M winmostar チュートリアル

LAMMPS/Gromacs 力場の自動編集

V11.13.02025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。



- 本チュートリアルの実施にはWinmostar V11 プロフェッショナル版エリートが必要です。設定 した後LAMMPSよびGromacsにて計算可能です。(剛体構造はLAMMPSでのみ計算可能で す。)
- 1. OPLS-AA力場の割り当て
 - エタノールに対しmktopを用いたOPLS-AAを割り当てます。従来機能でのacpypeを用いたOPLS-AA/L+GAFFとは異なり分子内ポテンシャルにもOPLS-AAが適用されます。
- 2. 剛体構造に対するパラメータの自動割り当て
 - グラフェンに対しUFFまたはDreidingのLJパラメータを自動で割り当てます。従来機能のようにLJパラ メータを手入力する必要はありません。
- 3. 自動割り当てに失敗した場合の自動補完
 - シラノールにGAFFとDreidingのパラメータを混合して割り当てます。従来機能のように一部の自由度のパラメータが定義されていない力場を適用しても処理を中断する必要はありません。
- 4. 量子化学計算からの平衡長・平衡角の自動取得
 - PF₆-イオンの力場パラメータをGAMESSで得られた平衡長・平衡角に調整します。汎用力場本来の平衡 長・平衡角では構造が大きく壊れるケースに対応できます。

注意点:

電荷、力場を編集した際は、実際に計算を実行して構造や各種特性を評価しその影響を調査することを推奨します。

I. OPLS-AA力場の自動割り当て

基本的な操作方法はLAMMPS基礎編チュートリアルなど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「ethanol」と入力して保存を クリックします。
- 2. ツールバーの ③ SMILESをインポートをクリックし、「CCO」(すべて大文字)と入力して からImportをクリックします。処理が流れた後「処理が正常に終了しました」と表示された らOKをクリックします。



I. OPLS-AA力場の自動割り当て

- 1. ツールバーの 🧬 自動で電荷を割り当てをクリックします。
- 2. 使用したい電荷の種類を**全てのMethodを…**で選択し、**OK**をクリックします。OPLS-AAの電荷を利用したい場合は「OPLS-AA」を選択します。
- 3. メタノールでOPLS-AA電荷を利用した場合は「mktopを用いて得られたOPLS-AA電荷の合計 値が整数値ではありませんでした。」と表示されます。電荷を強制的に整数値にしたい場合 は、選択 | すべてをグループ選択をクリックしてから編集 | グループ編集 | グループの電荷を シフトをクリックし、適宜値(エタノールなど中性分子の場合は「0」)を入力してOKをク リックします。系全体の電荷の合計値は分子表示エリア下部の「Qtot=」で確認できます。



I. OPLS-AA力場の自動割り当て

- 1. MD | LAMMPS (またはGromacs) | ワークフロー設定をクリックします。
- 2. 「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。
- 3. 使用したい力場(OPLS-AA)を自動でパラメータを割り当ての(一般)で選択します。
- 4. 後の操作はLAMMPS基礎編チュートリアルなどの手順に従います。

🚾 力場を割り当て			— C) X
力場を割り当てる方法	もを選択してください			
○自動でパラメータを	割り当て			
検出され た分子	組成	分子数	種類	
	C2H6O	1	一般	
(一般)	OPLS-AA	\sim		
(タンパク質)	AMBER03	- V		·
(水分子)	SPC/E	~		
□割り当て後編3	乗ウィンドウを開く		Dump I	Now
○ パラメータファイルを	使用〈無機物系、「	ReaxFF、散逸粒子	-動力学法向	(†)
く メインウィンドウのフ	ァイルに書かれたパ	ラメータを使用		
○パラメータの割り当	てをスキッブ			
	< Back	ОК		Cancel

II. 剛体構造に対するパラメータの自動割り当て

基本的な操作方法はLAMMPS基礎編チュートリアルなど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「gwg_auto」と入力して保存 をクリックします。
- **2. ファイル | インポート | Samplesフォルダ | graphene_water_graphene.mol2**をクリックし、**破棄して読み込み**をクリックします。
 - 任意のファイルを読み込む場合はこの段階で代わりにファイル | ファイルをインポートを使います。
- 3. 選択 | 元素によるグループ選択をクリックし、「1 C 1920」の行をクリックしOKをクリック します。選択 | グループを登録をクリックし、「graphene」と入力してOKをクリックしま す。(本書ではMD計算実行まで記載しませんがMD計算時に剛体として設定するために必要な操作です)



II. 剛体構造に対するパラメータの自動割り当て

- 1. ソルバで「LAMMPS」を選択し、 [] (ワークフロー設定) をクリックします。
- 2. 「…電荷を設定しますか?」と表示されたらいいえをクリックします。
- 3. Exceptionをクリックします。
- 4. Compositionの1行目の「C960」にチェックを入れます。

抛 力場を割り当て		-	- 0	×	Exception						×
力場を割り当てる方法	まを選択してください				Check molecules to be explicitly as	signed LJ paramete	ers				
○自動でパラメータを	書り当て				Composition	# Mol	Element	Sigma / nm	Epsilon	/kJ/mol	
検出され た分子	組成 <mark>C960</mark> H2O C960	分子数 1 250 1	種類 一般 水分子 一般		C960 C960	1	c	0.00	0.00		
(一般) (タンパク質)	GAFF AMBER03	Exception									
(水分子)	SPC/E	-			Automatically assign parameters	to all species	Au	utomatically ass	sign paramo	eters	
							Use bor	nd coefficient [gle coefficient [Set	cJ/mol/nm2 kJ/mol/rad	2] 0.0 2] 0.0 Cance	2

II. 剛体構造に対するパラメータの自動割り当て

- **1. Automatically assign parameters**をクリックし、Select force fieldで「UFF」または「Dreiding」を選択します。その後、上のリストにパラメータが自動で入力されます。
- **2.** Compositionの2行目の「C960」にチェックを入れ、同様にAutomatically assign parametersをクリックし「UFF」または「Dreiding」を選択します。

(本系の場合はAutomatically assign parameters to all speciesをクリックする事でも同様の割り当てができます)

3. Setをクリックします。後の操作はLAMMPS固体壁を含む系チュートリアルの手順に従いま

Exception				- 0	×	Exception			-	- 0	
eck molecules to be	explicitly assigned LJ para	meters				Check molecules to be ex	plicitly assigned LJ par	rameters			
omposition	# Mol	Element	Sigma / nm	Epsilon / kJ/mol		Composition	# Mol	Element	Sigma / nm	Epsilon / k	J/mol
C960	1	С	0.00	0.00		C960	1	С	0.34308509635	0.43932	
) C960	1					C960	1				
utomatically assign	narameters to all species		utomatically ass	ion parameters		Automatically assign pa	arameters to	A	utomatically assig	n parameter	rs
utomatically assign (parameters to all species	A	utomatically ass	ign parameters 📢		Automatically assign pa	arameters to	Au	itomatically assig	n parameter	rs
Automatically assign (parameters to all species	Ar	utomatically ass	ign parameters		Automatically assign pa	arameters to	Au Use bor	utomatically assig	n parameter /mol/nm2]	rs 0.0
utomatically assign (parameters to all species	At Use bor	utomatically ass nd coefficient [k gle coefficient [k	ign parameters		Automatically assign pa	arameters to	Au Use bor	utomatically assig nd coefficient [kJ, yle coefficient [kJ,	m parameter /mol/nm2] /mol/rad2] 0	rs 0.0
utomatically assign (parameters to all species	At Use bor	utomatically ass nd coefficient [k gle coefficient [k	ign parameters		Automatically assign pa	arameters to	Au Use bor	utomatically assig nd coefficient [k], ple coefficient [k],	/mol/nm2] 0 /mol/rm2] 0 /mol/rad2] 0	rs 0.0 0.0

III.自動割り当てに失敗した場合の自動補完

基本的な操作方法はLAMMPS基礎編チュートリアルなど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「silanol_gaff_dreiding」と入 力して保存をクリックします。
- 2. ファイル | インポート | Samplesフォルダ | silanol_resp.mol2をクリックし、破棄して読 み込みをクリックします。
- 3. MD | LAMMPS (またはGromacs) | ワークフロー設定をクリックします。
- 4. 「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。
- 5. 力場を割り当てウィンドウでデフォルト設定(GAFF)の状態でOKをクリックすると、「力場 パラメータが不完全な可能性があります。確認しますか?」と表示されるのではいをクリック します。



III.自動割り当てに失敗した場合の自動補完

- **1. Edit Force Field**ウィンドウ上部に「2 atoms, 4 bonds… may be invalid.」と赤字で警告 が表示され、GAFFの割り当てに失敗した自由度があることを確認します。
- 2. Action | Complementをクリックし、Force fieldを「UFF」から「Dreiding」に変更してからOKをクリックします。
- 3. 「Complemented 1 atoms…」と表示されたらOKをクリックします。

Edit Force Field								-		
ile Action										
G	M	OL01 (SiH4O)								
a	2	atoms, 4 bonds, 3	7 angles,	and 3 di	hedrals may t	be invalid.				
8	atom	ns bonds angl	les diheo	drals						
	nr	type	name	res	mass	sigma [nm]	epsilon [kJ/mol]			Select force field used to comple \times
	1	MOL01_Si_0	Si1		0.00000	0.0	0.0			
	2	oh	01		16.00000	3.06647e-01	8.80314e-01			Earce field
	3	ha	H1		1.00800	2.59964e-01	6.27600e-02			Force field
	4	ha	H2		1.00800	2.59964e-01	6.27600e-02			UFF V
4(ha) 6(ho)	5	ha	H3		1.00800	2.59964e-01	6.27600e-02			LIEE
	6	ho	H4		1.00800	0.00000e+00	0.00000e+00			Dreiding
1(MOL01_Si_0)[00)]										GAEE
										GAFE2
3(ha)										
X										
		Select item dicke	d at view	port						
		hel Helener	-							
+ 162%	La	Number &	i ype	~				ж	Cancel	

III.自動割り当てに失敗した場合の自動補完

- 1. 基本的にはウィンドウ上部の警告がなくなるまで**Complment**を力場の種類を変えて実行する か、ウィンドウ中央のリストに直接値を入力します。ここでは、警告が出ている原子(OH基 のH原子)が元の力場の定義でsigma=0, epsilon=0となっており問題ないため警告を無視し て先に進むことにします。
- 2. ウィンドウ下部の**OK**をクリックします。後の操作は<u>LAMMPS基礎編チュートリアル</u>などの手順に従います。



基本的な操作方法はLAMMPS基礎編チュートリアルなど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「lipf6」と入力して保存をクリックします。
- 2. ツールバーのフラグメントで「-PDH5」を選択しReplaceをクリックします。
- 3. 選択 | すべてをグループ選択をクリックしてから、いずれかの原子を右クリックし原子を選んで変更 | F9をクリックし、すべての原子をFにします。



- 1. 選択 | グループ選択を解除をクリックします。
- 2. 分子表示エリアをドラッグし中心の原子が見えるようにカメラアングルを変更します。
- 3. 中心の原子を右クリックし原子を選んで変更 | P 15をクリックしPF₆にします。
- 4. QM | GAMESS | ワークフロー設定をクリックします。
- 5. Presetを「Optimize+RESP Charge」に変更してから、1st jobのChargeを「-1」に変更し、OKをクリックします。

	Si 14	😡 GAMESS Workflow Setup	>
	P 15	Preset Optimize +RESP Charge	# of Jobs: + 2
	S 16	·	Enable scan calculation Config
A	CI 17	1st job	
	Ar 18	Task Optimize Method HF ~	Basis set 6-31G* ∨
フラグメントで置換(F) Shift+Ctrl+右クリック	K 19 Ca 20	Charge -1	Solvent [None] ~
 原子を削除(D) 元素を変更 (Shift+F5)(S) 	Sc 21 Ti 22		Details
元素を選んで変更(Y)	V 23		
最迭化フラグを変更(O)	Cr 24	2nd job	
		Task RESP V Method HF V	Basis set 6-31G* \vee
		Charge -1 \checkmark Multiplicity 1 \checkmark	Solvent [None] ~
		Same conditions as previous job Continue from previous job ~]
			Details
_		Reset Import	ок

- 1. ジョブの設定ウィンドウで適宜設定を変更してから実行をクリックし全ての計算が終了するまで待ちます。
- work2の計算終了後、プロジェクト表示エリアの作業フォルダで「work2_GMS_RESPESP」 をクリックし、アクションのRESP Chargesをクリックします。
- 3. 「分子構造的に等価な原子に同じ電荷を割り当てますか?」と表示されたら**いいえ**をクリックします。
- 4. 「処理が正常に終了しました」と表示されたらOKをクリックし、「算出された電荷を表示しますか」と表示されたらいいえをクリックします。



ツールバーの ○ 原子を追加をクリックし、PF6から少し離れた適当な位置をクリックします。
 追加した原子を右クリックし原子を選んで変更 | Li 3をクリックします。



- 1. 追加した原子を右クリックし電荷/スピンを変更をクリックします。
- 2. ActionのOverwriteの右に「1」と入力しOKをクリックします。
- 3. 分子表示エリア上部で組成が「LiPF6」となり、下部でQtotが0、Qrmsが非0となっていることを確認します。



- MD | LAMMPS | ワークフロー設定をクリックします。セルを作成ダイアログが開いたらOK をクリックします。「単原子イオンの残基名を自動で修正します」と表示されたらOKをク リックします。
- カ場を割り当てウィンドウで適宜力場の種類を選択し(本書ではデフォルトのGAFF, AMBER03を使用)、割り当て後編集ウィンドウを開くにチェックを入れてからOKをクリックします。

🚾 力場を割り当て		_	- [×
力場を割り当てる方法	まを選択してください				
○自動でパラメータを	書り当て				
検出され た分子	組成 PF6 Li	分子数 1 1	種類 一般 一般		
(一般)	GAFF	Exception			
(タンパク質)	AMBER03				
(水分子)	SPC/E				
 書的当て後編 パラメータファイルを メインウィンドウのフ パラメータの書り当 	集ウィンドウを閉く く使用く無機物系、Reax シァイルに書かれたパラメー てをスキッブ	FF、散逸粒子動 -夕を使用	p 力学法向	Now ດ(ታ)	
	< Back	ок		Cancel	

- Edit Force Fieldウィンドウで右側のanglesタブをクリックします。全てのF-P-F間の平衡角 が92.22度に設定されている様子が分かります。このままMD計算を実行すると八面体構造が 崩れてしまいます。
- **2.** Action | Assign equilibrium bonds/angles from current structureをクリックし、読 み込んだ構造の結合長、結合角に平衡長と平衡角を変更します。
- 3. OKをクリックします。後の操作はLAMMPS基礎編チュートリアルなどの手順に従います。





• 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、<u>Winmostar導入講習会</u>、<u>Winmostar基礎講習会</u>、 または<u>個別講習会</u>の受講をご検討ください。(詳細はP.2)
- 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、<u>お問合せフォーム</u>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