M winmostar チュートリアル

Gromacs 溶解度/x/DPDパラメータの算出

V11.13.0

2025年 7月 1日 株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.



- 本書はWinmostar V11の使用例を示すチュートリアルです。
- 初めてWinmostar V11をお使いになる方はビギナーズマニュアルを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。
- 本書の内容の実習を希望される方は、講習会を受講ください。
 - Winmostar導入講習会:基礎編チュートリアルの操作方法のみ紹介します。
 - <u>Winmostar基礎講習会</u>:理論的な背景、結果の解釈の解説、基礎編チュートリアルの操作方法、基礎編以外のチュートリアルの一部の操作方法を紹介します。
 - 個別講習会:ご希望に応じて講習内容を自由にカスタマイズして頂けます。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず<u>よくある質問</u>を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の 再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。
- 本書の著作権は株式会社クロスアビリティが有します。株式会社クロスアビリティの許諾な く、いかなる形態での内容のコピー、複製を禁じます。



 本チュートリアルでは、ベンゼン(成分A)と水(成分B)それぞれの凝集エネルギー、 Hildebrand溶解度パラメータおよび、水・ベンゼン間のχパラメータ、DPDのA_{ij}パラメータを 算出します。



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。
- "本計算"のステップ数が大きいほど、再現性が良く、信頼性の高い結果を取得することができます。
- 力場の種類、相互作用の計算条件も計算結果に大きく影響を与えます。
- 剛体モデルの水を用いるため本来なら水の気相の計算は不要ですが、現在のWinmostar™の仕 様上エネルギーファイルが必要なため計算を実施します。

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。
- <u>https://winmostar.com/jp/installation/</u>インストール方法のCygwinの設定手順に従い セットアップします。

(6) 以下のいずれかのリンク先の手順でWinmostar用のCygwin環境 (cygwin_wmと呼びます)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) ← こちら

<u>cygwin wmをビルドする場合</u>(非推奨、上級者向け) Cygwinの代わりにWindows Sub*s*ystem for Linuxを用いる場合(ベータ版)

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。

チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)	; プログラムパス		L	^
🞰 🛱 🕶 📑 (ラベル/電荷を隠す) ∨	 5¥jmol.bat	GAMESS(1): GAMESS(2):	C:¥Users¥Public¥gamess-64¥games C:¥ff820_windows¥Firefly820.exe	
Replace 🔮 🍝 🗊 🚳 😍 🍄 😫 🛱	Files¥CCDC¥Mercury 1	こちら NWChem:	C:¥G16W¥g16.exe C:¥nwchem¥bin¥nwchem.exe	
255	Files¥OpenSCAD¥open:	Cygwin:	C:¥cygwin_wm	

Winmostar V11の動作モード

V11にはプロジェクトモードとファイルモードの2つの動作モードが用意されています。 本書ではプロジェクトモードでの操作方法を解説します。 ファイルモードの操作方法はV10のチュートリアルを参照してください。

Winmostar (PREMIUM) V11.0.1

ファイル(E) 編集(E) 選択(L) 表示(V) QM MD 固体(S) アドオン(A) ツール(D チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルプ(H)



I. 系のモデリング(成分A液相)

基本的な操作方法はGromacs基礎編チュートリアルを参照してください。

- 1. ファイル | 新規プロジェクトをクリックし、プロジェクト名に「solub_param」と入力して 保存をクリックします。
- 2. フラグメントで「-C6H5」を選択しReplaceをクリックしベンゼンを作成します。
- 3. 🧬 自動で電荷を割り当てをクリックしOKをクリックします。



I. 系のモデリング(成分A液相)

- 1.
 御 溶媒を配置/セルを構築をクリックします。
- 2. Add Displayed Moleculeをクリックし「150」と入力しOKをクリックします。
- 3. Buildをクリックします。



II. 計算の実行(成分A液相)

- 1. ソルバからGromacsを選択し、 [M] (ワークフロー設定)を開きます。
- 2. OKをクリックし、「力場が設定されました」と表示されたらOKをクリックします。
- 3. 2nd jobのSimulation timeを「50」に変更します。
- 4. 適宜Simulation time, Temperature, Pressureを変更します。(本書では変更不要)
- 5. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は**1st job**から**3rd job**まですべての **Precision**を「Low」に変更します。
- 6. # of jobsの+を1回クリックします。
- 7. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。

			Enable scan	calculation Co
1st job				
Ensemble Minimize	✓ Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.
Simulation time [ps] 10.	# of snapshots	50	Initial velocity	From parent
Free boudnary condition	Precision	Medium ~	De	etails
2nd job				
Ensemble NVT	- <u>-</u>		Pressure [atm]	1.
Simulation time [ps] 50			Initial velocity	Random v
Free boudnary condition	Ph	~	De	tails
a lui				
ard job	Townships M	200	Deserve [stal	1
ensemble NP1	 Temperature [K] 	300.	Pressure (aun)	
Simulation time [ps] 50	# of snapshots	50	Initial velocity	From parent V
Free boudnary condition	Precision	Medium ~	De	etails
4th job				
Ensemble NPT	✓ Temperature [K]	300.	Pressure [atm]	1.
Simulation time [ps] 50	# of snapshots	50	Initial velocity	From parent
			-	

III.系のモデリング(成分A気相)

- 1. **ウ ファイルをインポート**をクリックしP. 6で保存したbenzene_am1bcc.mo12を選択します。
- 2. ファイルをインポートダイアログで破棄して読み込みをクリックします。



IV.計算の実行(成分A気相)

- 1. **(ワークフロー設定**)を開きます。
- 2. 「継続ジョブを実行しますか?」と表示されたらいいえをクリックします。
- 3. 「分子とセル境界の間の距離を入力」と表示されたら**OK**をクリックします。
- 4. 力場を割り当てウィンドウでOKをクリックし、「力場が設定されました」と表示されたらOK をクリックします。
- 5. Presetを「Isolated system NVT Equilibration」に変更します。
- 6. 適宜Simulation time, Temperature, Pressureを変更します。(本書では変更不要)
- 7. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は**1st job**と**2nd job**の**Precision**を「Low」に変更します。
- 8. # of jobsの+を1回クリックします。
- 9. 3rd jobのInitial velocityを「From Parent」に変更します。

10.0Kをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。

• 成分Aの溶解度パラメータのみ必要なときは「IX.結果解析」に進みます。

V. 系のモデリング(成分B液相)

- 1.

 御 溶媒を配置/セルを構築をクリックします。
- 2. Add Waterをクリックし「900」と入力しOKをクリックします。
- **3. Set Density**に「**0.9**」と入力し、**Build**をクリックします。



VI.計算の実行(成分B液相)

- 1. **(ワークフロー設定**)を開きます。
- 2. 「継続ジョブを実行しますか?」と表示されたらいいえをクリックします。
- 3. OKをクリックし、「力場が設定されました」と表示されたらOKをクリックします。
- 4. Presetを「Fluid/Amorphous NPT Equilibration」に変更します。
- 5. 2nd jobのSimulation timeを「50」に変更します。
- 6. 適宜Simulation time, Temperature, Pressureを変更します。(本書では変更不要)
- 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は1st jobから3rd jobまですべての Precisionを「Low」に変更します。
- 8. # of jobsの+を1回クリックします。
- 9. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。

VII.系のモデリング(成分B気相)

- 1. **図 溶媒を配置/セルを構築**をクリックします。
- 2. Add Waterをクリックし「1」と入力しOKをクリックします。
- **3. Set Density**に「**0.001**」と入力し、**Build**をクリックします。

Solvate/Build Cell			_			Marked Order Marked Atom: Length= 23.64	:= 10.02 ? 0 - 1 - 0 - 0 X = 0 Y= 0 Z= 0 14348 Angle= * Dihedral= * Lper= *
Name #	Mol P	osition	mol/L ~ Cor	nposition		[
WATER 1	R	andom	0.056 H2	0			
					_		
					-		
					-		
Add Displayed Molecule	. Add	d File (mol2	2,wmm,etc.)	lete			
Add SMILES		Add Wat	ter				
Simulation Cell Option							
Sat Dansity	[0.001		alm A2			
Set Density	l	0.001		g/un-s v			
Set Margin from Solute	[nm]						
O Set Lattice Constants [r	[nm]	3.1043 3	3.1043 3.1043				
Angles	s [deg]	90.0 9	90.0				
	L						
		Same a	s main window				
		Change on	ly one direction				
Box Type	[cubic		1			
Total Number of Atoms: 3	3					Ŷ	Ĩ
						t l	Charges Available: User (Otot=0.00 Orms= 0.599)
Reset		Γ	Build			₩→	X rho= 0.001000 g/cm^3 a= 31.042820 b= 31.042820 c= 31.042820
							alpha= 90.00000 beta= 90.00000 gamma= 90.00000

VIII.計算の実行(成分B気相)

- 1. **(ワークフロー設定**)を開きます。
- 2. 「継続ジョブを実行しますか?」と表示されたらいいえをクリックします。
- 3. 力場を割り当てウィンドウでOKをクリックし、「力場が設定されました」と表示されたらOK をクリックします。
- 4. Presetを「Isolated system NVT Equilibration」に変更します。
- 5. 適宜Simulation time, Temperature, Pressureを変更します。(本書では変更不要)
- 6. 計算精度を落として計算を早く終了させたい場合は**1st job**と**2nd job**の**Precision**を「Low」に変更します。
- **7. # of jobs**の+を1回クリックします。
- 8. 3rd jobのInitial velocityを「From Parent」に変更します。
- 9. OKをクリックし、ジョブの設定ウィンドウで適宜設定した後実行をクリックします。

- 2. Liquid Phaseのedr FileのSelectをクリックし、 work4 GMX NPT以下のgmx mdrun.edrを選択します。
- 3. Liquid Phaseのgro FileのSelectをクリックし、 work4_GMX_NPT以下のgmx_mdrun.groを選択します。
- 4. Vapor Phaseのedr FileのSelectをクリックし、 work7_GMX_NVT以下のgmx_mdrun.edrを選択します。

•	/電荷を隠す) 🗸						
	最終構造を読み込み (gro)(G)						
	動径分布関数(Q) 自己拡散係数/平均二乗変位(S)	🚾 Chi/Solubil	ity Param	eters	-		×
	散乱闄数(T)	Molecule A M	olecule B	Chi / Aij			
	速度相関/振動スペクトル(U)	Liquid Dhage	ode Eilo	(not colorted)		Colort	
	比誘電率(V)	Liquid Phase	eur File	(not selected)		Select	
	粘度(W)		gro File	(not selected)		Select	
	密度分布(X)						
	自由体積(Y)	Vapor Phase	edr File	(not selected)		Select	
	Hildebrand溶解度パラメータ(H)						
	χ/DPDパラメータ(D)						
	RMSD						

- Molecule A (ここではベンゼン)のHildebrand溶解度パラメータδおよび、
 Molecule A同士のDPDパラメータA_{ii}は以下の場所に出力されます。(文献値等と比較の際に
 - は、単位に注意)

Chi/Solubility Parameters		_		X
Molecule A Molecule B Chi / Aij				
Liquid Phase edr File solub_pa	ram.wmpjdata¥work4_GMX	_NPT¥gmx_mdrun.edr	Select	
gro File solub_pa	ram.wmpjdata¥work4_GMX	_NPT¥gmx_mdrun.gro	Select	
Vapor Phase edr File solub_pa	ram.wmpjdata¥work7_GMX	_NVT¥gmx_mdrun.edr	Select	
Properties				
Molar Volume	Vma	[m^3/mol]	0.000107125	
Temperature	т	[K]	300.003	
Isothermal Compressibility	Kt	[J/m^3]	6.58072e-09	
Dimensionless Compressibility	K=Vma/(R*T*Kt)	[-]	6.52616	Λ
DPD Parameter	Aii=(K-1)/(0.2*rho)	[-]	5.47144	
Liquid Potential Energy	E	[kJ/mol]	30.4854	V
Vapor Potential Energy	Ev	[kJ/mol]	54.1817	À
Cohesive Energy	dE=Ev-El	[kJ/mol]	23.69630	
Solubility Parameter	da=sqrt(dE/Vma)	[(J/cm^3)^1/2]	14.87287	\mathbf{N}
				V
Reset		Excel	Close	

xおよびDPDパラメータA_{ii}を求める場合

- 1. Molecule Bタブをクリックします。
- 2. Liquid Phaseのedr FileのSelectをクリックし、 work11_GMX_NPT以下のgmx_mdrun.edrを選択します。
- 3. Liquid Phaseのgro FileのSelectをクリックし、 work11_GMX_NPT以下のgmx_mdrun.groを選択します。
- 4. Vapor Phaseのedr FileのSelectをクリックし、 work14_GMX_NVT以下のgmx_mdrun.edrを選択します。

Chi/Solubility Parameters		_		×		
lecule A Molecule B						
quid Phase edr File olub	am.wmpjdata¥work11_GMX	(_NPT¥gmx_mdrun.ed	Select			
gro File olub_pa	aram.wmpjdata¥work11_GMX	_NPT¥gmx_mdrun.gro	Select			
apor Phase edr File olub_pa	aram.wmpjdata¥work14_GMX	(_NVT¥gmx_mdrun.ed	Select			
operties						
Molar Volume	Vmb	[m^3/mol]	1.81663e-05			
	т.	D/1	200.026			
Temperature		LINI CONTRACTOR	300.020			
Temperature Isothermal Compressibility	Kt	[J/m^3]	4.03759e-10		ſ	
Temperature Isothermal Compressibility Dimensionless Compressibility	Kt K=Vmb/(R*T*Kt)	[J/m^3]	4.03759e-10 18.03646			同種粒子間
Temperature Isothermal Compressibility Dimensionless Compressibility DPD Parameter	Kt K=Vmb/(R*T*Kt) Aii=(K-1)/(0.2*rho)	[J/m^3] [-] [-]	4.03759e-10 18.03646 16.86778	1		同種粒子間
Temperature Isothermal Compressibility Dimensionless Compressibility DPD Parameter .iquid Potential Energy	Kt K=Vmb/(R*T*Kt) Aii=(K-1)/(0.2*rho) El	[.] [.] [.] [kJ/mol]	4.03759e-10 18.03646 16.86778			同種粒子間 DPDパラン
Temperature Isothermal Compressibility Dimensionless Compressibility DPD Parameter Liquid Potential Energy Vapor Potential Energy	Kt K=Vmb/(R*T*Kt) Aii=(K-1)/(0.2*rho) El Ev	[J/m^3] [-] [-] [kJ/mol] [kJ/mol]	4.03759e-10 18.03646 16.86778 -46.4168 0	<hr/>		同種粒子間 DPDパラン
Temperature Isothermal Compressibility Dimensionless Compressibility DPD Parameter Liquid Potential Energy Vapor Potential Energy Cohesive Energy	Kt K=Vmb/(R*T*Kt) Aii=(K-1)/(0.2*rho) El Ev dE=Ev-El	[J/m^3] [-] [-] [kJ/mol] [kJ/mol] [kJ/mol]	4.03759e-10 18.03646 16.86778 -46.4168 0 46.41680	E		同種粒子間 DPDパラン

1. Chi/Aijタブに、**χパラメータ**および**DPDパラメータ(A_{ij} - A_{ii})**が出力されます。

Chi/Solubility Parameters			- 0	×	
Molecule A Molecule B Chi / Aij					
Density for DPD [-]	5.	\sim			
Properties					
(Aij-Aii) / Chi		[-]	1.45000		
Volume of a Bead	Vb=Min(Vma,Vmb)	[m^3/mol]	1.8166E-00	5	- いパーメータ
Chi Parameter	Chi=Vb*(da-db)^2/RT	[-]	9.26877		
DPD Parameter	Aij-Aii	[-]	13.43972		■ 異種粒子間
Citation R. D. Groot and P. B. Warren, J. (Chem. Phys., 107 (11), 1993	7.			DPDパラメータ
Reset		Exc	el Clos	se	

補足 DPD計算の設定

- 1. DPD計算を行わない場合は本章を省略する。
- DPD計算の詳細な設定方法は
 「Winmostar™ LAMMPSチュートリアル 散逸粒子動力学」を参照のこと。
- 3. MD | LAMMPS | 散逸粒子動力学法 | DPDセルビルダにおいて系を作成する際、Buildク リック後に現れるDensity欄にはChi/Solubility PatametersウインドウのChi/Aijタブに 表示されているDensity for DPDの値を入力する。 ______ Chi/Solubility Parameters ______

Molecule A Molecule B Chi / Aij

MD 固体(S) アドオン(A) ツーJ (調) 溶媒を配置/セルを構築(S) 分子を挿入(N)	L(T) チュートリアル(U) ウィンドウ(W) ヘルフ 回 日 図 ∈ (ラベルレ/3	^f (H) 電荷を隠す) <mark>、</mark>				Density for DPD [-] Properties	5.	2
 自動で電荷を割り当て(C) 手動で電荷を割り当て(C) 	Replace 🗹 🍝 🗇 🏙	● ✿ 培 #				(Aij-Aii) / Chi		[-]
ホリマー(P) 界面ビルダ(I)	•					Volume of a Bead	Vb=Min(Vma,Vmb)	[m^3/mol]
水をイオンに置換(O)						Chi Parameter	Chi=Vb*(da-db)^2/RT	[-]
Gromacs	•					DPD Parameter	Aij-Aii	[-]
LAMMPS	 力場を割り当て トロービジョウ 							
MODYLAS	 ▶ 品 実行… □ ワグを表示 (log)… □ アニメーション… □ アニメーション… □ エネルギー変化… 最終構造を読み込み (data)… ● 結果解析 ▶ 軟逸粒子動力学法 	DPDセルビルダ ポテンシャル環集	Manamers Available A B C D E F G G H I I J K L M N N	er Monomers Use B x 1 << <delete <<<br="">Branch: Start End Clear</delete>	d Po >> Add >> A << Delete << Export Import	Hymers Used	Density Enter Value 5.0	OK Cance

補足 DPD計算の設定

- 1.次に、MD | LAMMPS | 散逸粒子動力学 | ポテンシャル編集のNonbondタブにおいて、 A-A間やB-B間のA_{ij}については、MonomerA, MonomerBタブでそれぞれ取得した同種粒子 間DPDパラメータAiiを指定する。ただし、成分1あるいは2のどちらかの値に統一する。 A-B間のAiiは、上で採用した同種粒子間DPDパラメータに、取得した異種粒子間DPDパラメー タ $(A_{ii} - A_{ii})$ を足した値を入力する。
- 2. 水-ベンゼンのDPDパラメータの算出に関しては 文献[A. Maiti and S. McGrother, J. Chem. Phys., 120 (3), 2004, 1594.]を参考にした。

IVID		11/1	14 17	////0/	2121	2000	1400	(11)			
۲	溶媒を配置/セルを構築(S)			~	4	(5/	ベル/電	荷を隠	す) 〜		
	分子を挿入(N)		_			_					
e	自動で電荷を割り当て(C)	F	teplace	<u> </u>		Ø		•	尊	tB	₽ 4
	手動で電荷を割り当て(C)	-									
	ポリマー(P)	- F									
	界面ビルダ(I)										
	水をイオンに置換(O)										
	Gromacs	•									
	LAMMPS	•	力場	を割り当て				1			
	Amber	•	1 +-7	ド設定…							
	MODYLAS	•	』 実行								
_			自 ログを	表示 (log)						
		E	7=×	-ション							
			 エネル 	/ギー変化.							
			最終	構造を読み	み込み ((data)	.				
			4 結果	解析			•				
										H.	
			110.25	粒子動刀:	字法		<u> </u>	DF	ושעשט	v9	
							L		テンシャル	編集	

Winmostar Copyright 2008-2025 X-Ability Co., Ltd.

X



• 各機能の詳細を調べたい方は<u>ユーザマニュアル</u>を参照してください。





<u>ユーザマニュアル</u>

<u>Winmostar 講習会</u>の風景

- 本書の内容の実習を希望される方は、基礎編チュートリアルについては<u>Winmostar基礎講習会</u> へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては<u>個別講習会</u>のご依頼をご検討ください。
- 本書の内容通りに操作が進まない場合は、まず<u>よくある質問</u>を参照してください。
- よくある質問で解決しない場合は、情報の蓄積・管理のため、お問合せフォームに、不具合の 再現方法とその時に生成されたファイルを添付しご連絡ください。

以上