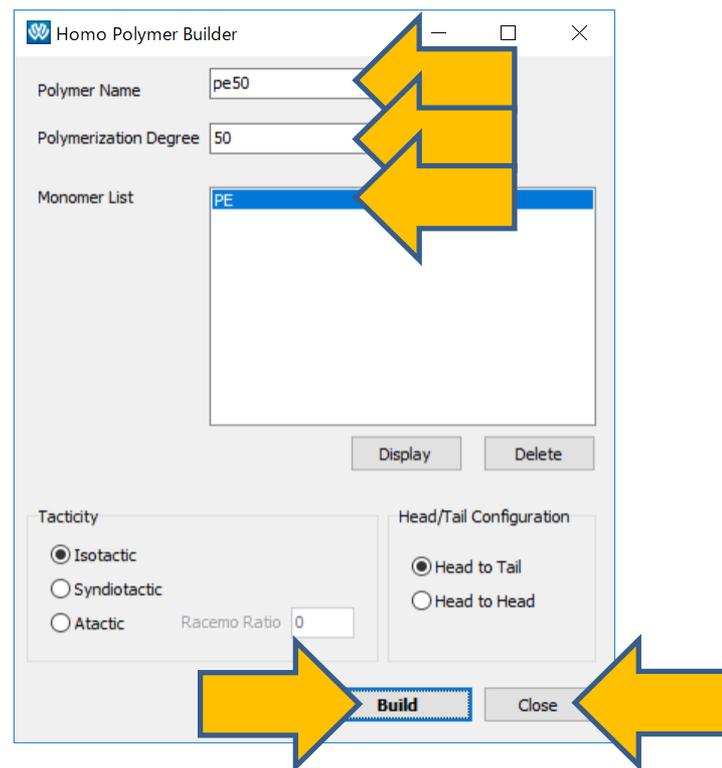
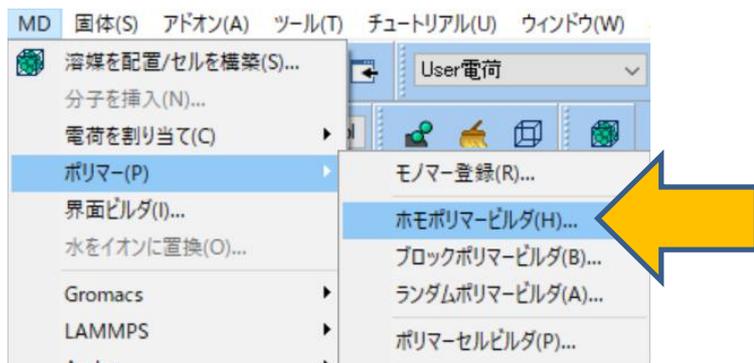
I. モノマーを登録

1. MD | ポリマー | モノマー登録をクリックする。
2. Nameにpeと入力し、OKをクリックする。
3. 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。



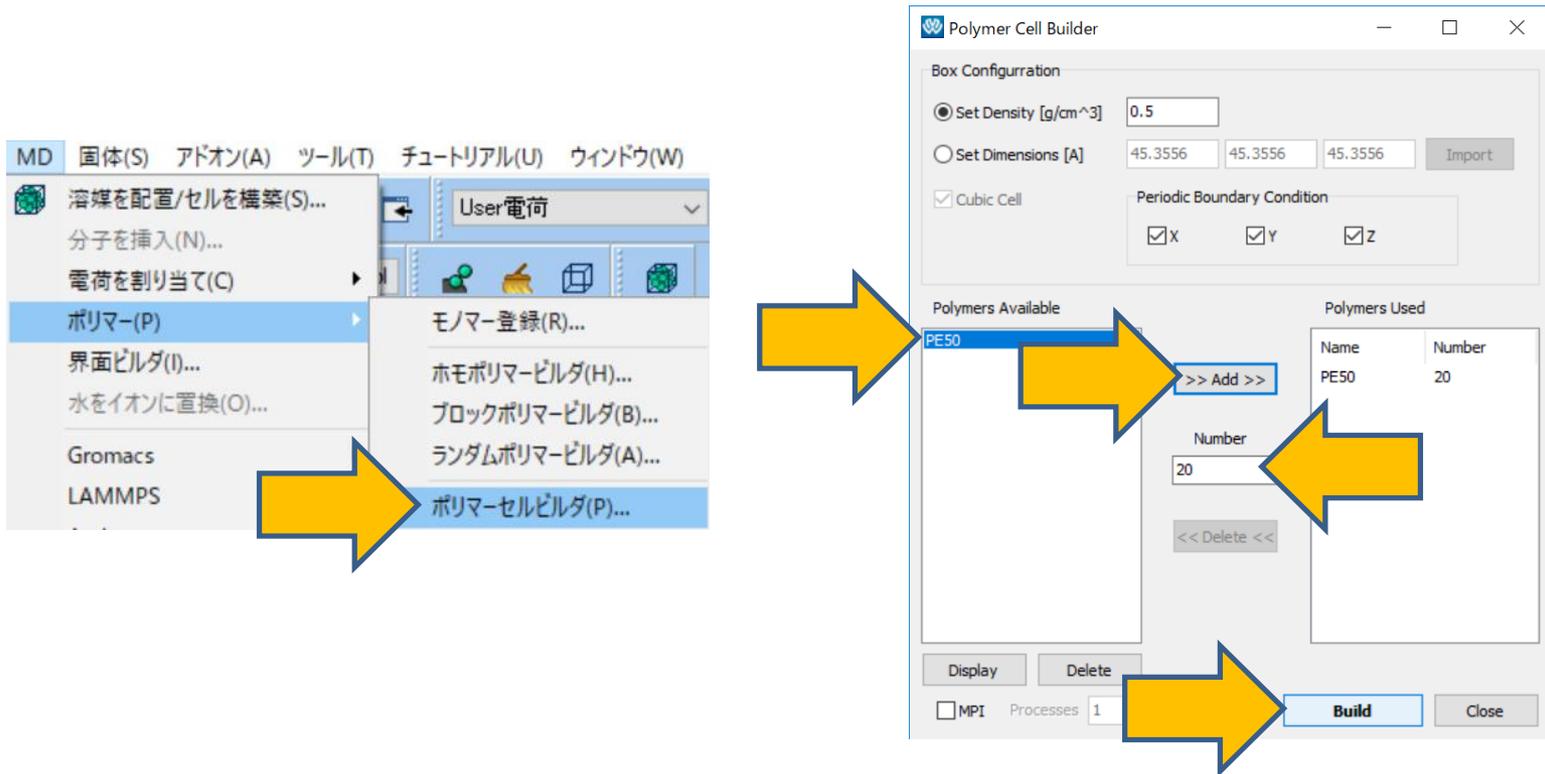
II. ポリマーを定義

1. MD | ポリマー | ホモポリマービルダをクリックする。
2. Polymer Nameにpe50、Polymerization Degreeに50、Monomer ListでPEを選択する。
3. Buildをクリックした後、Closeをクリックする。



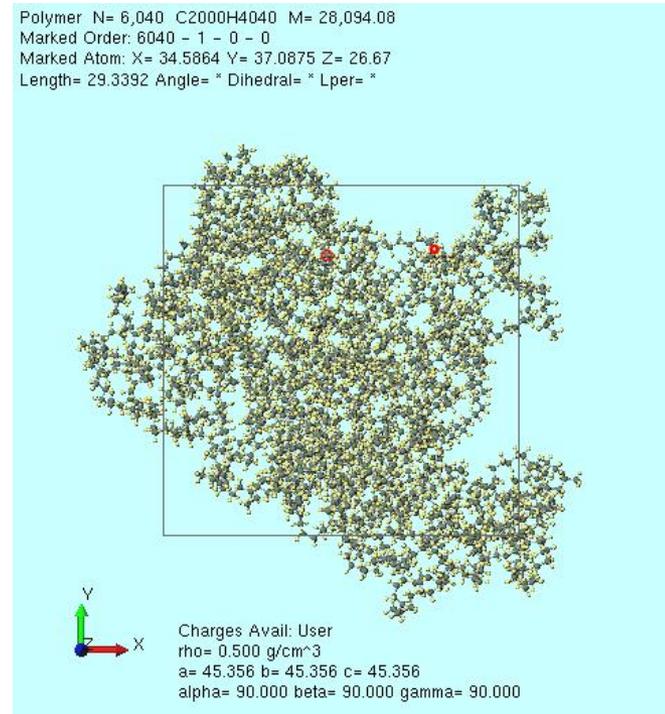
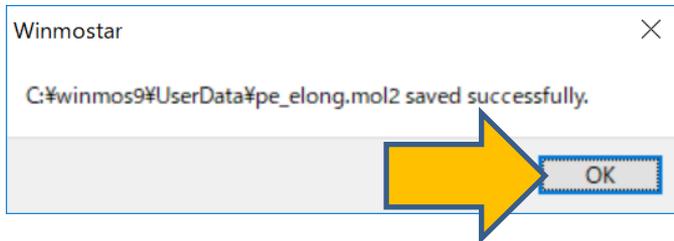
III. 系を作成

1. MD | ポリマー | ポリマーセルビルダをクリックする。
2. Polymers Availableからpe50を選択し、Numberを20としAddする。
3. Buildをクリックする。保存時のファイル名はpe_elong.mol2とする。



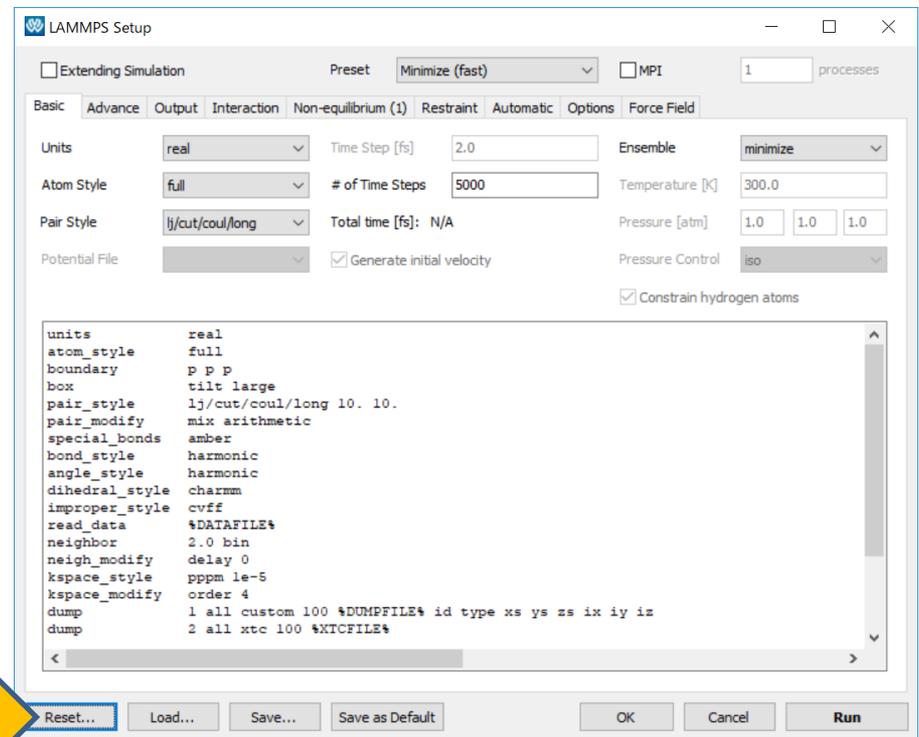
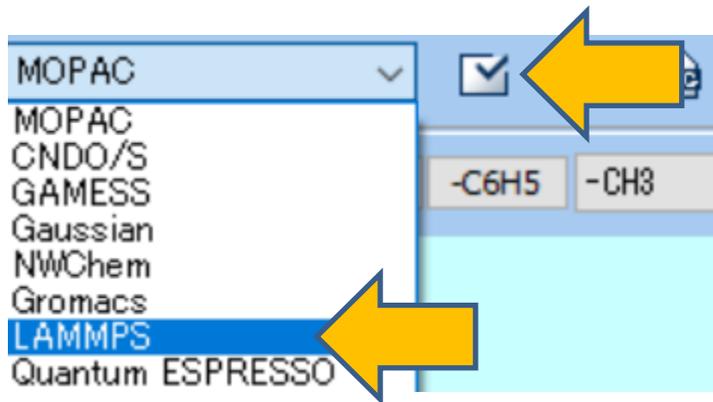
III. 系を作成

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のCloseをクリックする。



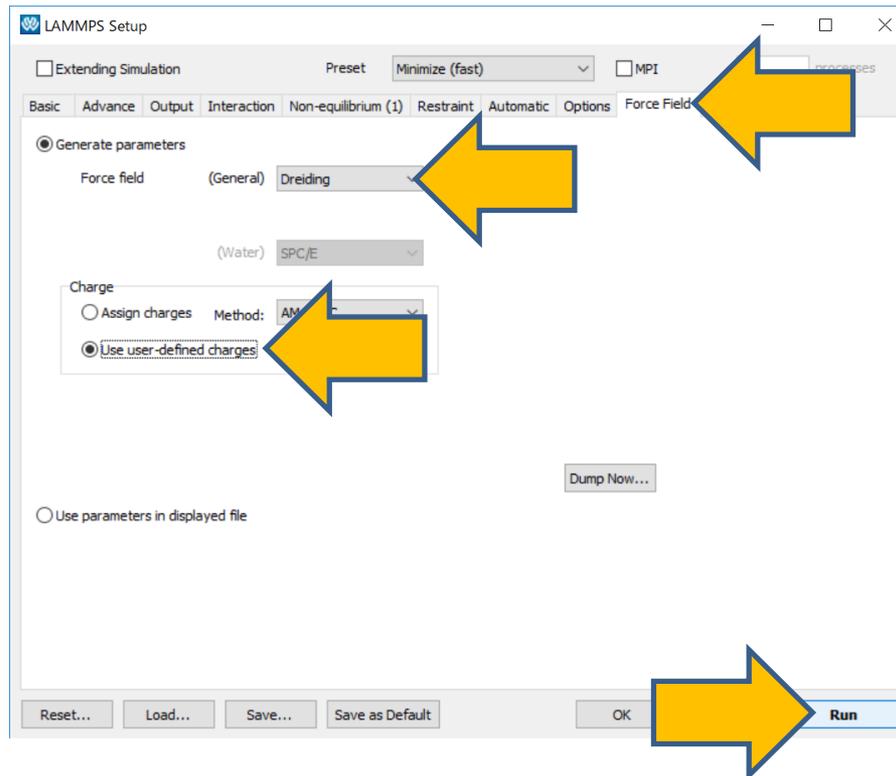
IV. 平衡化計算

1. 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。
2. **Reset**をクリックする。



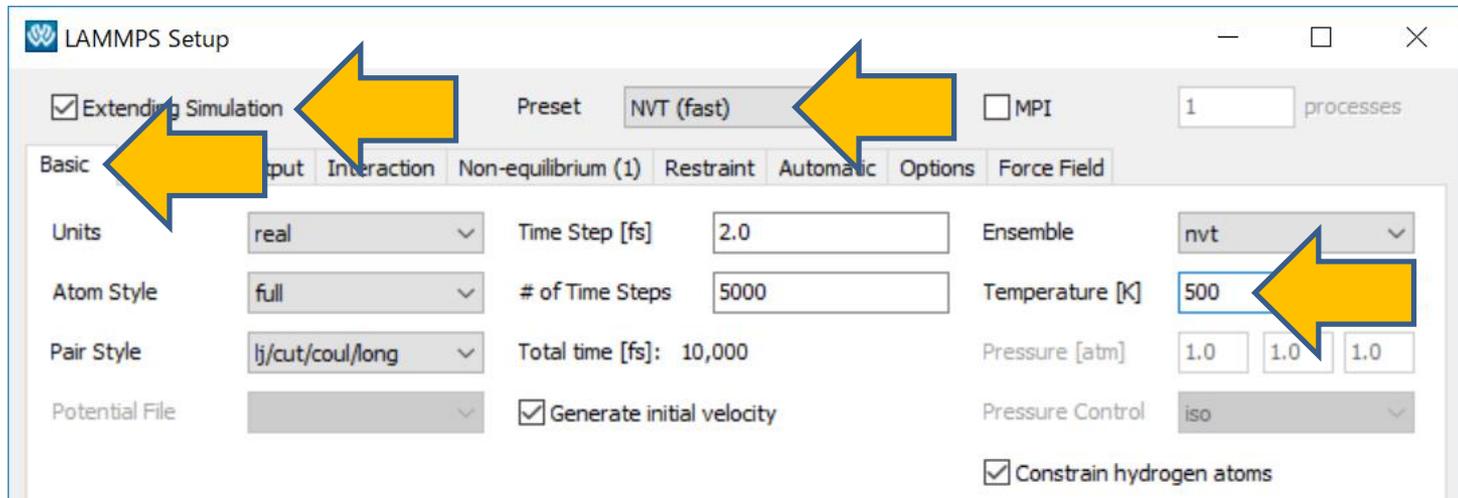
IV. 平衡化計算

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。ファイル名はpe_elong.dataとして保存する。



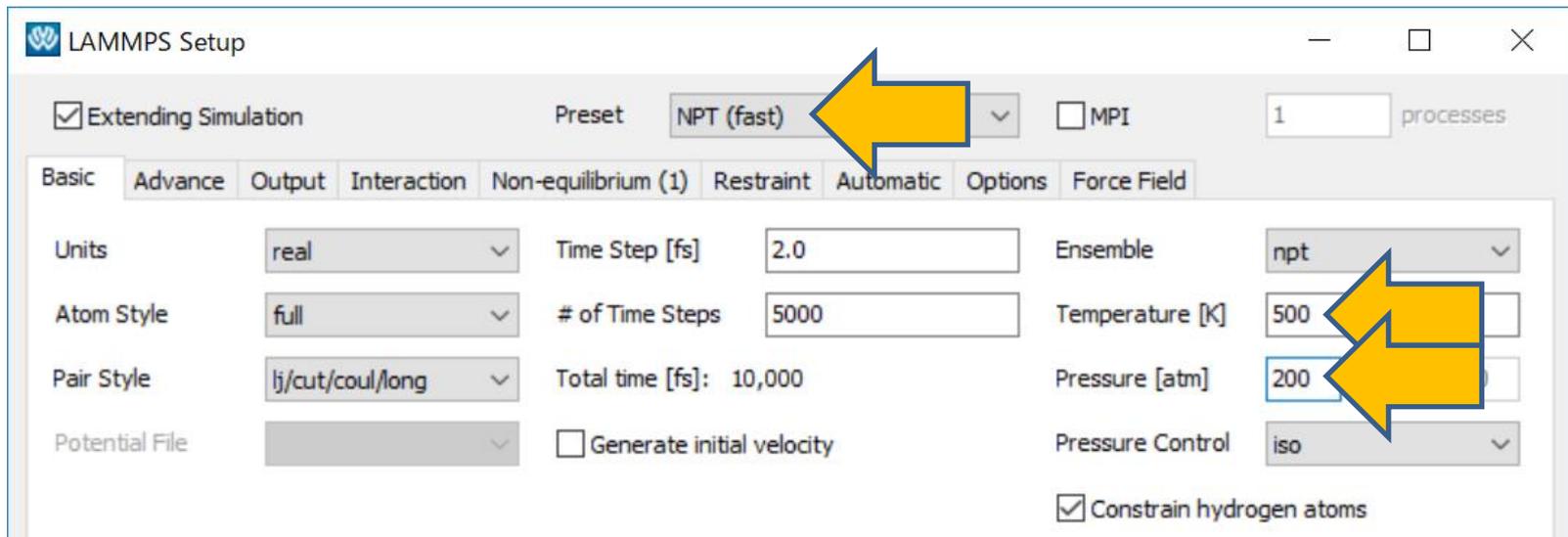
IV. 平衡化計算

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. **Basic**タブにてTemperatureは500に変更する。
4. **Run**をクリックする。



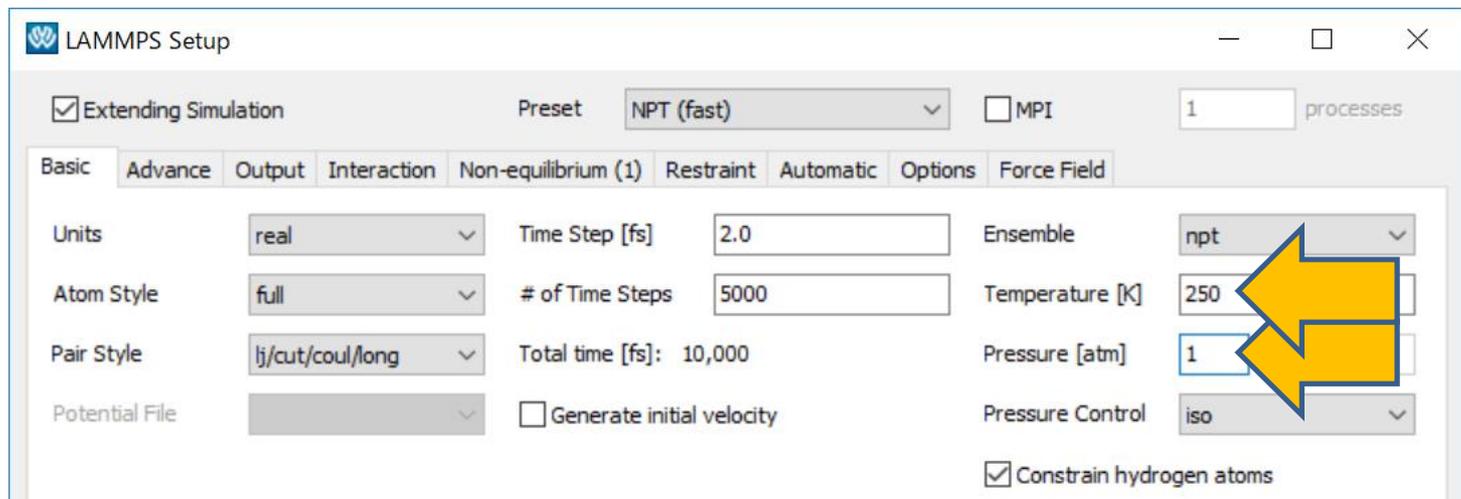
IV. 平衡化計算

1. (キーワード設定)をクリックする。
2. PresetにNPT (fast)に設定し、
3. Temperatureを500、Pressureを200に変更する。
4. Run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. **Basic**タブにて、Temperatureを250、Pressureを1に変更する。
3. Runをクリックする。



V. 伸長計算

ひずみ-応力 (S-S) 曲線算出を目的として、伸長計算を行う。

1. (キーワード設定)をクリックする。
2. **Basic**タブの# of Time Stepsを50000、Pressure Controlをxyとし、**Non-equilibrium (1)**タブのEnable Elongationにチェックを入れ、Eng. Strain Rateを $1e-5$ に変更する。
3. Runをクリックする。

The image shows two windows from the LAMMPS Setup software. The left window is the main configuration panel, and the right window is the 'LAMMPS Setup' dialog box.

Left Window (Main Configuration):

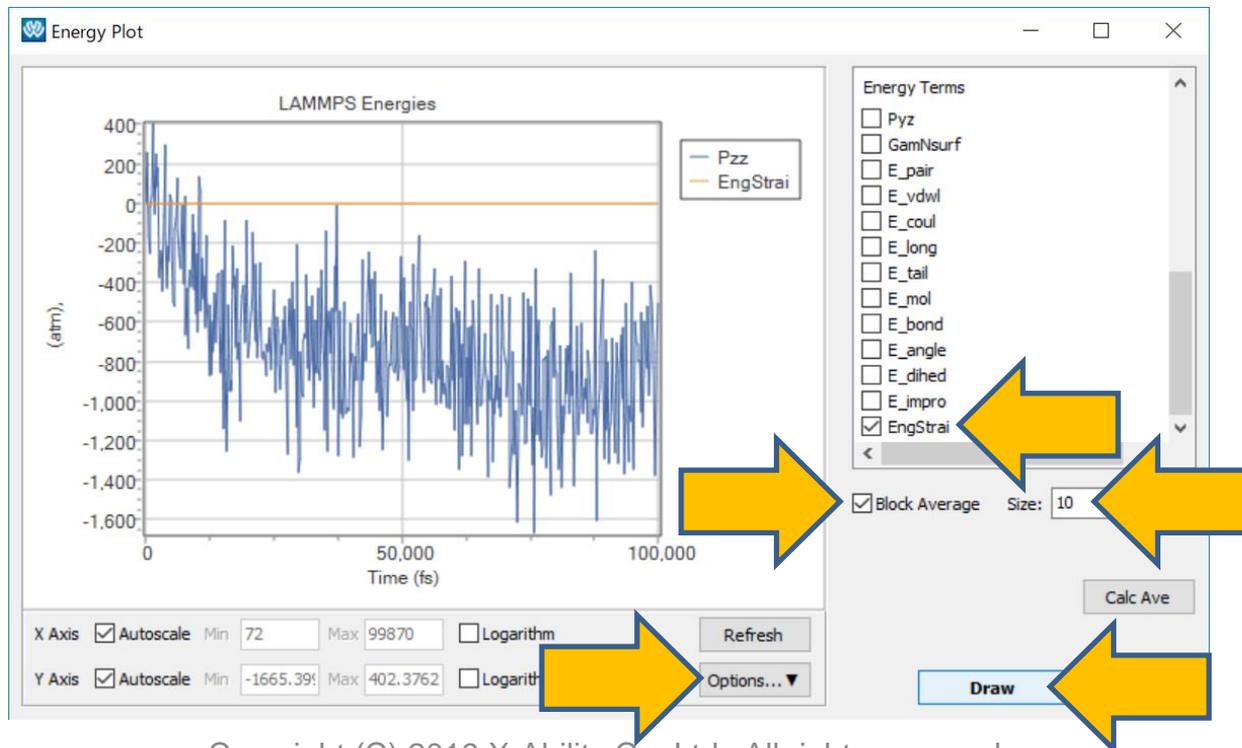
- Preset: NPT (fast)
- MPI: (1 processes)
- Equilibrium (1) | Restraint | Automatic | Options | Force Field
- Time Step [fs]: 2.0
- # of Time Steps: 50000
- Total time [fs]: 100,000
- Generate initial velocity
- Ensemble: npt
- Temperature [K]: 250
- Pressure [atm]: 1 1 1
- Pressure Control: xy
- Constrain hydrogen atoms

Right Window (LAMMPS Setup):

- Extending Simulation:
- Preset: NPT
- Basic | Advance | Output | Interaction | Non-equilibrium (1)
- Enable elongation:
- Affine transformation:
- Eng. Strain Rate [1/fs]: 1e-5
- Max Eng. Strain: 1.000
- Final Temperature [K]:
- Annealing Rate: 1

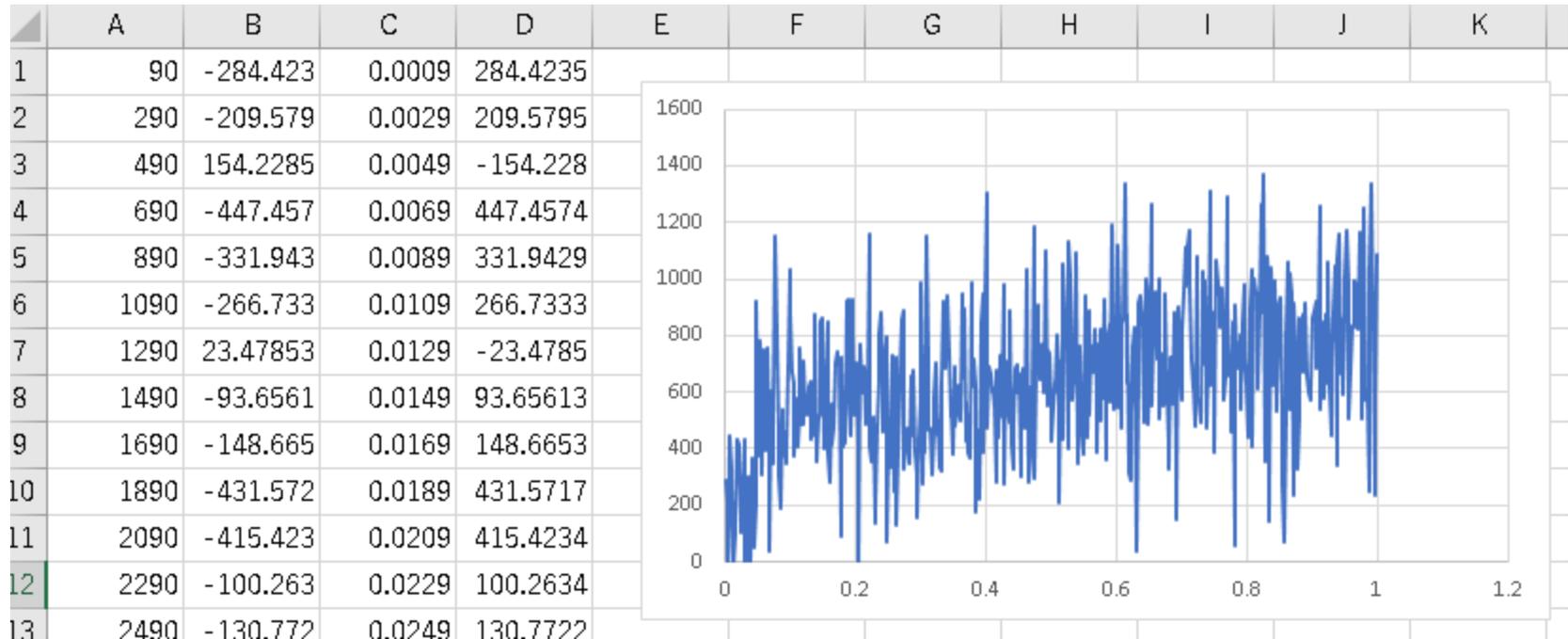
V. 伸長計算

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Pzz (z方向の圧力)、EngStrai (工業ひずみ)にチェックを入れる。
3. **Block Average**にチェックを入れSizeを10に変更する。
4. **Draw**をクリックした後、Options | Open Excelを押す。



V. 伸長計算

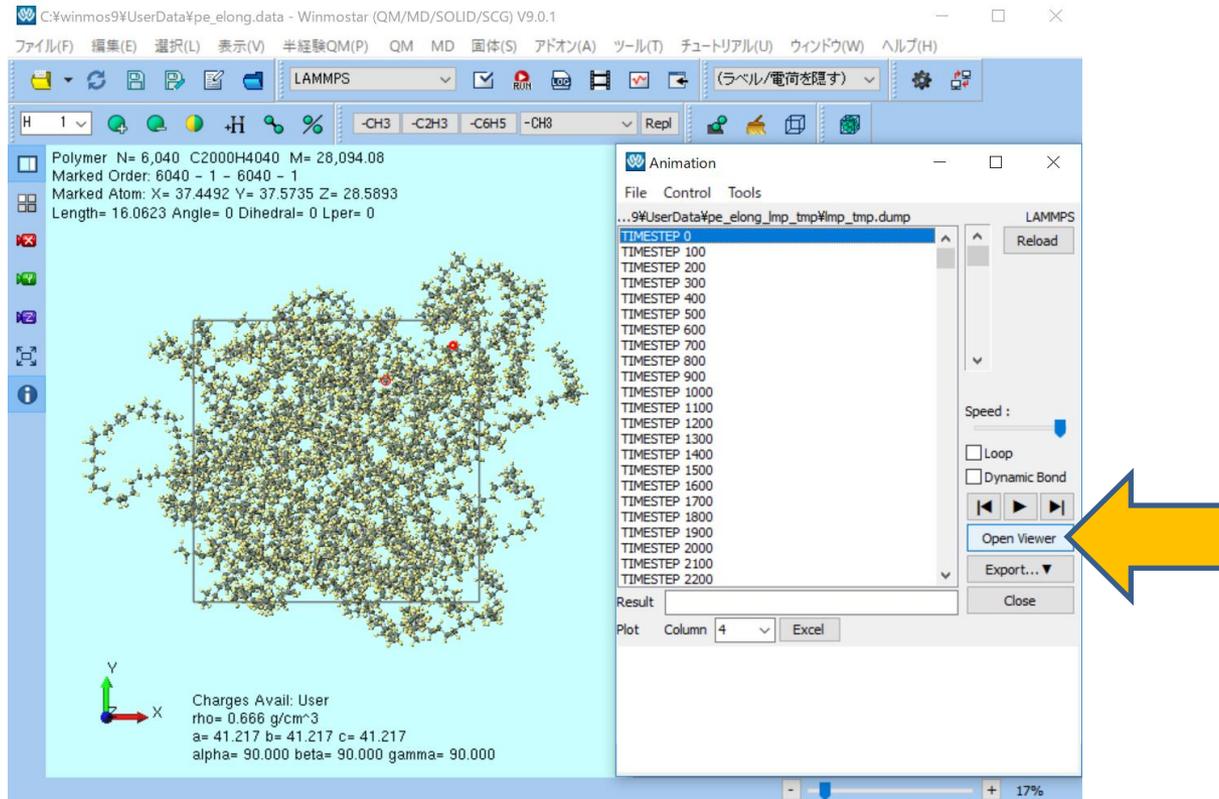
3列目と, 2列目に-1を掛けた列(ここではD列)をプロットする。
これはひずみ-応力曲線(S-S曲線)に相当する。
(ここでは縦軸の下限は0としてプロットした)



参考文献: Hossain, D., Tschopp, M.A., Ward, D.K., Bouvard, J.L., Wang, P., Horstemeyer, M.F., Polymer, 51 (2010) 6071-6083.

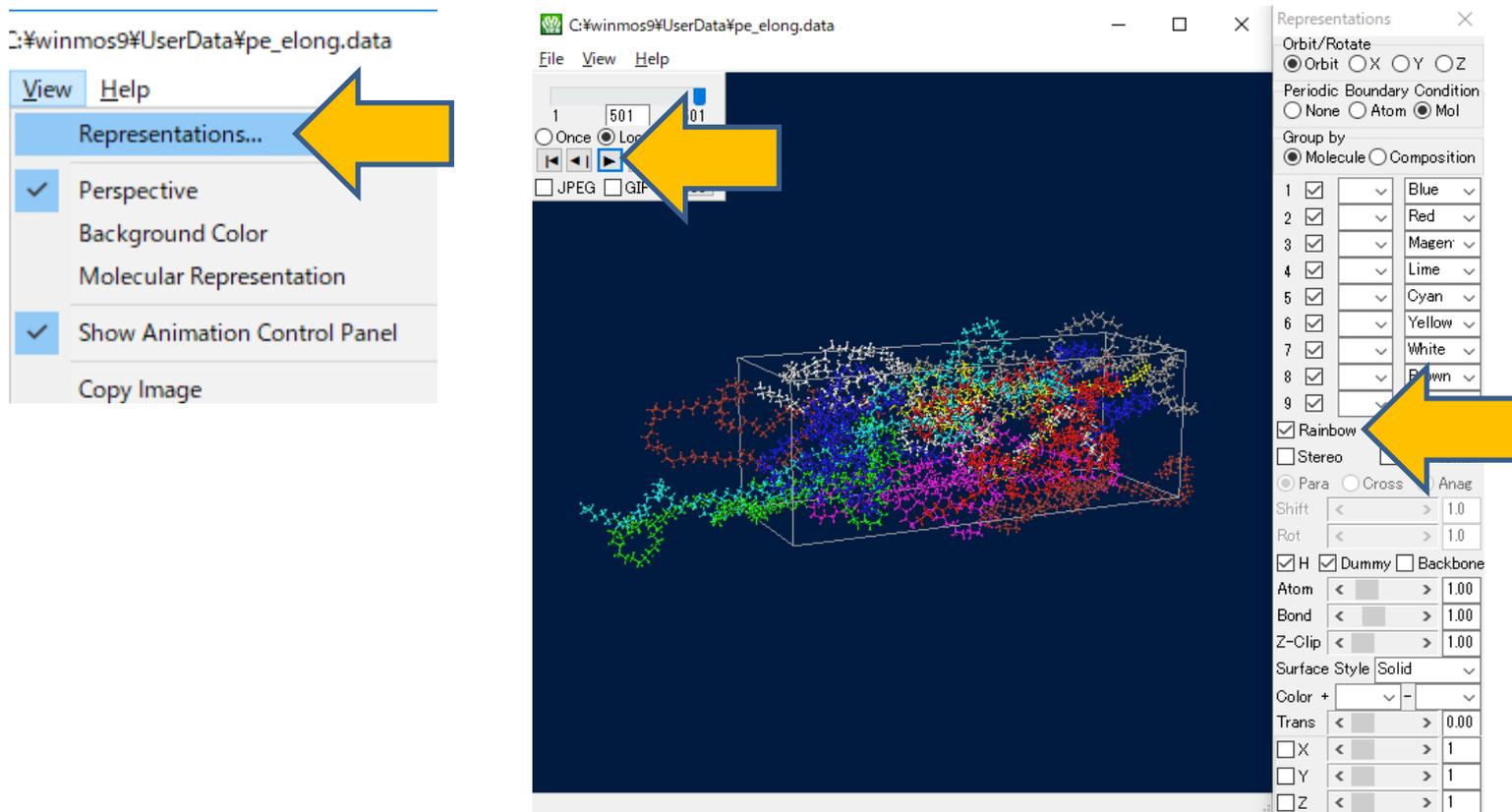
V. 伸長計算

1. Winmostar™に戻り、 (トラジェクトリ読み込み)にて、デフォルトで選ばれるファイルを開く。
2. AnimationウインドウのOpen Viewerをクリックする。



V. 伸長計算

1. 起動したWinmostar ViewerのView | Representationsをクリックする。
2. RepresentationsウィンドウにてRainbowをチェックする。
3. 画面左の「|>」(再生)ボタンを押し、ポリマーが引き伸ばされる様子を観察する。



<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! 38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