

Winmostar - Gromacs Tutorial 4

混合溶媒系(「溶媒として保存」機能を使用)

V6.001

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2015/10/20

修正履歴

2015/7/23版

- (スライド2) 修正履歴を追加
- (全てのスライド) スライド番号およびフッターを追加
- (スライド7、12、19、21)MDP Run parameters画面の差し替え
- (スライド8、10、11、13、17)画面の差し替え
- (スライド20)エネルギー変化画面の差し替え
- (スライド23)「トラジェクトリーを確認手順」を追加

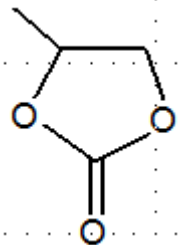
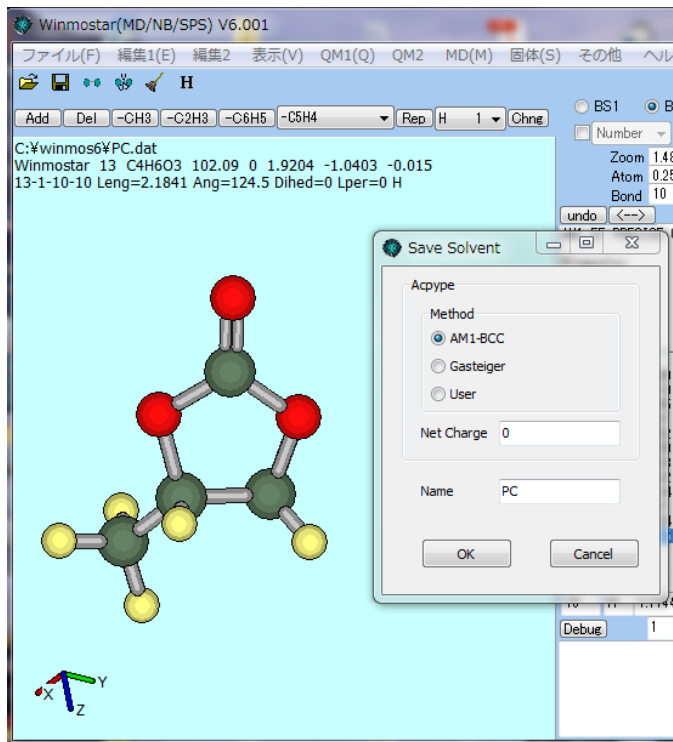
2015/10/20版

- (全てのスライド) V6に対応すべく、画面を入れ替え

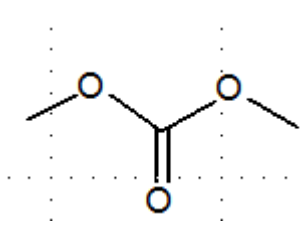
Contents

- ① はじめに
- ② PCとDMCの作成と登録
- ③ 混合溶媒系の作成とエネルギー極小化(最急降下法)計算の実行
- ④ 温度一定(nvt)のMD計算による構造緩和
- ⑤ 温度・圧力一定(npt)MD計算による凝集化
- ⑥ 温度・圧力一定(npt)MDの本計算

① はじめに(「溶媒として保存」機能について)



PC (Propylene carbonate)



DMC (Dimethyl carbonate)

本チュートリアルでは、題材として非水電解液として多用されるPCとDMC(左下図参照)の混合溶媒系を取り上げ、計算条件の設定からGromacsによる計算実行までを行う。

「Winmostar V6 MDオプション」には、作成した任意の分子に対してGromacsのトポロジーファイル(itpファイル)と分子構造ファイル(groファイル)を生成させる「溶媒として保存」という機能がある。本機能では原子電荷の設定と力場のアサインにacpype¹⁾を内部で使用している。GAFF²⁾とOPLS-AA/L³⁾の両方の力場ファイル(トポロジーファイル: itp)が自動生成されるため、MDの計算条件設定画面でいずれかの指定が可能である。

なおOPLS-AA/Lのitpファイル*⁴⁾には、非結合ポテンシャル(non-bonded potential)パラメータはOPLS-AA/Lであるが、結合ポテンシャル(bonded potential)パラメータにはGAFFが書き込まれるため注意のこと。なお、OPLS-AA/Lは分子によってアサインが不完全となることがあるため、必ずアサイン結果をitpファイルで確認すべきである。また、生成したitpファイルをテキストエディターで追加/修正することで、原子電荷やポテンシャルパラメータの変更が可能である。

1) acpype

<https://code.google.com/p/acpype/>

2) GAFF

J. Wang, W. Wang, P.A. Kollman and D.A. Case. Journal of Molecular Graphics and Modelling, 25, 247-260 (2006).; [J. Wang, R.M. Wolf, J.W. Caldwell, P.A. Kollman and D.A. Case. J. Comp. Chem., 25, 1157-1174 \(2004\).](#)

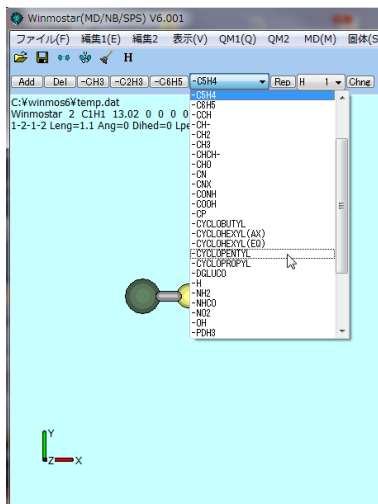
3) OPLS-AA/L

W. L. Jorgensen, D. S. Maxwell, and J. Tirado-Rives,; J. Am. Chem. Soc. 118, 11225-11236 (1996).; W. L. Jorgensen and N. A. McDonald, Theochem 424, 145-155 (1998).; W. L. Jorgensen and N. A. McDonald, J. Phys. Chem. B 102, 8049-8059 (1998).; R. C. Rizzo and W. L. Jorgensen, J. Am. Chem. Soc. 121, 4827-4836 (1999).; M. L. Price, D. Ostrovsky, and W. L. Jorgensen, J. Comp. Chem. (2001).; E. K. Watkins and W. L. Jorgensen, J. Phys. Chem. A 105, 4118-4125 (2001).; G. A. Kaminski, R.A. Friesner, J.Tirado-Rives and W.L. Jorgensen, J. Phys. Chem. B 105, 6474 (2001).

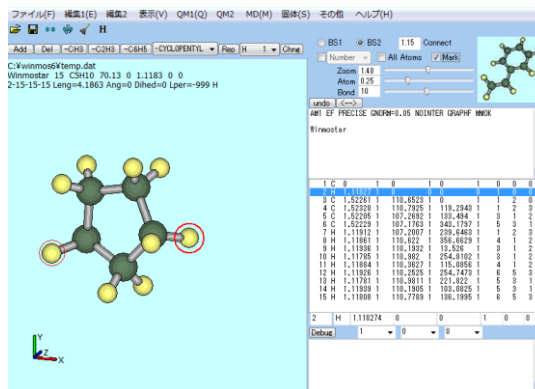
4) OPLS-AA/Lのitpファイル

「溶媒として保存」したNameがaaa.datの場合、Winmostarインストールフォルダ直下のaaa_OPLS.itp

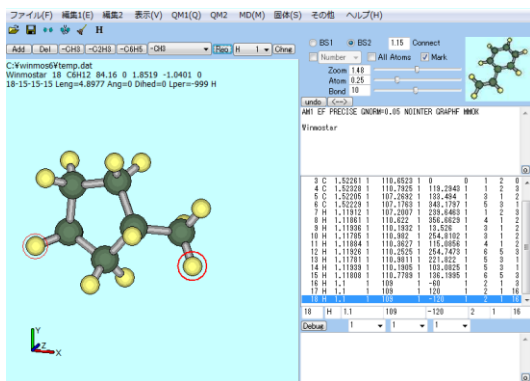
② PCとDMCの作成と登録 Winmostarを使って、PCを作成する



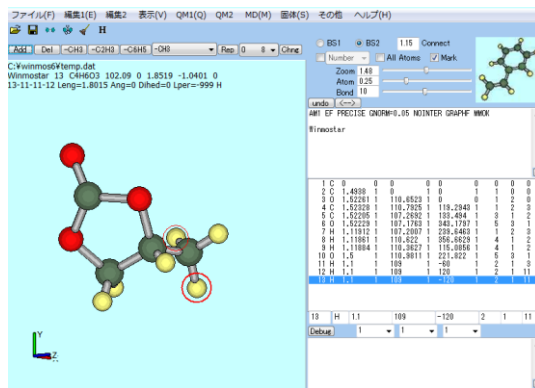
- CYCLOPENTYL
基を導入する



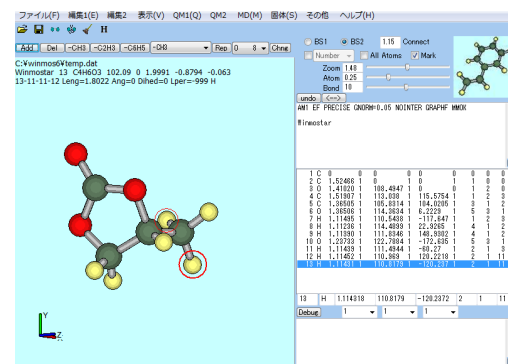
-CH3へ変更



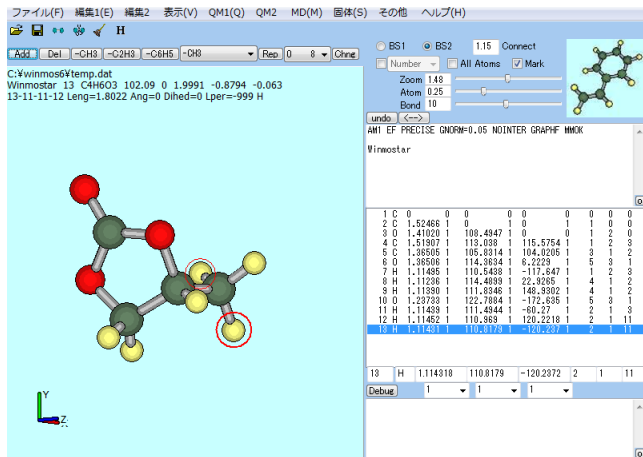
-HやCを適宜に
置き換え、余分
なHを削除する



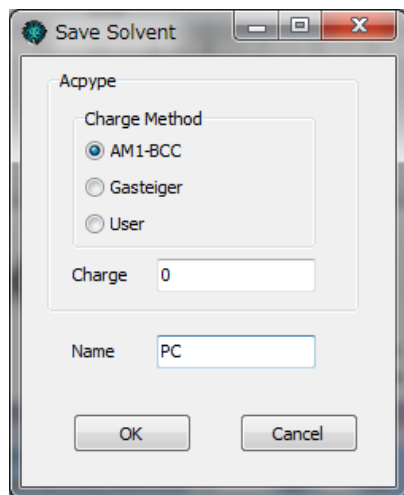
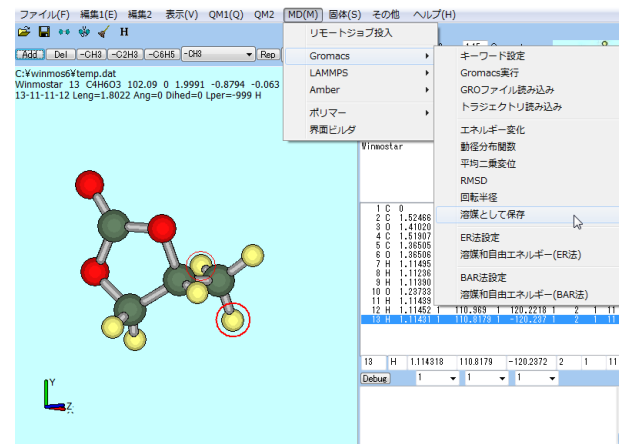
- クリーンをかける



PCを溶媒として保存する



「溶媒として保存」
を選択する



NameにPCと入力し[OK]をクリックする*。

PCが溶媒として登録される。

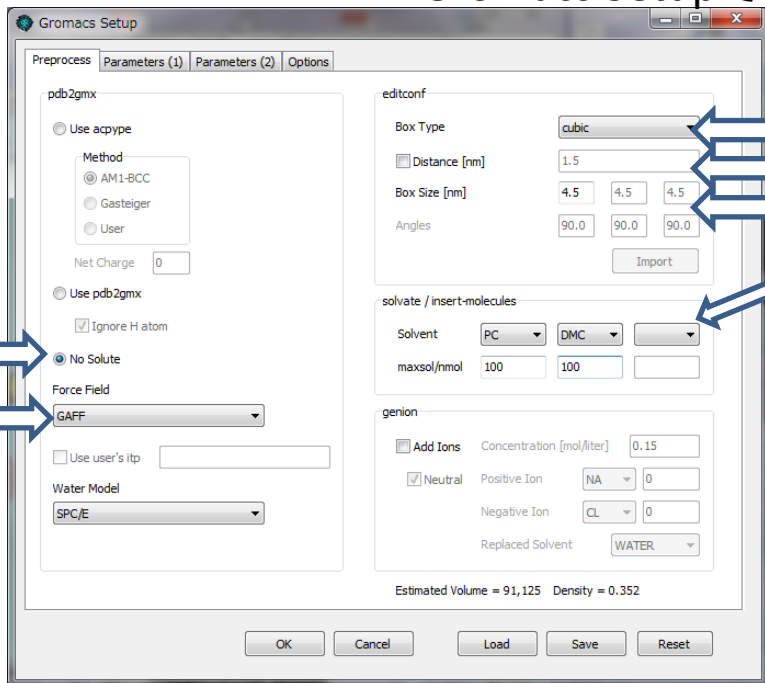
DMCについても同様に溶媒として登録する。

[MD(M)] → [Gromacs] → [キーワード設定] 画面を起動させる

* GaussianなどのMO計算結果から原子電荷が求まっている場合は[Charge Method]で[User]を選択できる。

③ 混合溶媒系の作成とエネルギー極小化計算の実行

Gromacs Setupで計算条件を設定する

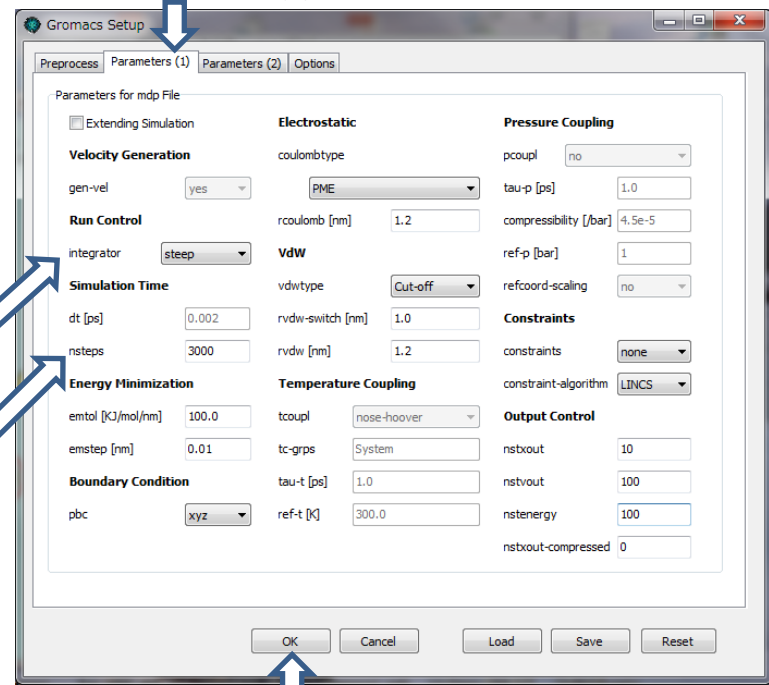


No Soluteに
チェック

GAFFを選択

cubicを選択
Distanceのトグルを外す。
4.5 nmを入力
SolventにPCとDMCを選択し、maxsol/nmol
それぞれ100分子を入力

[Parameters (1)]タブをクリック



steep (最急降下法)
を選択(デフォルト)

3000ステップに変更

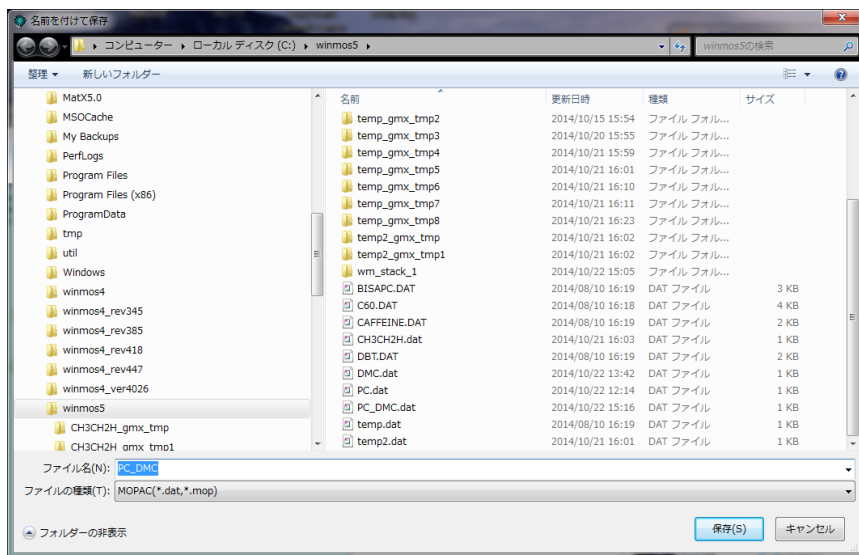
最後に[OK]をクリック

WinmostarからGromacsを起動する

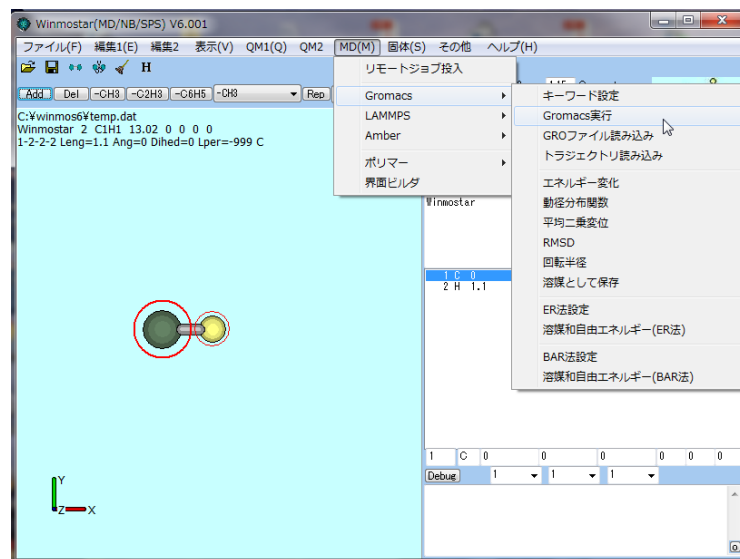
ファイルを保存



Gromacsを起動



ここではファイル名を「PC_DMC」としている。



エネルギー極小化計算終了

エネルギー極小化の結果を確認する 1

PCとDMCが何分子配置されたかを確認する。

PC_DMC.datと同じ階層内の[PC_DMC_gmx_tmp]フォルダ内のgmx_tmp.topをテキストエディタで開く

```
#include "amber03.ff/forcefield.itp"  
#include "/cygdrive/C/winmos5/PC.itp"  
#include "/cygdrive/C/winmos5/DMC.itp"  
;include "gmx_tmp.itp"  
#include "/cygdrive/C/winmos5/DMC.itp"  
#include "/cygdrive/C/winmos5/PC.itp"  
#include "amber03.ff/spce.itp"  
#include "amber03.ff/ions.itp"
```

```
[ system ]  
gmx_tmp
```

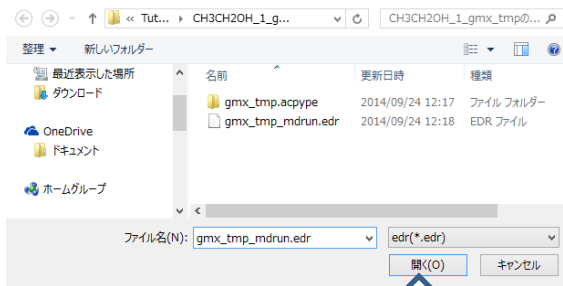
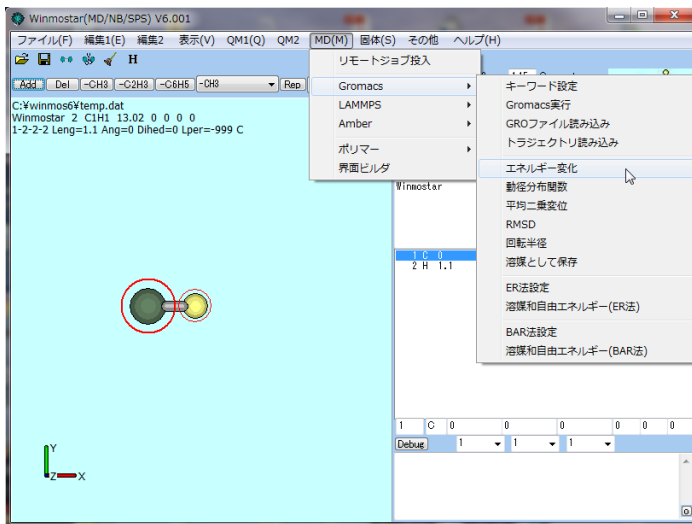
```
[ molecules ]  
; Compound      nmols  
PC 100           }  
DMC 100          }
```

PCとDMCのどちらも100分子配置されている。

* セルサイズに対して設定分子数が多い場合は、実際に配置される分子数が設定数より少なくなることがある。

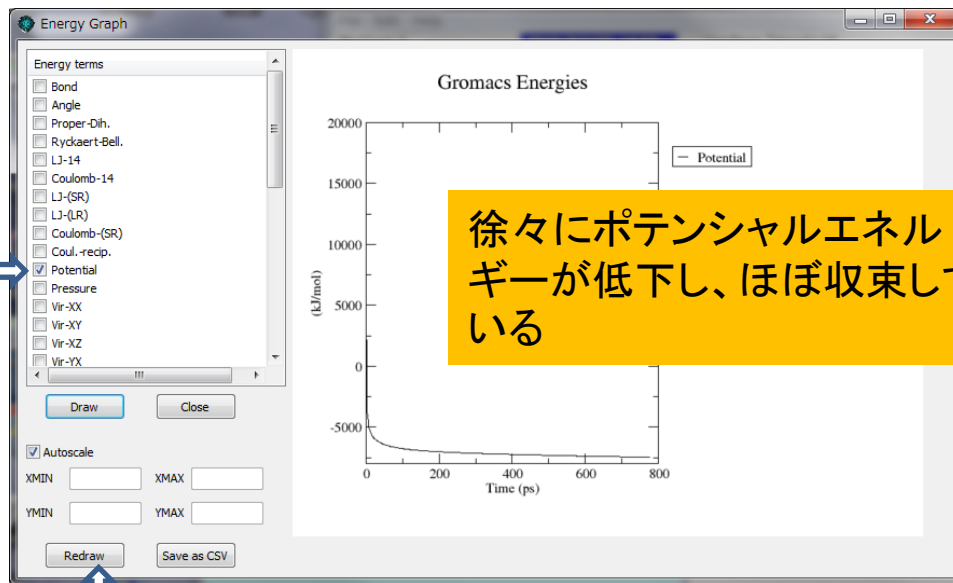
エネルギー極小化の結果を確認する 2

エネルギー変化を選択



[開く]をクリック

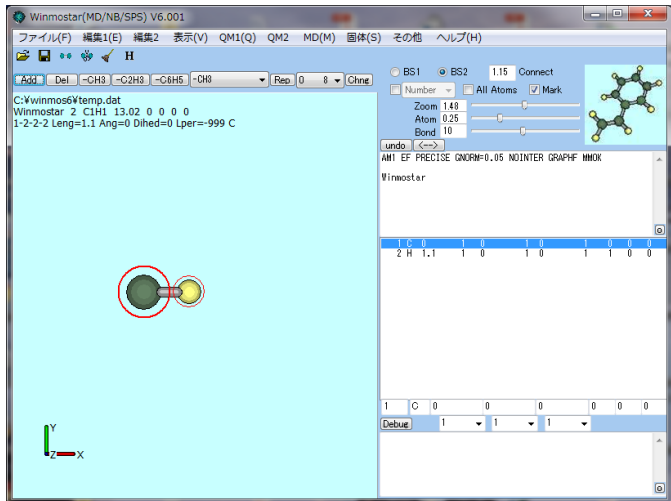
①Potential
にトグルを
立てる



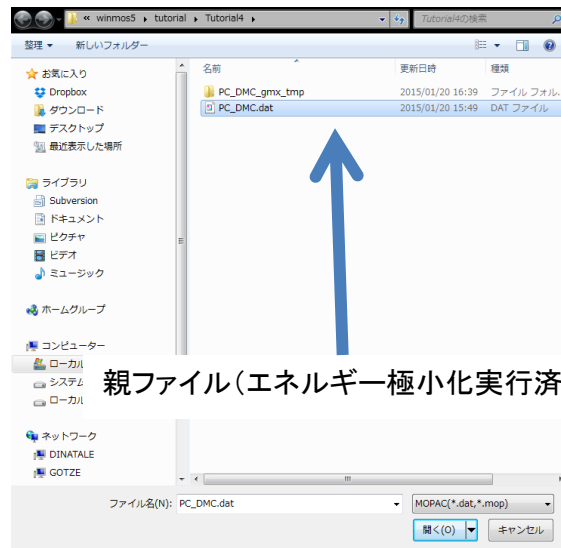
徐々にポテンシャルエネルギーが低下し、ほぼ収束している

②Drawをクリック

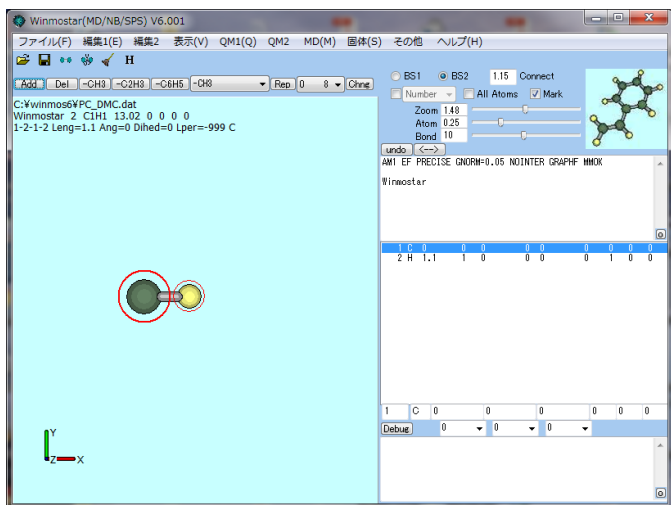
④ 温度一定 (nvt) のMD計算による構造緩和



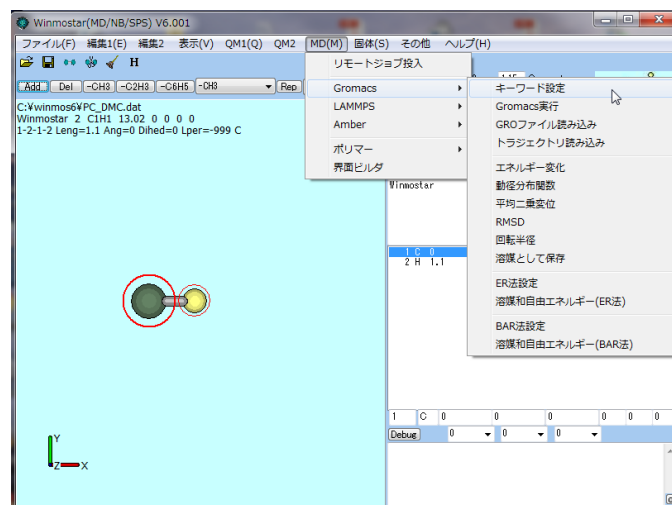
[File] → [開く]



親ファイル(エネルギー極小化実行済)を選択する

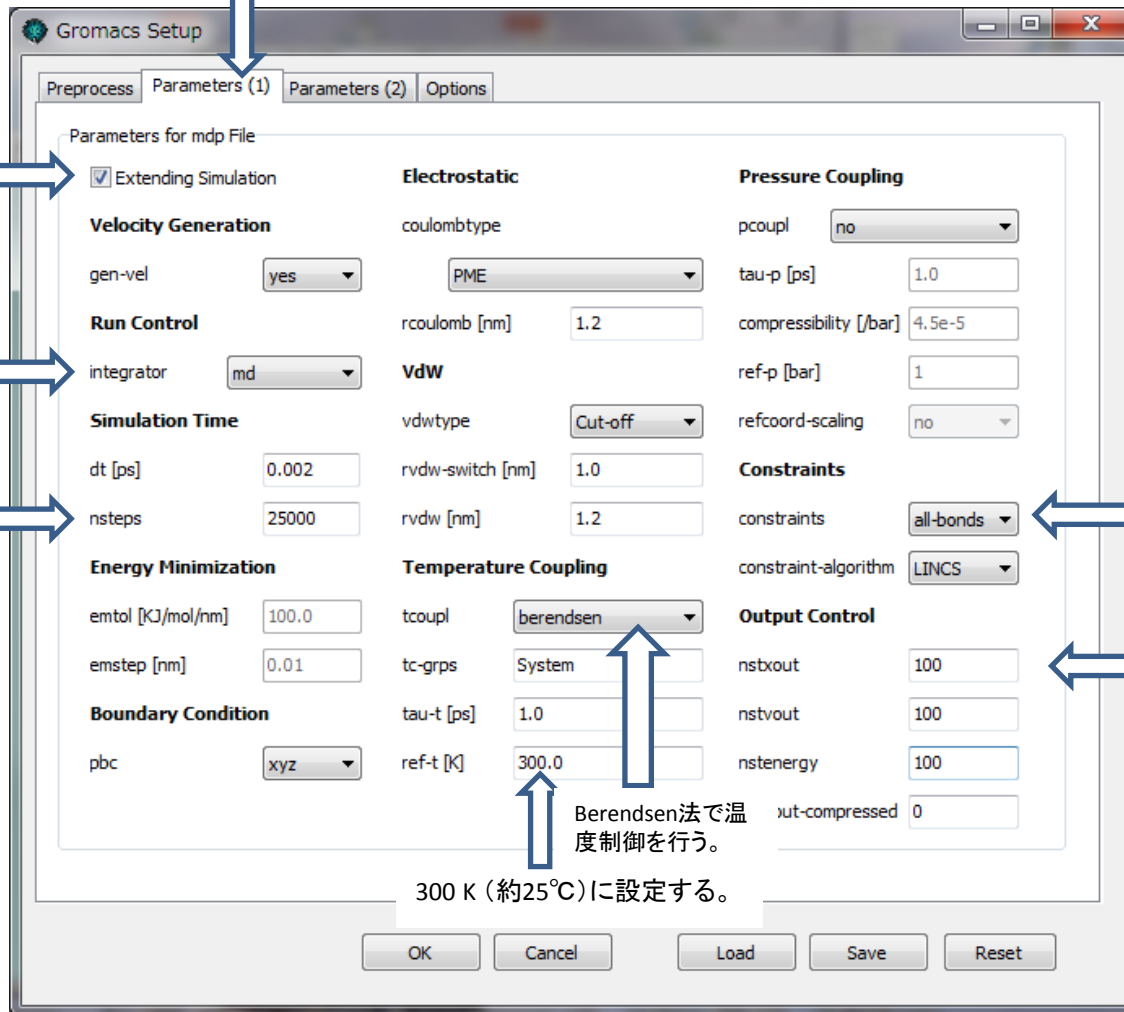


「キーワード設定」
画面起動



Gromacs Setupで計算条件を設定する

最初に[Parameters (1)]タブをクリック



Extending Simulationに
チェックを入れる

integratorをmdに変更

50 ピコ秒 (2 fs * 25000
step) のMD計算を行う。

all bondsに変更
(すべての結合
を拘束する。)

アウトプットを
100ステップ毎
に設定する。

Berendsen法で温
度制御を行う。

300 K (約25°C)に設定する。

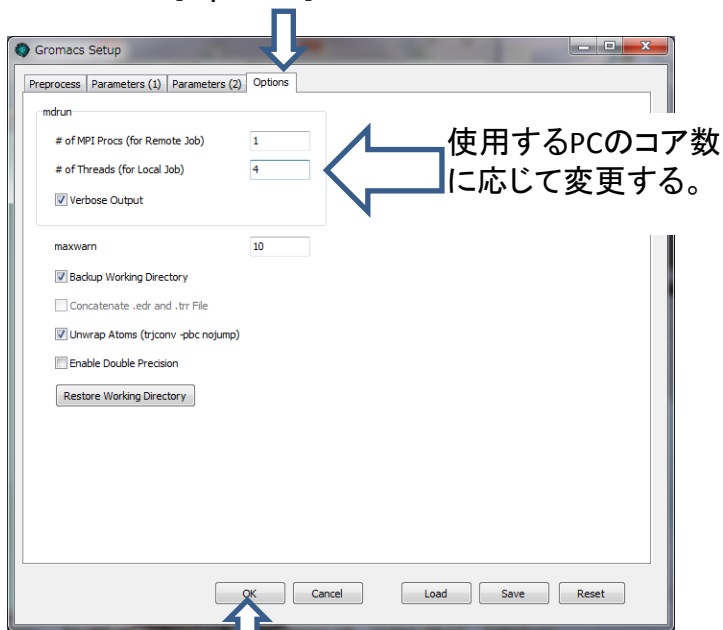
Gromacsの起動

計算実行環境を設定

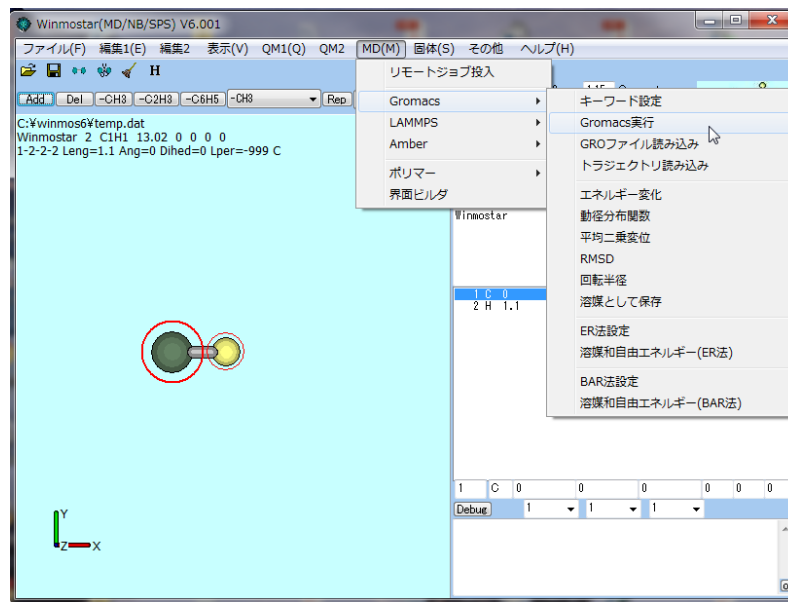


Gromacsを起動

[Options]タブをクリック



[OK]をクリック

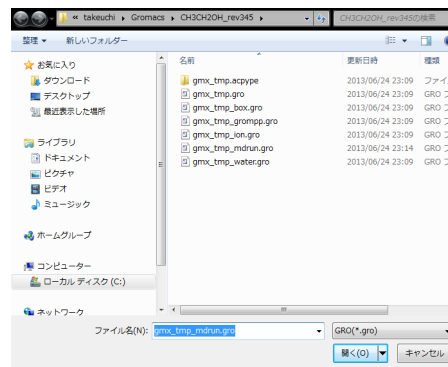
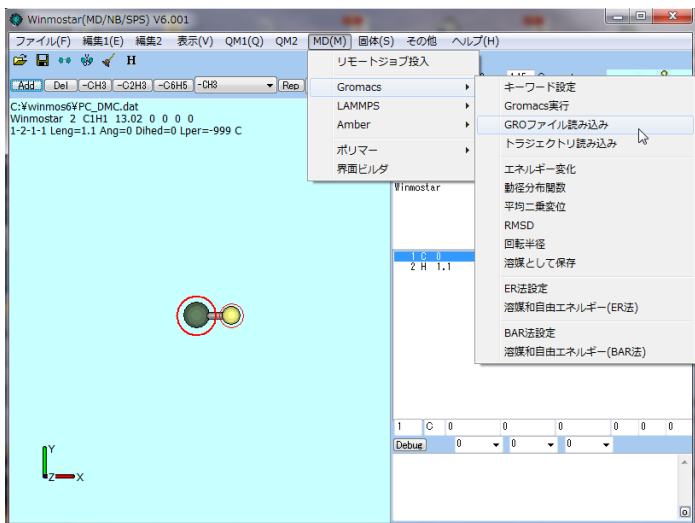


温度一定計算が始まる

計算終了

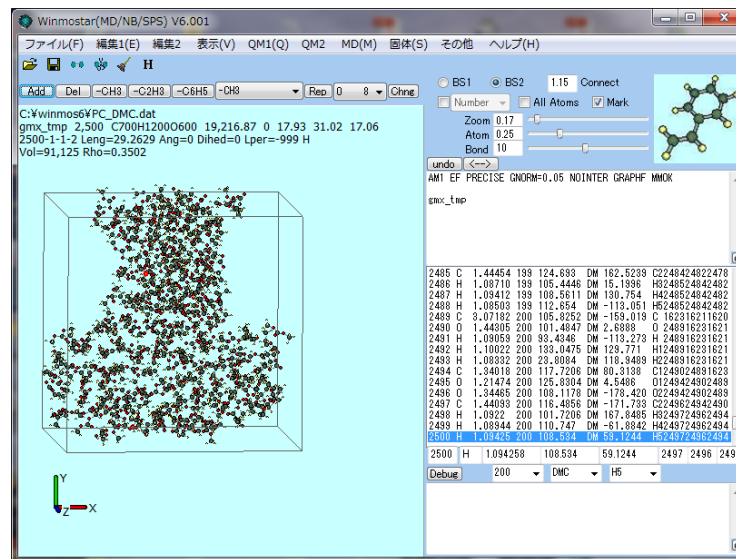
トラジェクトリーを確認する 1

[MD(M)] → [Gromacs] → [GMOファイル読み込み] を起動



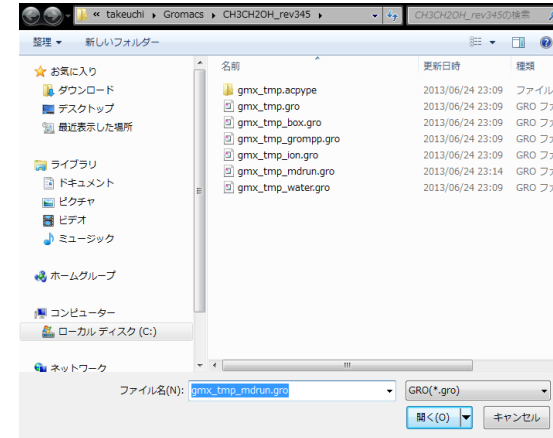
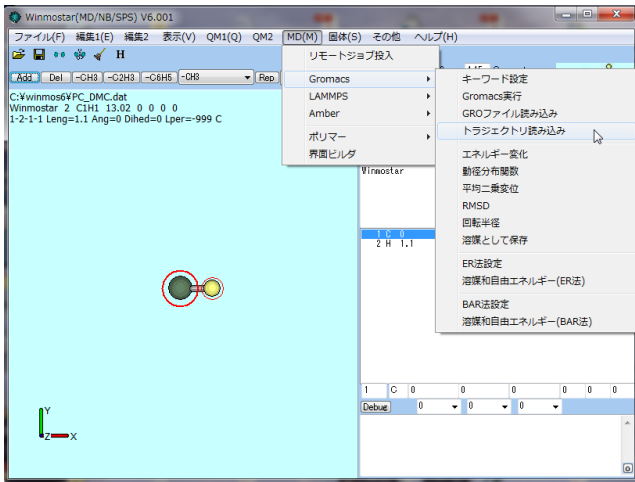
↓
gmx_tmp_mdrun.groを指定

MDの最終ステップ(25000ステップ
=50 ps)の3D構造が表示される

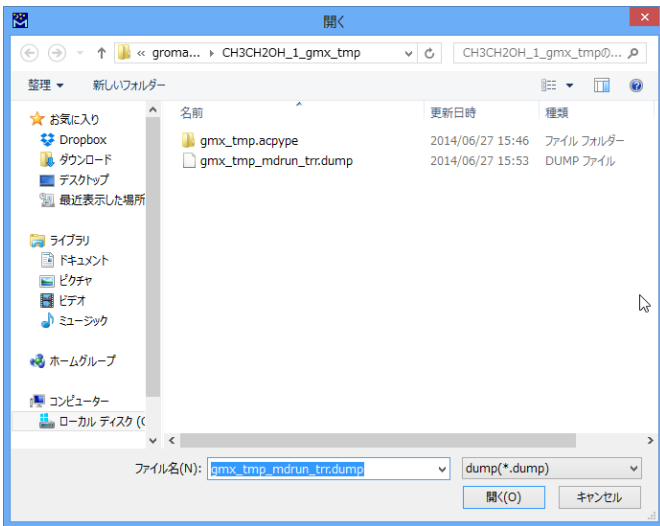


トラジェクトリーを確認する 2

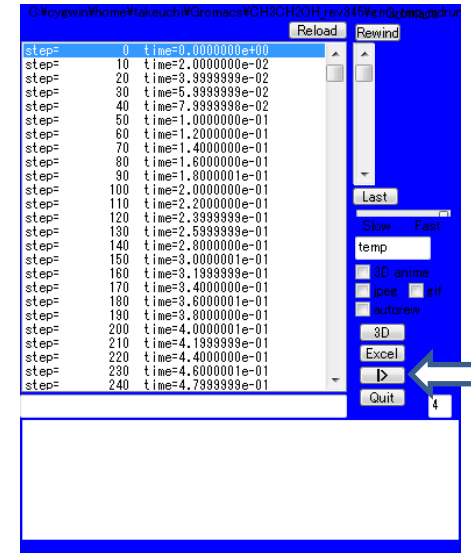
[MD(M)]→ [Gromacs] → [トラジェクトリ読み込み] を起動



gmx_tmp_mdrun.groを指定



gmx_tmp_mdrun_trrを指定



再生ボタンをクリック

トラジェクトリーを確認する 3

BS1に変更すると“動き”が速くなる

The screenshot shows the Winmostar (MD/NB/SPS) V6.001 interface. The main window displays a 3D visualization of a molecular system with a trajectory overlay. The right panel shows the 'Animation' settings, including a frame list and playback controls. A blue arrow points to the 'BS1' radio button in the simulation controls.

Simulation parameters shown in the main window:

```

C:\winmos6\PC_DMC.dat
gmx_tmp 2,500 C700H1200O600 19,216.87 0 18.4397 7.771 43.7401
2500-1-1-1 Leng=31.0485 Ang=0 Dihed=0 Lper=-999 H
Vol=91,125 Rho=0.3502
  
```

Simulation controls:

- BS1 (selected) BS2 1.15 Connect
- Number All Atoms Mark
- Zoom 0.16 Atom 0.25 Bond 10
- undo <-->

Animation panel details:

frame	time
0	0.000000
1	0.200000
2	0.400000
3	0.600000
4	0.800000
5	1.000000
6	1.200000
7	1.400000
8	1.600000
9	1.800000
10	2.000000
11	2.200000
12	2.400000
13	2.593939
14	2.800000
15	3.000000
16	3.200000
17	3.400000
18	3.593939
19	3.800000
20	4.000000
21	4.193939
22	4.400000
23	4.593939
24	4.800000

Atom list (partial):

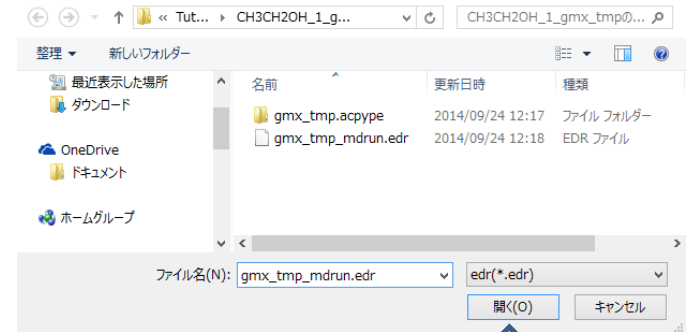
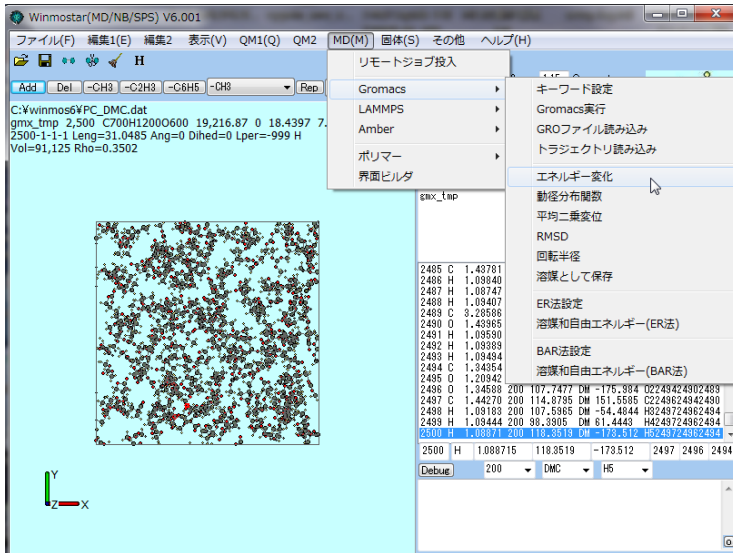
```

2485 C 1.49781 189 114.2739 DM -163.734 C2248424822478
2486 H 1.09840 189 107.8987 DM 63.8956 H3248524842482
2487 H 1.08747 189 107.1745 DM 177.6357 H4248524842482
2488 H 1.09407 189 107.2049 DM -66.9845 H5248524842482
2489 C 3.28586 200 110.8733 DM 146.5242 C 121712131210
2490 O 1.43965 200 68.1882 DM 80.671 O 248912171213
2491 H 1.09590 200 66.3383 DM -133.463 H 248912171213
2492 H 1.09389 200 93.7742 DM -26.6818 H1248912171213
2493 H 1.09494 200 150.7046 DM 147.6646 H2248912171213
2494 C 1.34354 200 124.286 DM 115.9353 C1248024891217
2495 O 1.20942 200 123.5277 DM 3.3838 O1248424802489
2496 O 1.34588 200 107.7477 DM -175.884 O2248424802489
2497 C 1.44270 200 114.8795 DM 151.5535 C2248624842480
2498 H 1.09183 200 107.5965 DM -54.4844 H3248724862484
2499 H 1.08444 200 98.3905 DM 61.4443 H4248724862484
2500 H 1.088715 200 118.3519 DM -173.512 H5248724862484
  
```

アニメーションが始まる。

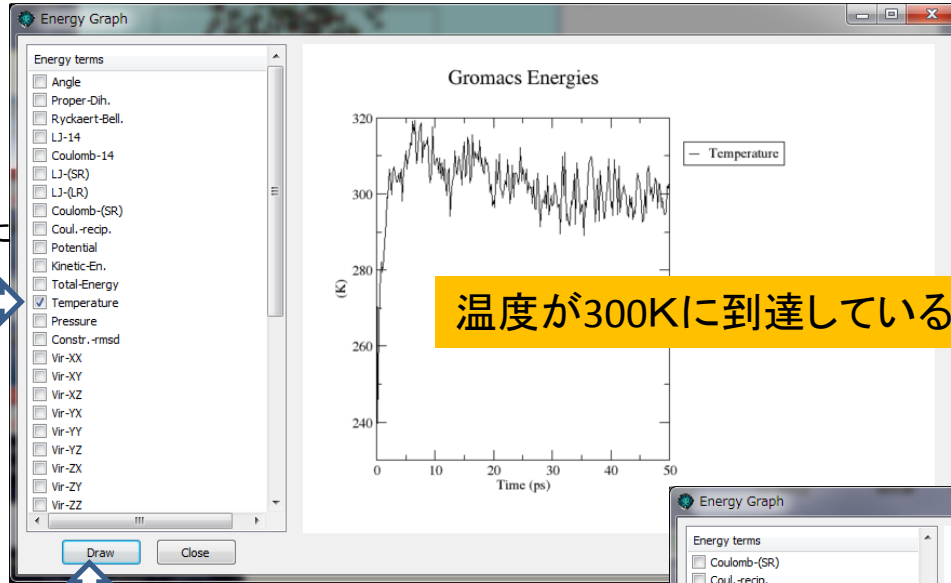
系の温度、エネルギー変化を確認する 1

エネルギー変化を選択



[開く]をクリック

系の温度、エネルギー変化を確認する 2

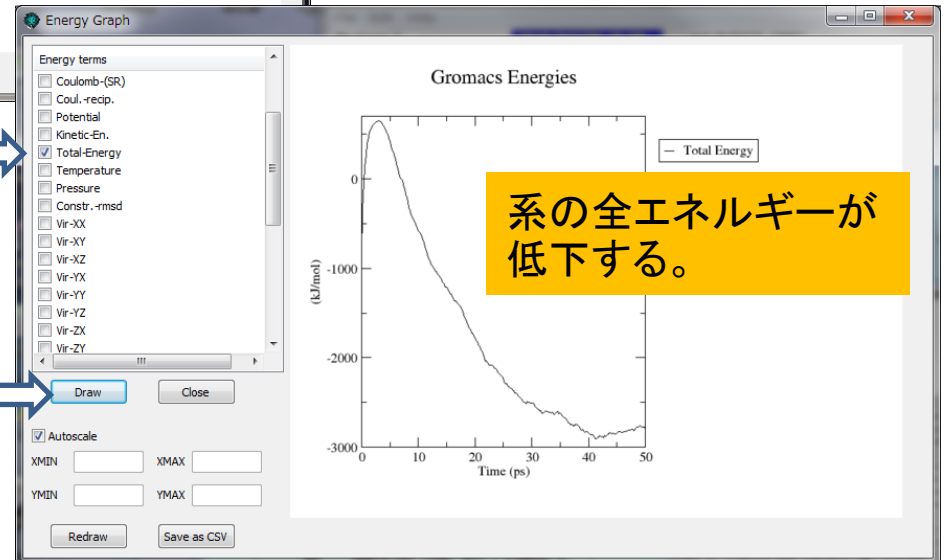


①Temperatureに
トグルを立てる

②Drawをクリック

③Total-Energyに
トグルを立てる

④Drawをクリック



⑤ 温度・圧力一定 (npt) MD計算による凝集化

Gromacs Setupで計算条件を設定する

最初に[Parameters (1)]タブをクリック

vdwの長距離処理をswitching functionに設定する。

Extending Simulationにチェックを入れる

integratorをmdに変更

100ピコ秒 (2 fs * 50000 step) のMD計算を行う。

Parrinello-Rahman法で圧力制御を行う。

200 barで圧縮する。

all bondsに変更(すべての結合を拘束する。)

アウトプットを100ステップ毎に出力させる。

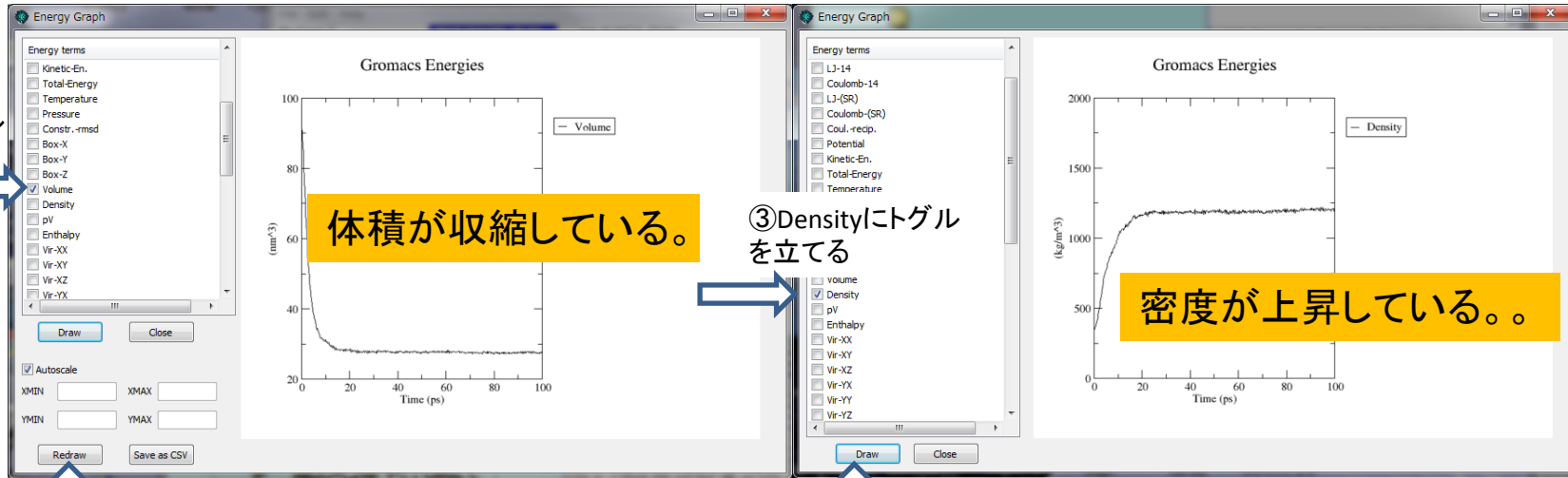
Berendsen法で温度制御を行う。

300 K (約25°C)に設定する。

Parameters for mdp File

- Extending Simulation
- Velocity Generation**
 - gen-vel: yes
- Run Control**
 - integrator: md
- Simulation Time**
 - dt [ps]: 0.002
 - nsteps: 50000
- Energy Minimization**
 - emtol [KJ/mol/nm]: 100.0
 - emstep [nm]: 0.01
- Boundary Condition**
 - tpc: xyz
- Electrostatic**
 - coulombtype: PME
 - rcoulomb [nm]: 1.2
- VdW**
 - vdwtype: Switch
 - rvdw-switch [nm]: 1.0
 - rvdw [nm]: 1.2
- Temperature Coupling**
 - tcoupl: berendsen
 - tc-grps: System
 - tau-t [ps]: 1.0
 - ref-t [K]: 300.0
- Pressure Coupling**
 - tau-p [ps]: 1.0
 - compressibility [bar]: 4.5e-5
 - ref-p [bar]: 200
 - refcoord-scaling: no
- Constraints**
 - constraints: all-bonds
 - constraint-algorithm: LINCS
- Output Control**
 - nstxout: 100
 - nstvout: 100
 - nstenergy: 100
 - nstxout-compressed: 0

系の温度、エネルギー変化を確認する



①Volumeにトグルを立てる



②Drawをクリック



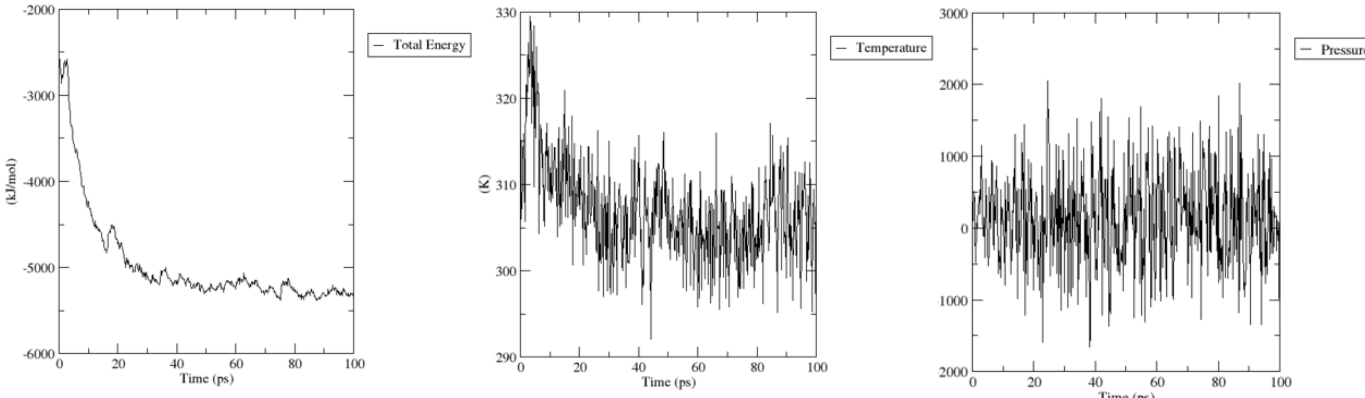
③Densityにトグルを立てる



④Drawをクリック



⑤ Total-Energy や Temperature, Pressure, なども確認する。



⑥ 温度・圧力一定 (npt) MDの本計算

温度 (300K)・圧力 (1気圧) 一定の分子動力学計算を実行する

最初に[Parameters (1)]タブをクリック

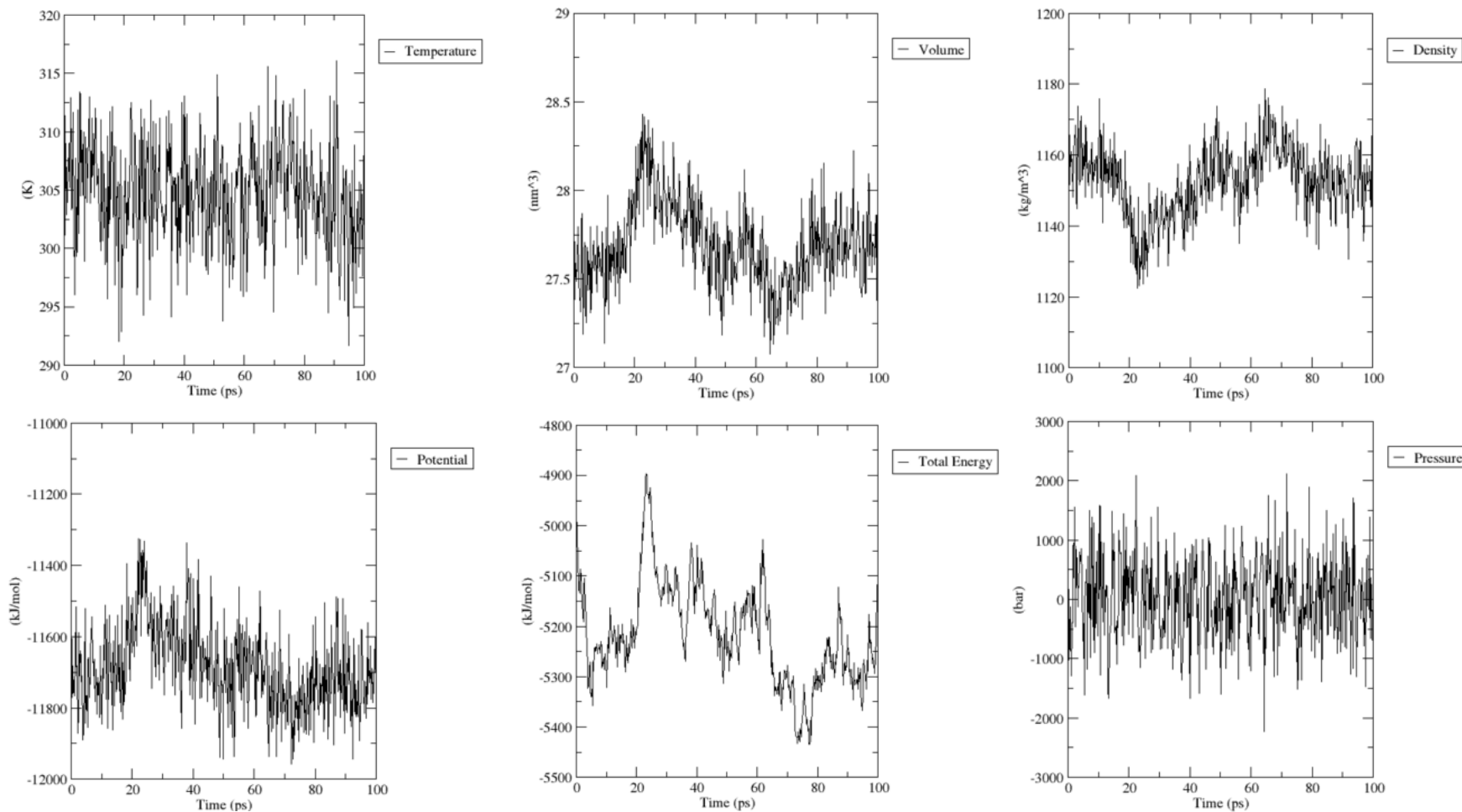
The screenshot shows the Gromacs Setup dialog box with the 'Parameters (1)' tab selected. The settings are as follows:

- Extending Simulation:** Extending Simulation
- Velocity Generation:** gen-vel: yes
- Run Control:** integrator: md
- Simulation Time:** dt [ps]: 0.002, nsteps: 50000
- Energy Minimization:** emtol [KJ/mol/nm]: 100.0, emstep [nm]: 0.01
- Boundary Condition:** pbc: xyz
- Electrostatic:** coulombtype: PME, rcoulomb [nm]: 1.2
- VdW:** vdwttype: Switch, rvdw-switch [nm]: 1.0, rvdw [nm]: 1.2
- Temperature Coupling:** tcoupl: berendsen, tau-t [ps]: 1.0, ref-t [K]: 300.0
- Pressure Coupling:** parrinello-Rahman, tau-p [ps]: 1.0, compressibility [/bar]: 4.5e-5, ref-p [bar]: 1.0
- Constraints:** constraints: all-bonds, constraint-algorithm: LINCS
- Output Control:** nstxout: 100, nstvout: 100, nstenergy: 100, nstxout-compressed: 0

Annotations and instructions:

- Extending Simulationにチェックを入れる (Arrow pointing to the checked box)
- integratorをmdに変更 (Arrow pointing to the 'md' dropdown)
- 100ピコ秒 (2 fs * 50000 step) のMD計算を行う。 (Arrow pointing to the 'nsteps' field)
- 最初に[Parameters (1)]タブをクリック (Arrow pointing to the 'Parameters (1)' tab)
- vdwの長距離処理をswitching functionに設定する。 (Arrow pointing to the 'Switch' dropdown in VdW)
- Parrinello-Rahman法で圧力制御を行う。 (Arrow pointing to the 'parrinello-Rahman' dropdown in Pressure Coupling)
- 1 barに戻す。 (Red box next to the 'ref-p [bar]' field)
- all bondsに変更(すべての結合を拘束する。)
- アウトプットを100ステップ毎に出力させる。 (Arrow pointing to the 'nstxout', 'nstvout', and 'nstenergy' fields)
- Berendsen法で温度制御を行う。 (Arrow pointing to the 'berendsen' dropdown in Temperature Coupling)
- 300 K (約25°C)に設定する。 (Arrow pointing to the 'ref-t [K]' field)

系の温度、エネルギー変化を確認する



トラジェクトリーを確認する

