

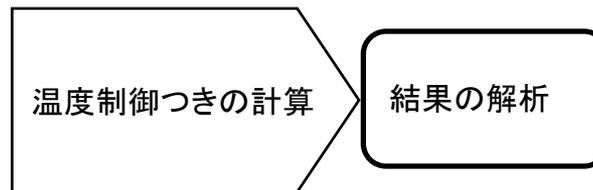
Winmostar™ チュートリアル
OpenMX
分子動力学編
V9.3.0

株式会社クロスアビリティ

2019年6月7日

概要

- メタン分子の分子動力学計算をごく短時間実行します。最初に300 Kで温度制御した状態で計算し、エネルギー、温度、アニメーションの可視化を行います。



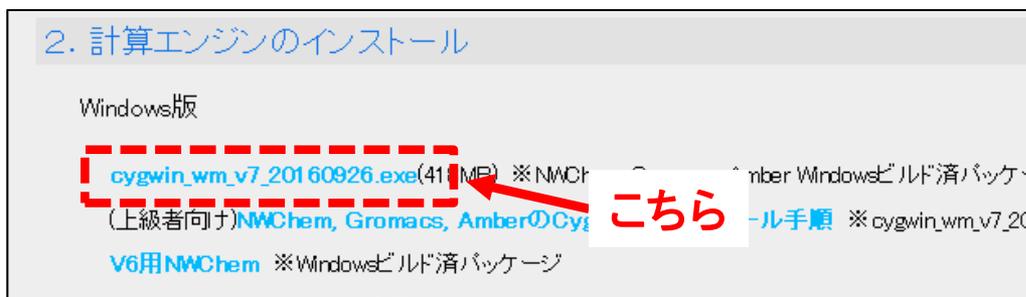
注意点:

- バンド数、擬ポテンシャルの種類、カットオフエネルギーは計算結果に大きな影響を与えます。本チュートリアルではすぐに結果を取得できるように、精度を落とした設定を用います。
- 系のサイズも計算結果に影響を与えます。
- 平衡化に十分な時間をかけ、本計算も長時間実行することで再現性の高いデータを取得することができます。

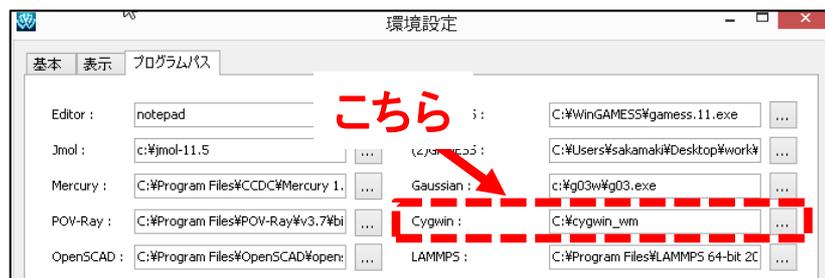
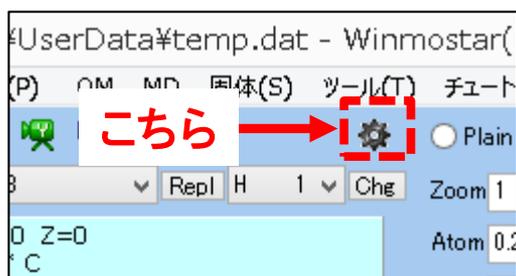
動作環境設定

本機能を用いるためには、Cygwinのセットアップが必要です。

- https://winmostar.com/jp/manual_jp.htmlの「2. 計算エンジンのインストール」から、Cygwinの自己解凍書庫(exe)を入手し実行してください。



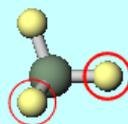
- デフォルトではC:\直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」>「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



I. モデルの作成

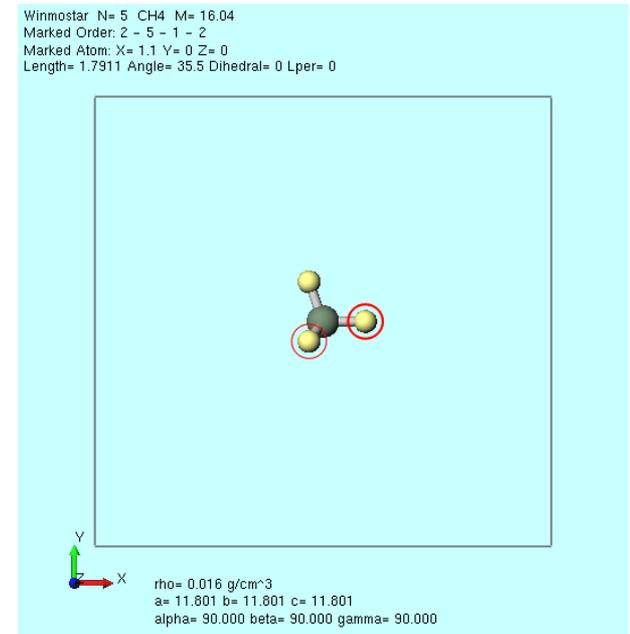
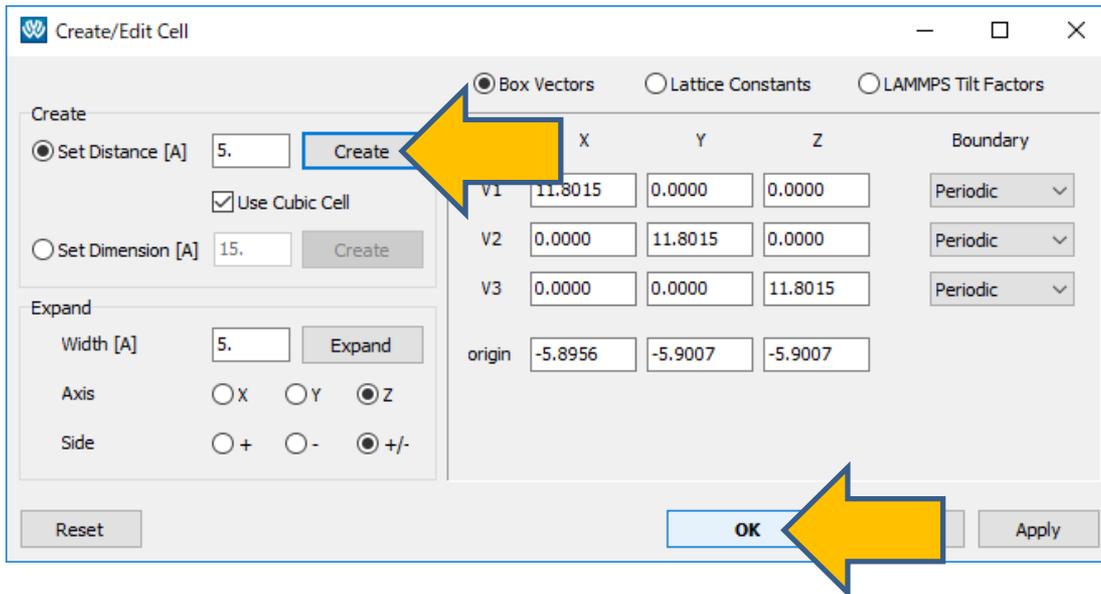
メイン画面上にてCH₄分子をモデリングする。

Winmostar N= 5 CH4 M= 16.04
Marked Order: 2 - 5 - 1 - 2
Marked Atom: X= 1.1 Y= 0 Z= 0
Length= 1.7911 Angle= 35.5 Dihedral= 0 Lper= 0



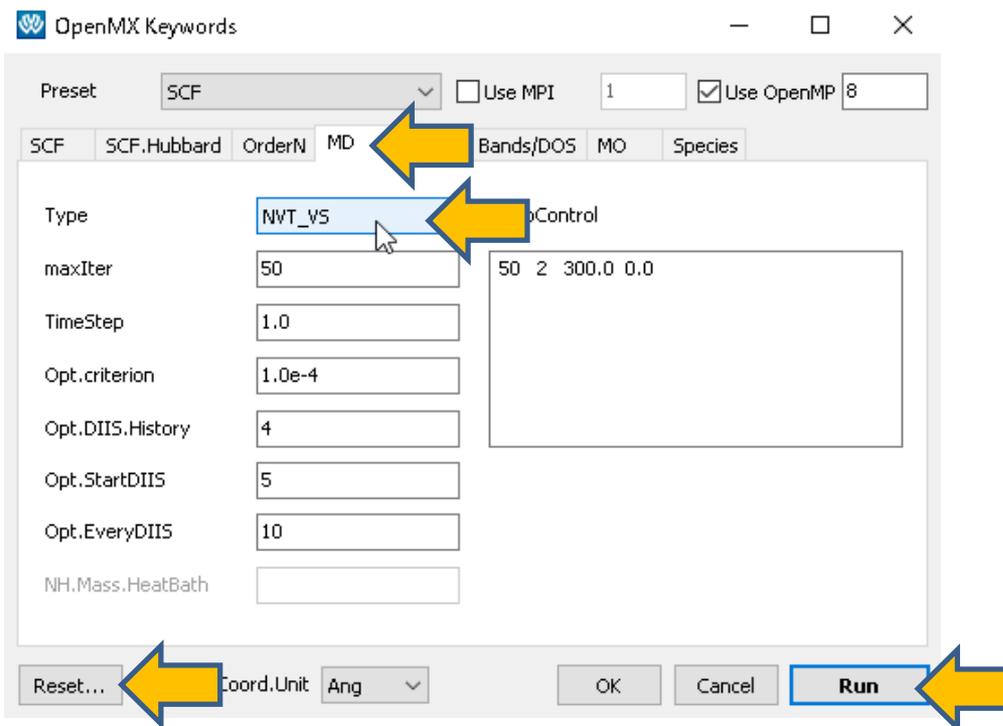
I. モデルの作成

1.  (セルを作成/編集)をクリックする。
2. **Create**をクリックし、**OK**をクリックすると、セルが作成される。



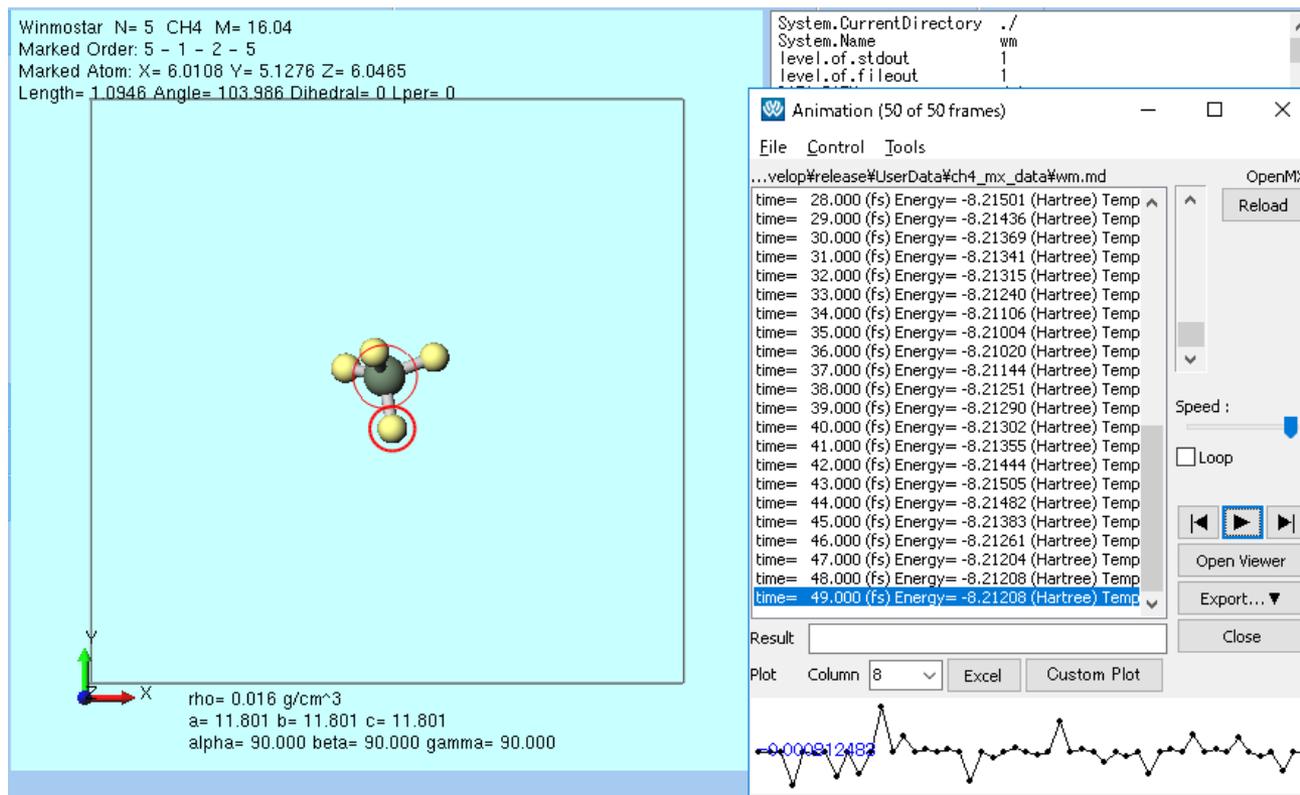
II. 温度制御付きの分子動力学計算

1. ソルバー一覧から**OpenMX**を選択する。
2. (キーワード設定)をクリックする。
3. **Reset**をクリックする。
4. **MD**タブにてTypeから**NVT_VS**を選択する。
5. **Run**ボタンをクリックし、ファイル名を**ch4.mxin**として保存すると計算が始まる。



II. 温度制御付きの分子動力学計算

1. 計算終了後、 (アニメーション) をクリックし、デフォルトで選ばれるファイルをクリックする。
2. **Animation** ウィンドウの  (再生ボタン) をクリックすると、アニメーションがメインウィンドウに表示される。



The screenshot displays the software interface for molecular dynamics simulation. The main window shows a 3D model of a molecule (CH4) with a red circle around one of the hydrogen atoms. The text in the main window includes:

```
Winmostar N= 5 CH4 M= 16.04
Marked Order: 5 - 1 - 2 - 5
Marked Atom: X= 6.0108 Y= 5.1276 Z= 6.0465
Length= 1.0946 Angle= 103.986 Dihedral= 0 Lper= 0
```

At the bottom of the main window, the following parameters are listed:

```
rho = 0.016 g/cm^3
a = 11.801 b = 11.801 c = 11.801
alpha = 90.000 beta = 90.000 gamma = 90.000
```

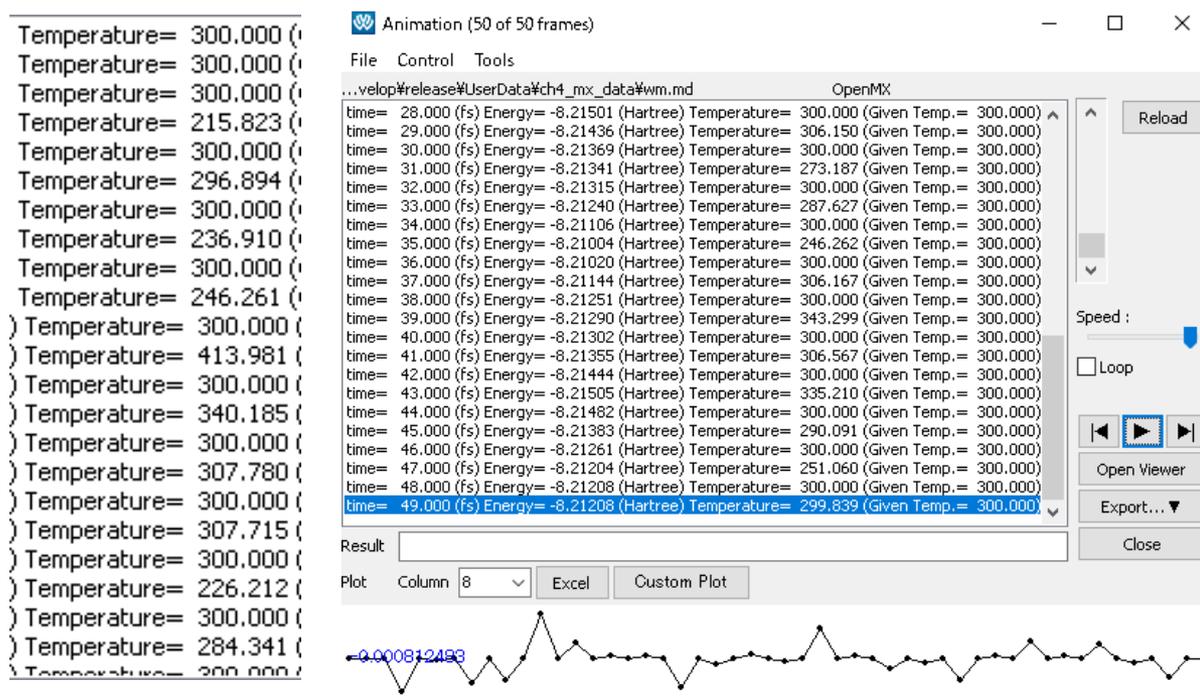
The **Animation (50 of 50 frames)** window is open, showing a list of simulation frames with their corresponding time, energy, and temperature values. The list is as follows:

time (fs)	Energy (Hartree)	Temp
28.000	-8.21501	(Hartree) Temp
29.000	-8.21436	(Hartree) Temp
30.000	-8.21369	(Hartree) Temp
31.000	-8.21341	(Hartree) Temp
32.000	-8.21315	(Hartree) Temp
33.000	-8.21240	(Hartree) Temp
34.000	-8.21106	(Hartree) Temp
35.000	-8.21004	(Hartree) Temp
36.000	-8.21020	(Hartree) Temp
37.000	-8.21144	(Hartree) Temp
38.000	-8.21251	(Hartree) Temp
39.000	-8.21290	(Hartree) Temp
40.000	-8.21302	(Hartree) Temp
41.000	-8.21355	(Hartree) Temp
42.000	-8.21444	(Hartree) Temp
43.000	-8.21505	(Hartree) Temp
44.000	-8.21482	(Hartree) Temp
45.000	-8.21383	(Hartree) Temp
46.000	-8.21261	(Hartree) Temp
47.000	-8.21204	(Hartree) Temp
48.000	-8.21208	(Hartree) Temp
49.000	-8.21208	(Hartree) Temp

The animation window also features a **Speed** slider, a **Loop** checkbox, and buttons for **Open Viewer**, **Export...**, and **Close**. A **Result** field and **Plot** options (Column 8, Excel, Custom Plot) are also visible. A small plot at the bottom of the animation window shows a fluctuating signal over time.

II. 温度制御付きの分子動力学計算

1. 値のリストを見やすくするため、**Animation**ウィンドウを横に広げる。
リストの8列目には**Temperature** (温度)が表示され、**300 K**前後で推移していることを確認する。
2. **Animation**ウィンドウ右下のプルダウンから**8**を選択すると、**Animation**ウィンドウ下部に温度の時間変化が表示される。



<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