

# Winmostar- Gromacs Tutorial 6

RESP電荷を用いたモデリング  
V6.015

株式会社クロスアビリティ  
[question@winmostar.com](mailto:question@winmostar.com)

2016/4/20

## 修正履歴

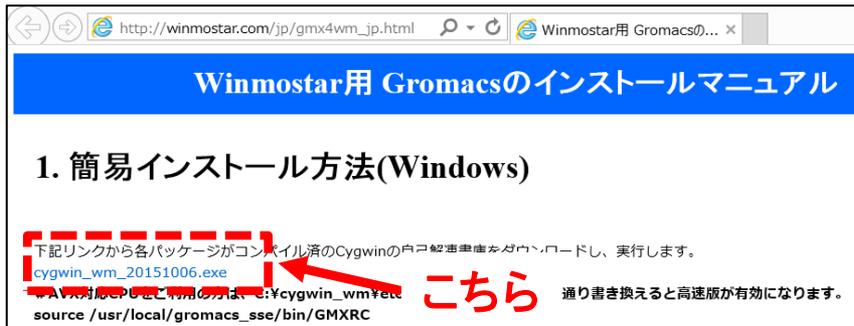
2016/4/20版

- 初版

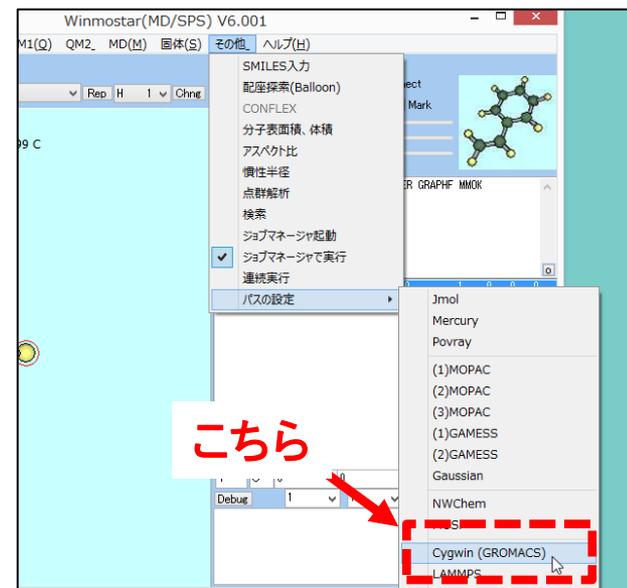
# 0 動作環境設定

Gromacsおよび関連ツールを使うためには、Cygwinのセットアップが必要です。

- [http://winmostar.com/jp/gmx4wm\\_jp.html](http://winmostar.com/jp/gmx4wm_jp.html)の「1. 簡易インストール方法 (Windows)」から、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cygwin\_wmがインストールされますが、C:¥直下以外に置く場合はWinmostarの「その他」>「パスの設定」>「Cygwin (GROMACS)」にてcygwin\_wmの場所を指定して下さい



# 1. メイン画面でのモデリング

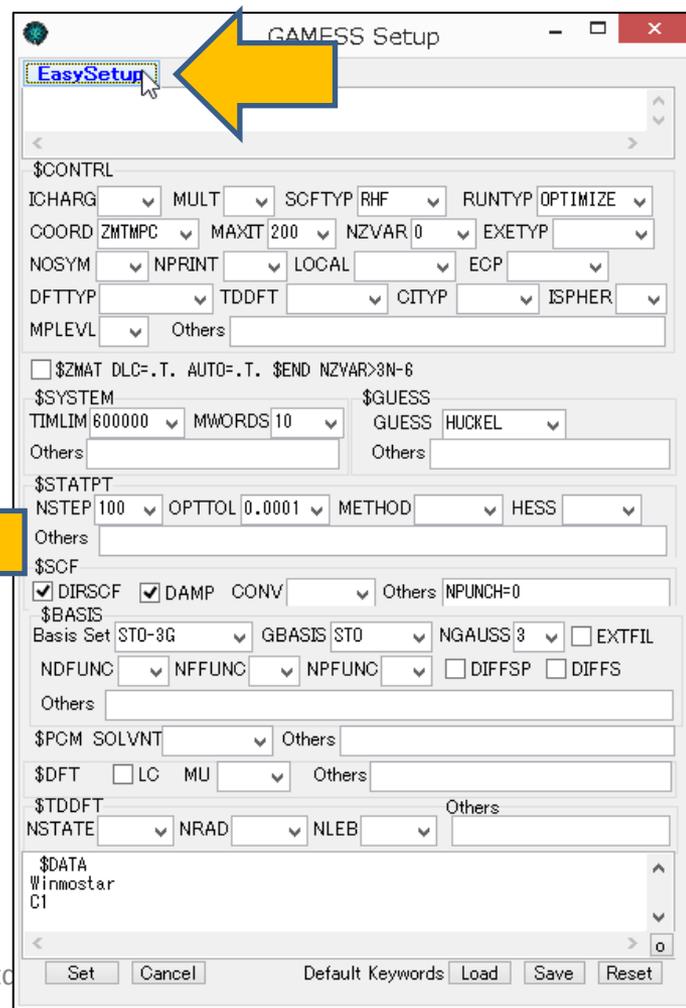
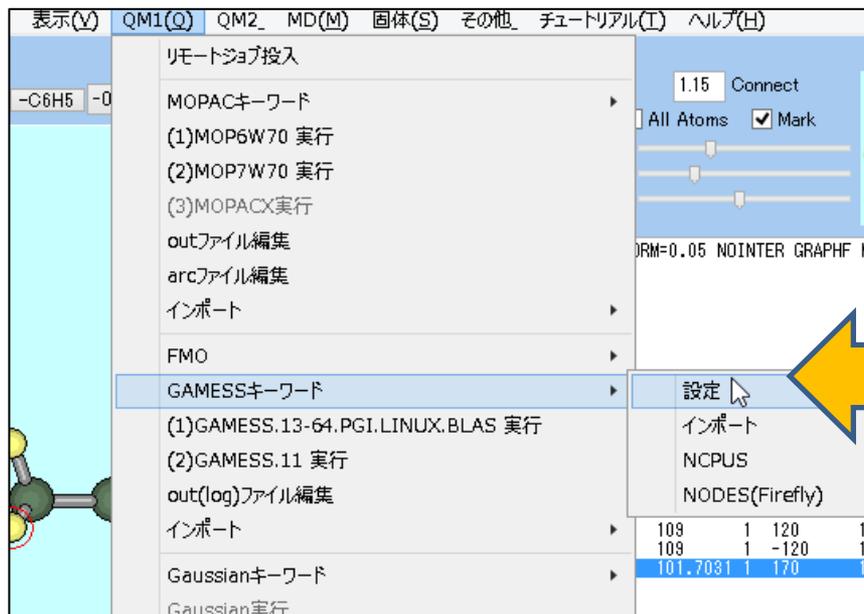
メイン画面においてエタノール分子をモデリングする。

The screenshot shows the X-Ability software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of an ethanol molecule (CH<sub>3</sub>-CH<sub>2</sub>-OH) with a coordinate system (X, Y, Z) at the bottom left. The interface includes a menu bar at the top with options like 'ファイル(F)', '編集1(E)', '編集2', '表示(V)', 'QM1(Q)', 'QM2', 'MD(M)', '固体(S)', 'その他', 'チュートリアル(T)', and 'ヘルプ(H)'. Below the menu bar is a toolbar with icons for file operations and a dropdown menu with options: 'Add', 'Del', '-CH3', '-C2H3', '-C6H5', '-OH', 'Rep', 'H', '1', and 'Chng'. On the right side, there are control panels for 'BS1' and 'BS2' (selected), 'Number', 'All Atoms', 'Mark', 'Zoom', 'Atom', and 'Bond' settings. A small 3D model of the ethanol molecule is shown in the top right corner. Below these controls is a text area containing 'AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF MMOK' and 'Winmostar'. At the bottom right, there is a table with 9 rows and 8 columns, showing atom data for the ethanol molecule.

1	C	0	1	0	1	0	0	0
2	C	1.4938	1	0	1	0	1	1
3	H	1.1	1	109	1	0	1	1
4	H	1.1	1	109	1	120	1	1
5	H	1.1	1	109	1	-120	1	1
6	H	1.1	1	109	1	-60	1	2
7	H	1.1	1	109	1	120	1	2
8	O	1.455	1	109	1	-120	1	2
9	H	0.96	1	101.7031	1	170	1	8

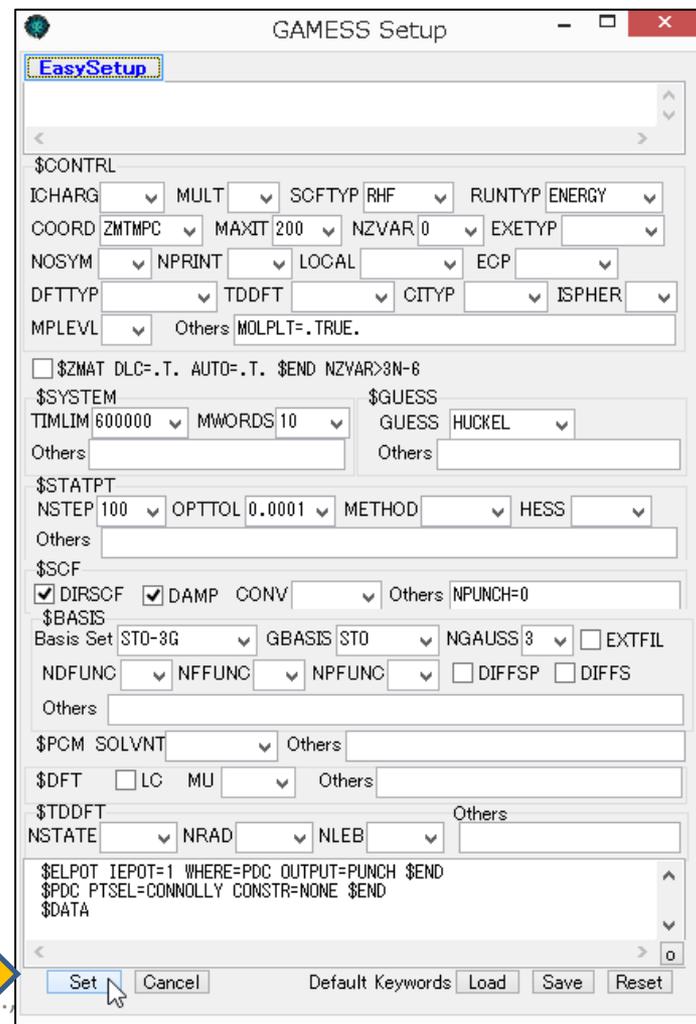
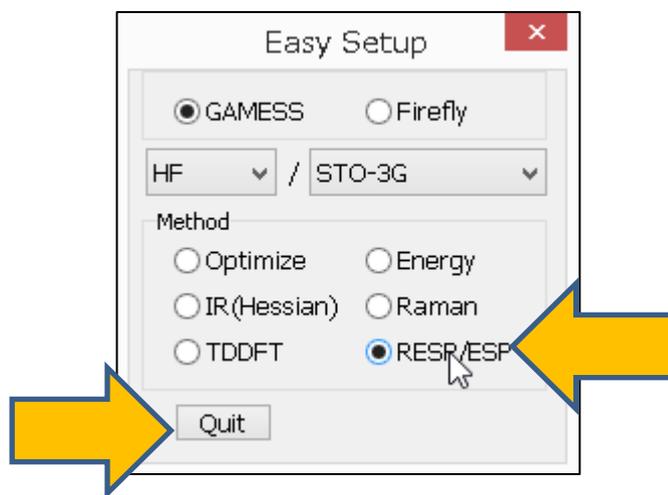
## II. GAMESS計算

「QM1 > GAMESSキーワード > 設定」から「Easy Setup」を選択する。



## II. GAMESS計算

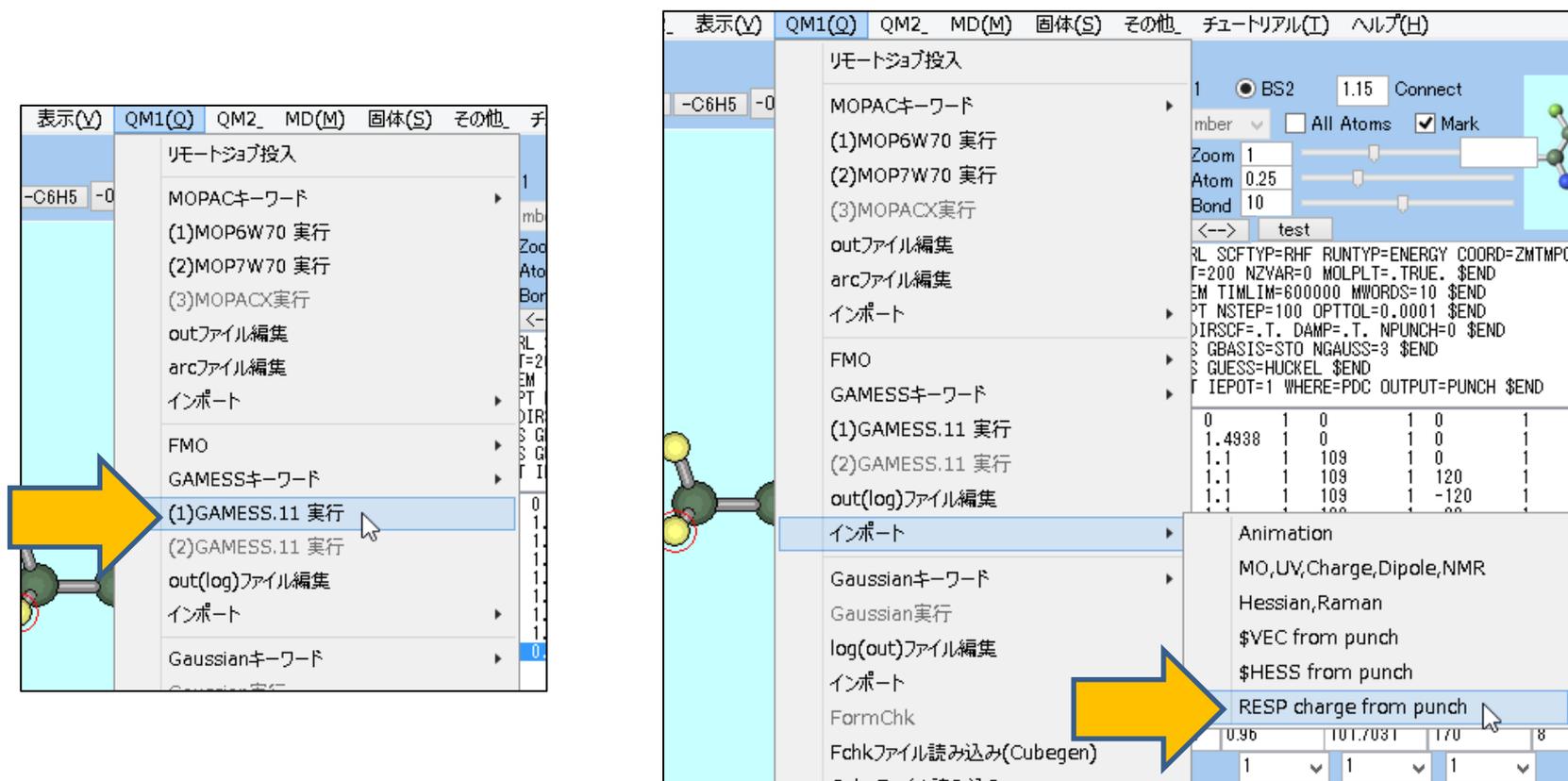
「Easy Setup」において「RESP/ESP」にチェックを入れ「Quit」し、「GAMESS Setup」において「Set」する。



## II. GAMESS計算

「QM1>GAMESS実行」を選択し、ジョブ終了後、「QM1>インポート>RESP Charge from punch」を選択する。

デフォルトで直前に得られたpunchファイルが選択されるため、そのまま開く。



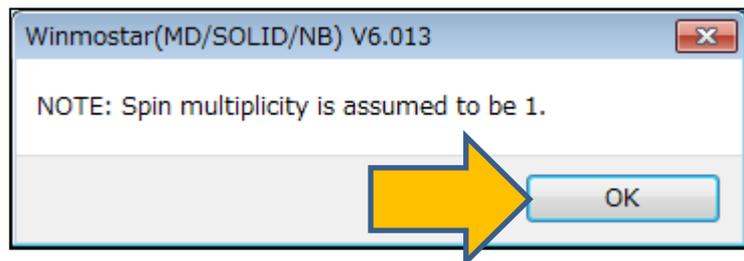
The screenshot shows the X-Ability software interface with the following menu structure:

- 表示(Y) QM1(Q) QM2\_ MD(M) 固体(S) その他\_ チューリアル(T) ヘルプ(H)
- リモートジョブ投入
- MOPACキーワード
  - (1)MOP6W70 実行
  - (2)MOP7W70 実行
  - (3)MOPACX実行
- outファイル編集
- arcファイル編集
- インポート
  - FMO
  - GAMESSキーワード
    - (1)GAMESS.11 実行
    - (2)GAMESS.11 実行
  - out(log)ファイル編集
  - インポート
    - Animation
    - MO,UV,Charge,Dipole,NMR
    - Hessian,Raman
    - \$VEC from punch
    - \$HESS from punch
    - RESP charge from punch
- Gaussianキーワード
  - Gaussian実行
  - log(out)ファイル編集
  - インポート
  - FormChk
  - Fchkファイル読み込み(Cubegen)

The interface also displays a molecular model of a benzene ring (C6H6) and a control panel with parameters such as Zoom (1), Atom (0.25), Bond (10), and a list of GAMESS keywords like SCFTYP, RUNTYP, COORD, etc.

## II. GAMESS計算

左図のようにスピン多重度を1としてRESP電荷が計算されることが確認される。「OK」として処理を進めると、メイン画面上にRESP電荷が表示される。



ファイル(F) 編集1(E) 編集2 表示(V) QM1(Q) QM2 MD(M) 固体(S) その他 チュートリアル(T) ヘルプ(H)

Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -OH Rep H 1 Chng

BS1 BS2 1.15 Connect

User Ch All Atoms Mark

Zoom 1 Atom 0.25 Bond 10

undo <-> test

```

$CONTROL SCFTYP=RHF RUNTYP=ENERGY COORD=ZMTMPC
  MAXIT=200 NZVAR=0 MOLPLT=TRUE $END
$SYSTEM TIMLIM=600000 NIWORDS=10 $END
$STATPT NSTEP=100 OPTTOL=0.0001 $END
$SCF DIRSCF=.T. DAMP=.T. NPUNCH=0 $END
$BASIS GBASIS=STD NGAUSS=3 $END
$GUESS GUESS=HUCKEL $END
$ECPOT IEPOT=1 WHERE=PDC OUTPUT=PUNCH $END
  
```

1	C	0	1	0	1	0	1	0	0	0
2	C	1.49386	1	0	1	0	1	1	0	0
3	H	1.10004	1	108.9334	1	0	1	1	2	0
4	H	1.09984	1	108.952	1	119.9992	1	1	2	3
5	H	1.09947	1	109.0118	1	-120.002	1	1	2	3
6	H	1.09948	1	109.0575	1	-60.0242	1	2	1	3
7	H	1.09985	1	108.9378	1	60.027	1	2	1	3
8	O	1.45526	1	108.979	1	179.9717	1	2	1	3
9	H	0.96037	1	101.6593	1	170	1	6	2	1

9 H 0.960578 101.6593 170 8 2 1

Debug 1 1 1

RESP charges: 0.0366, -0.0048, 0.201, 0.2724, -0.124, 0.4483, 0.0360

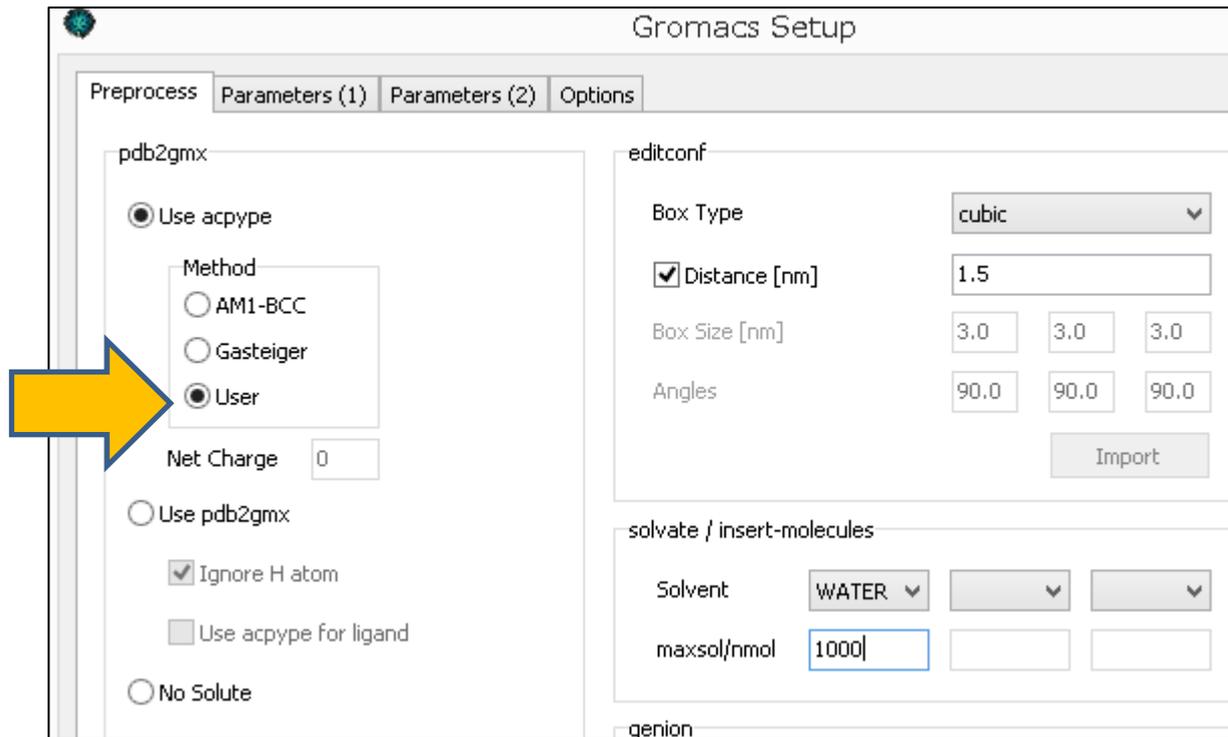
### III. Gromacs計算

Gromacsの設定のため、「MD>Gromacs>キーワード設定」を選択する。



### III. Gromacs計算

「Preprocess」タブにおいて「Use acpype」を選択し、「User」電荷を選択する。  
これにより、メイン画面上の電荷が力場作成に反映される。  
その他の設定は、通常のGromacsの設定方法に準ずる。



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

アカウント登録 ログイン

**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\\_aui\\_detailpage\\_o00\\_s00...](http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_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

👍 いいね!