winmostar チュートリアル

Gromacs
蒸気圧・表面張力

V10.4.3

2021年4月1日　　株式会社クロスアビリティ

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

本書について

- 本書はWinmostar V10の使用例を示すチュートリアルです。

- 初めてWinmostar V10をお使いになる方はビギナーズガイドを参照してください。
- 各機能の詳細を調べたい方はユーザマニュアル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。
  - Winmostar基礎講習会：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、まずよくある質問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。

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/installation/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。

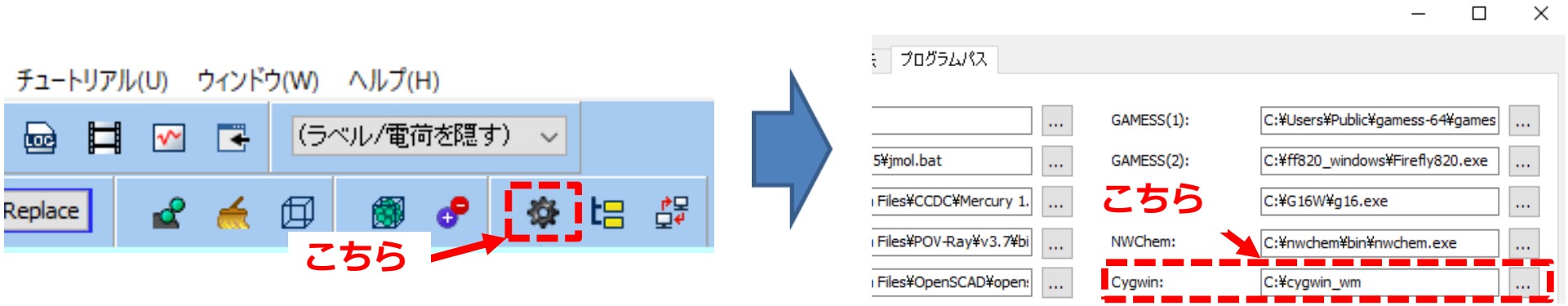
（6）以下のいずれかのリンク先の手順でWinmostar用のCygwin環境（cygwin_wmと呼びます）を構築します。

ビルド済みのcygwin_wmをインストールする場合（推奨） ← こちら

cygwin_wmをビルドする場合（非推奨、上級者向け）

Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合（ベータ版）

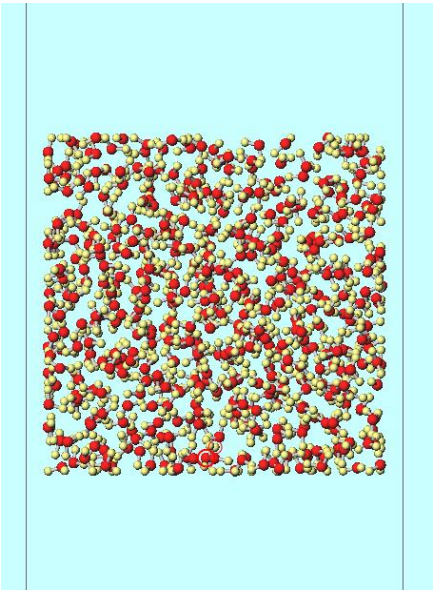
- デフォルトではC:¥直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」＞「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

概要

- 水気液平衡系を計算し、蒸気圧、気液平衡密度、表面張力を算出します。



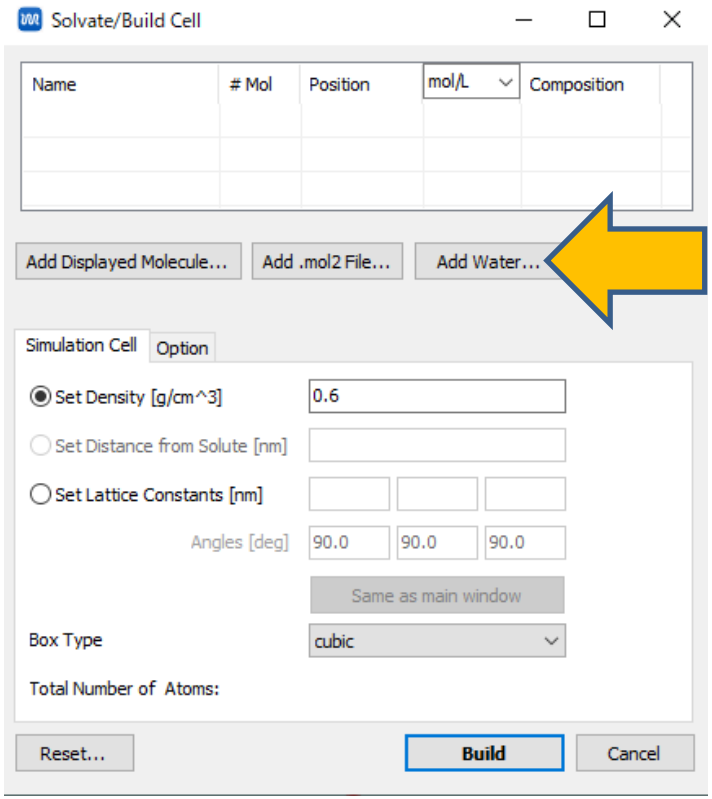
注意点：

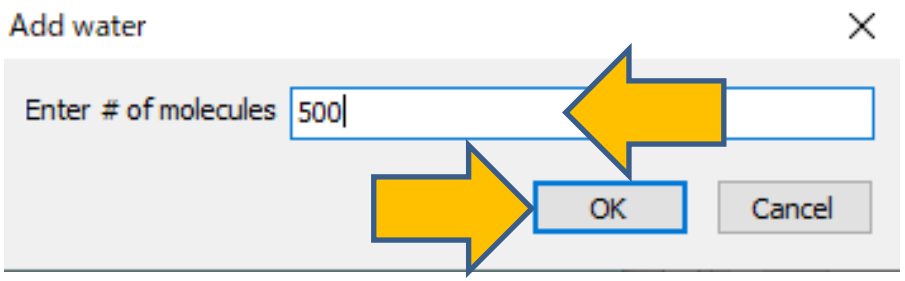
- 分子の種類、初期密度に応じて平衡化に必要なステップ数は変化します。
- “本計算”のステップ数が大きいほど、再現性が良く、信頼性の高い結果を取得することができます。特に界面張力の算出値の収束は遅いです。
- 力場の種類、相互作用の計算条件も計算結果に大きく影響を与えます。
- 必要に応じて真空層挿入前の液相の状態で平衡化計算を実施してください。

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 液相の作成

1. **溶媒を配置/セルを構築**をクリックする。
2. **Add Water**をクリックし、**Enter # of molecules**に**500**と入力し**OK**をクリックする。

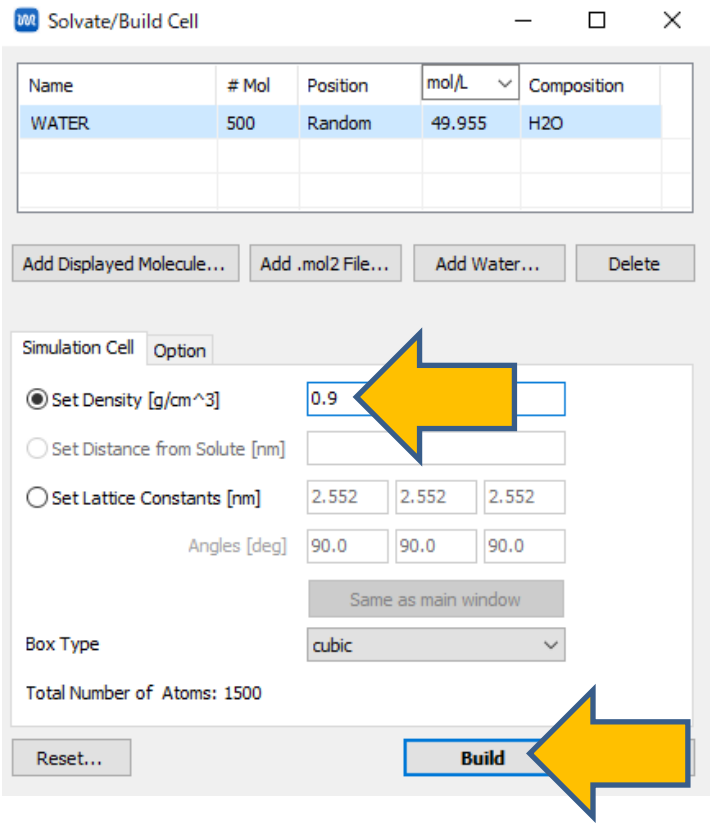


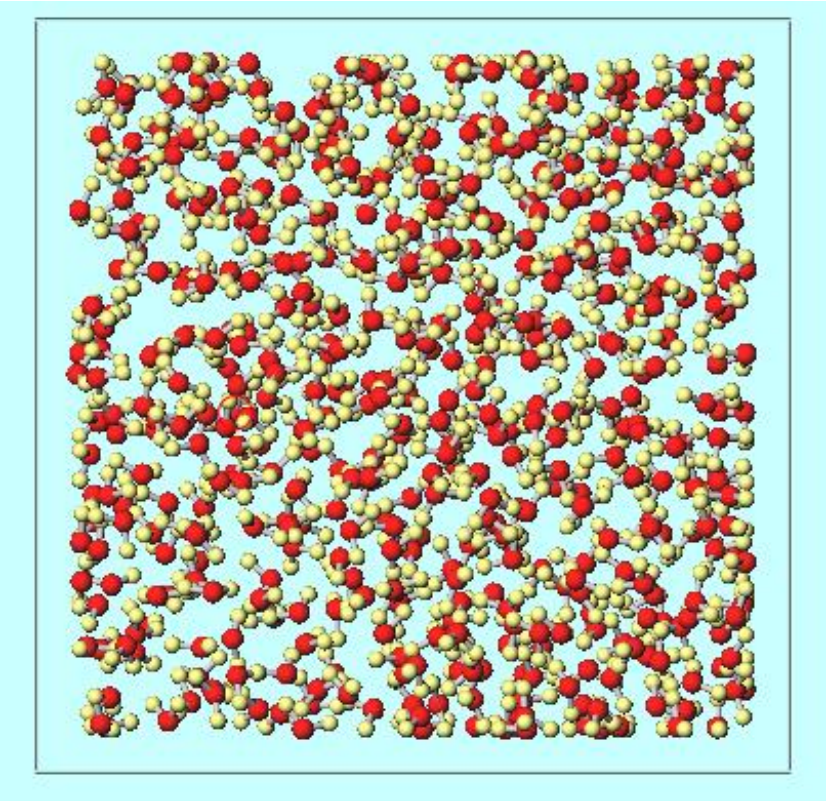


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

I. 液相の作成

1. **Set Density**に**0.9**と入力する。
2. **Build**をクリックすると右図のような系が作成される。

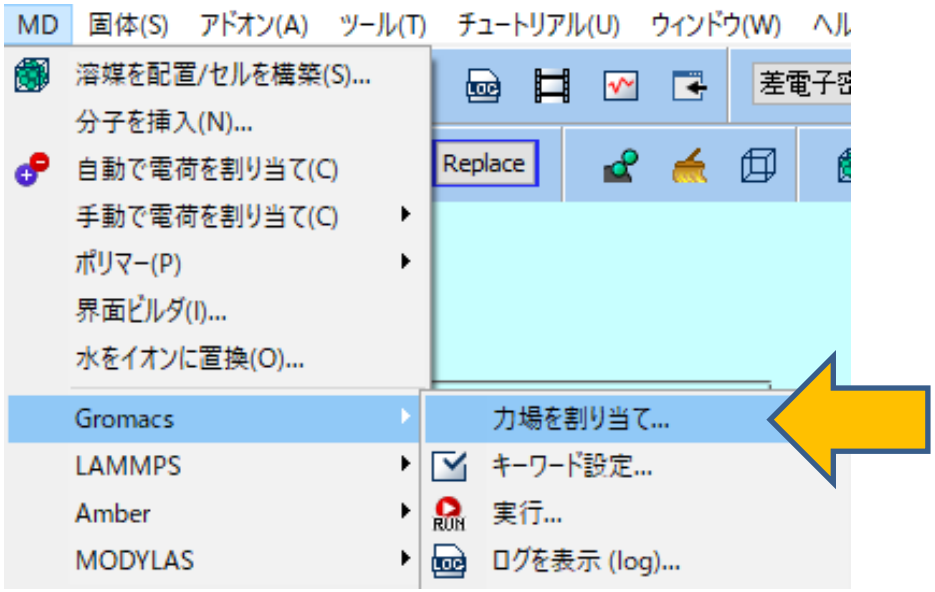


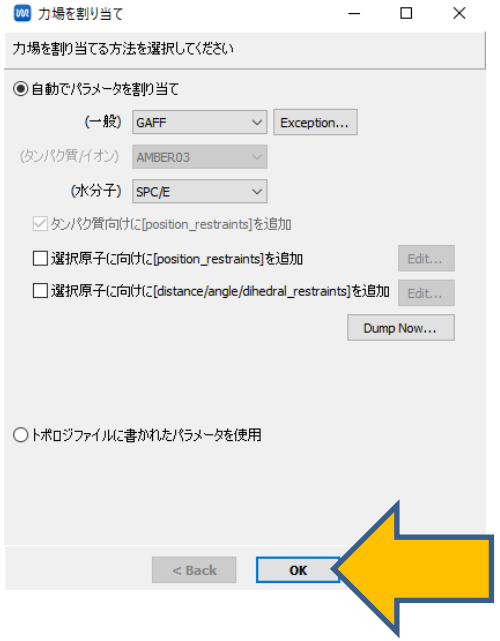


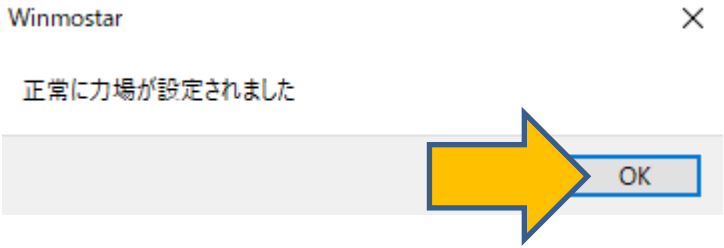
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 液相の平衡化計算

1. **MD | Gromacs | 力場を割り当て**をクリックする。
2. **力場を割り当てウインドウ**で**OK**をクリックすると、設定した力場が割り当てられる。



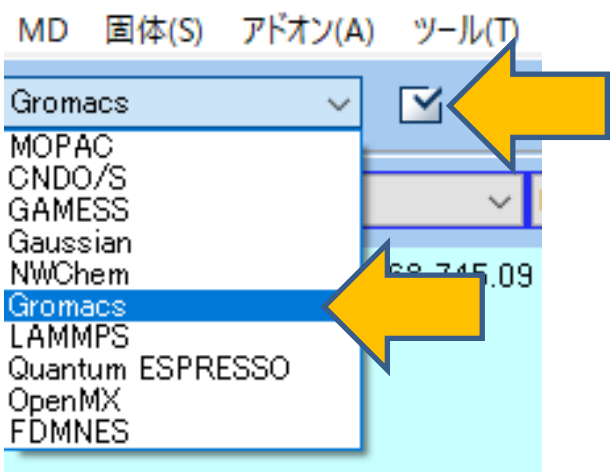


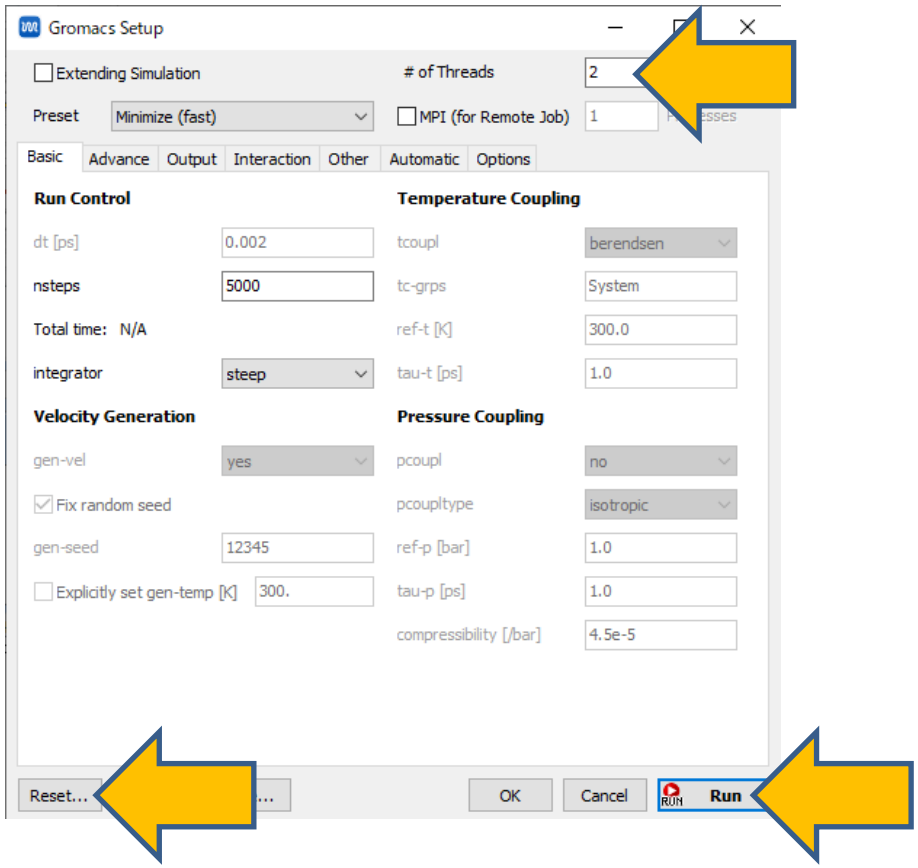


Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 液相の平衡化計算

1. ソルバー一覧から**Gromacs**を選択し、 **キーワード設定**をクリックする。
2. **Reset**をクリックし、**# of Threads**に並列数を指定する。
3. **Run**をクリックする。ファイル名を**spce_liquid.gro, spce_liquid.top**として保存する。

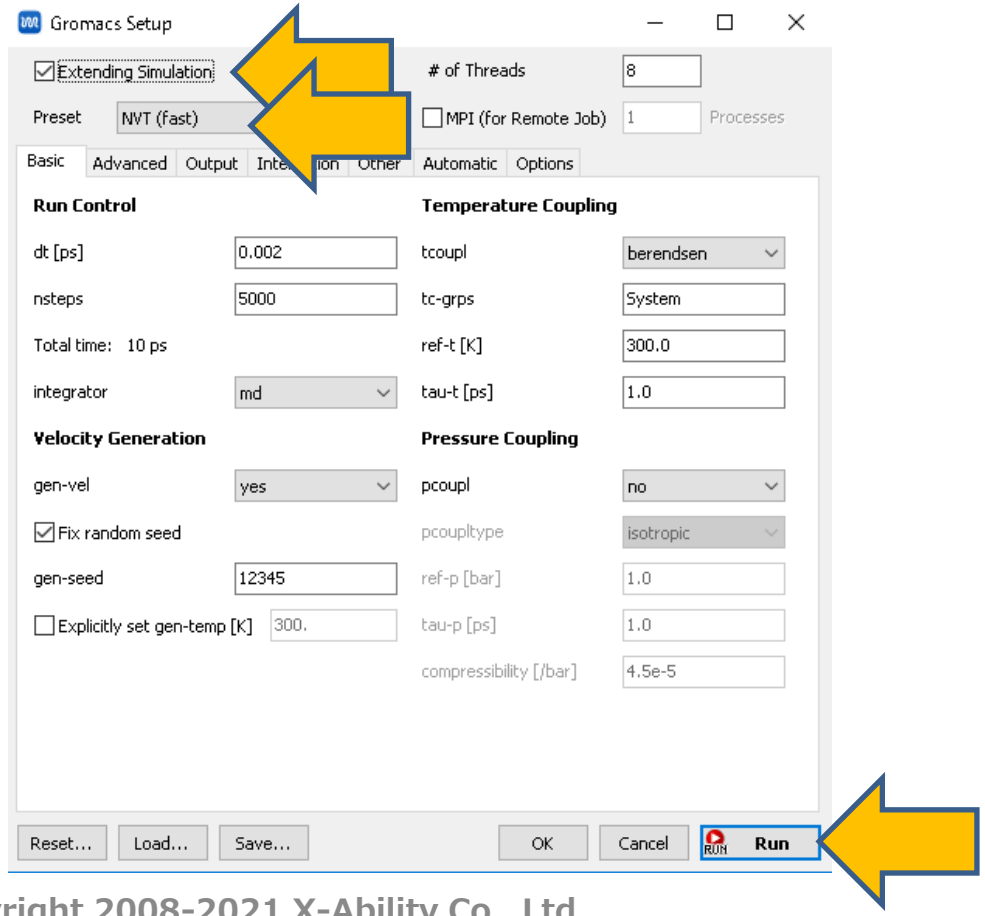




Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

II. 液相の平衡化計算

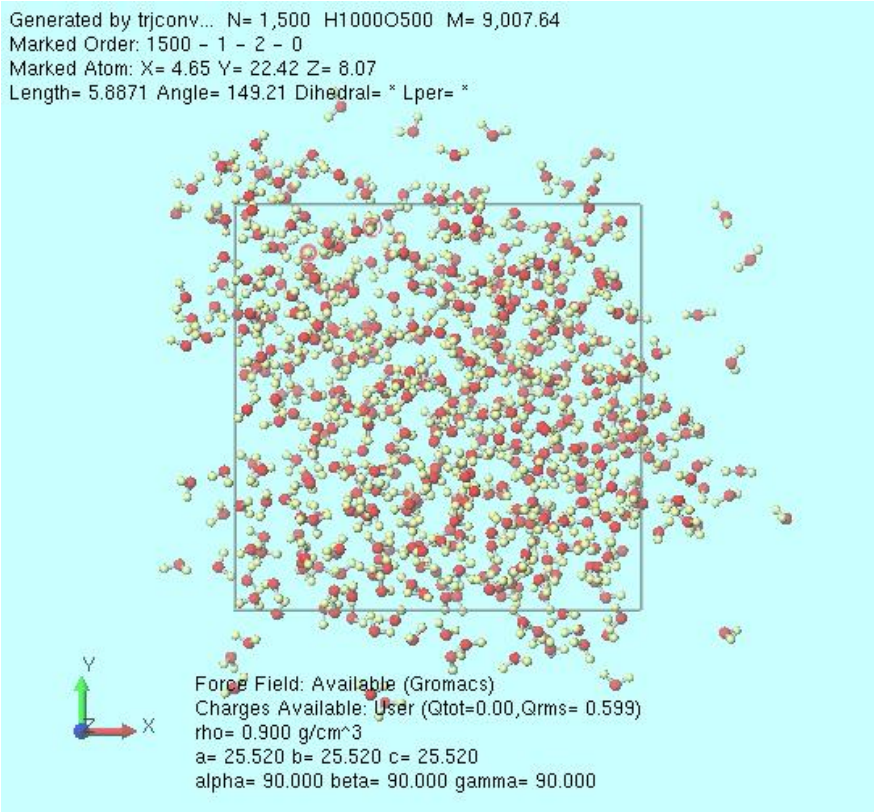
1. 計算終了後、 **キーワード設定**をクリックする。
2. **Extending Simulation**にチェックを入れ**Preset**に**NVT (fast)**を選択する。
3. **Run**をクリックする。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.気液系の作成

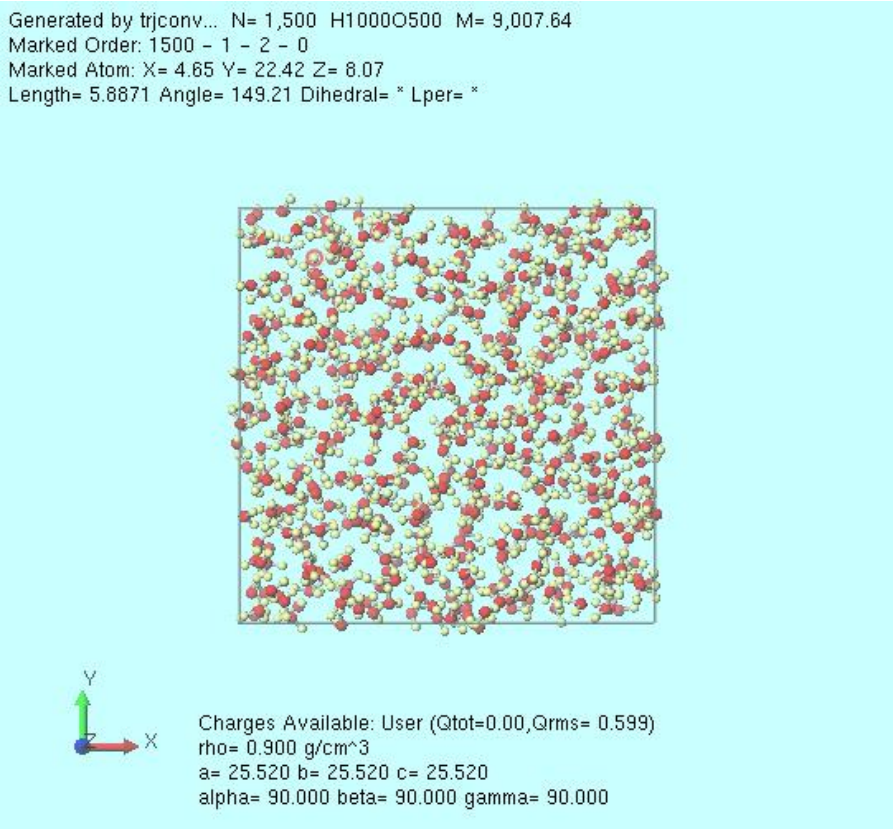
1. **MD｜Gromacs｜最終構造を読み込み**をクリックし、デフォルトで選ばれたファイルを開く。
2. **表示｜周期境界条件の表現形式**をクリックし、**再配置しない**にチェックを入れ**OK**ボタンをクリックする。セルの外に表示されている分子も実際には周期境界条件によりセルの中に存在しているが、座標ファイル上はセルの外に飛び出すように表現されている。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.気液系の作成

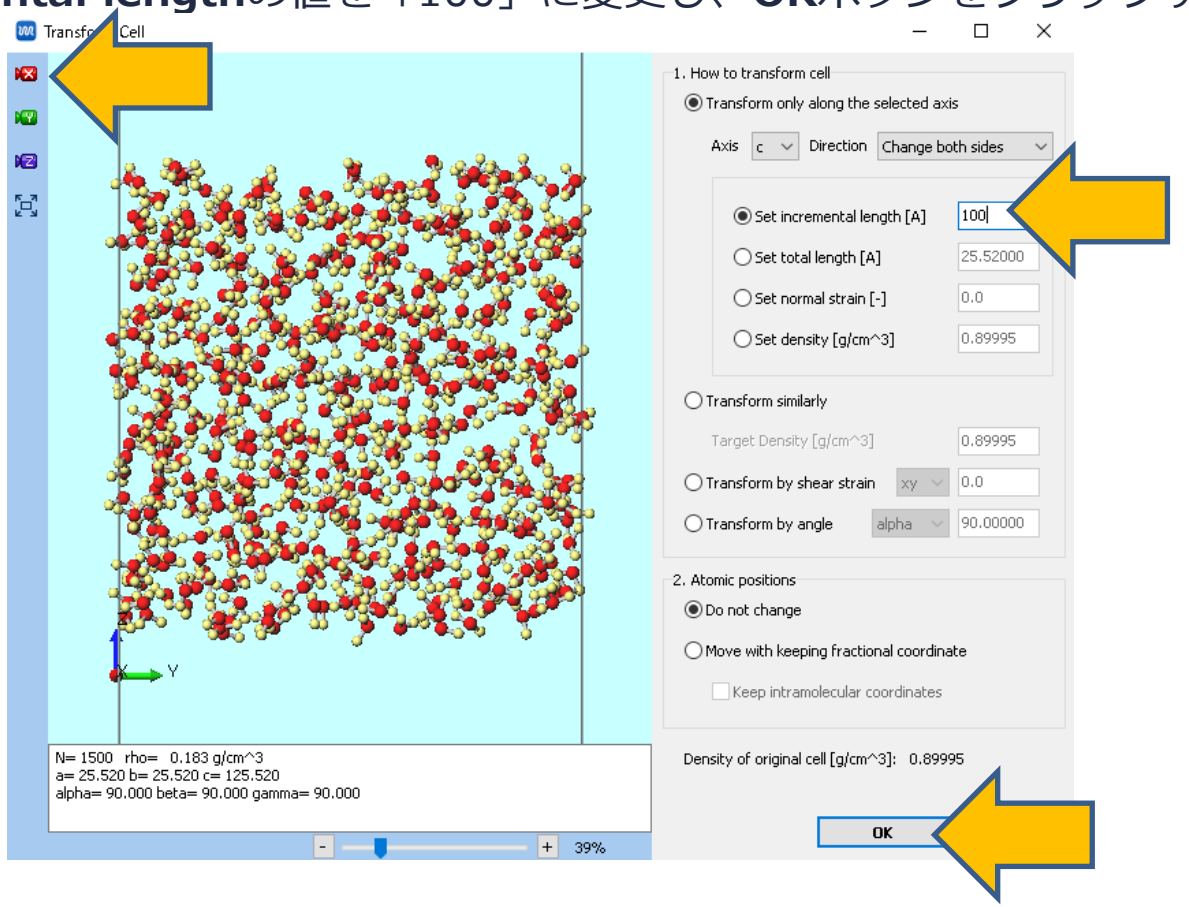
これからz方向にセルを拡張することで気液系を作成するが、液相の状態でセルの外にいる分子を周期境界を考慮して液相の中に再配置した上でセルを拡張することで、多少計算の効率を上げられる。そのため、**編集｜周期境界条件に基づき原子を再配置**をクリックし、**セルの内側に分子単位で再配置**にチェックを入れ**OK**ボタンをクリックする。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.気液系の作成

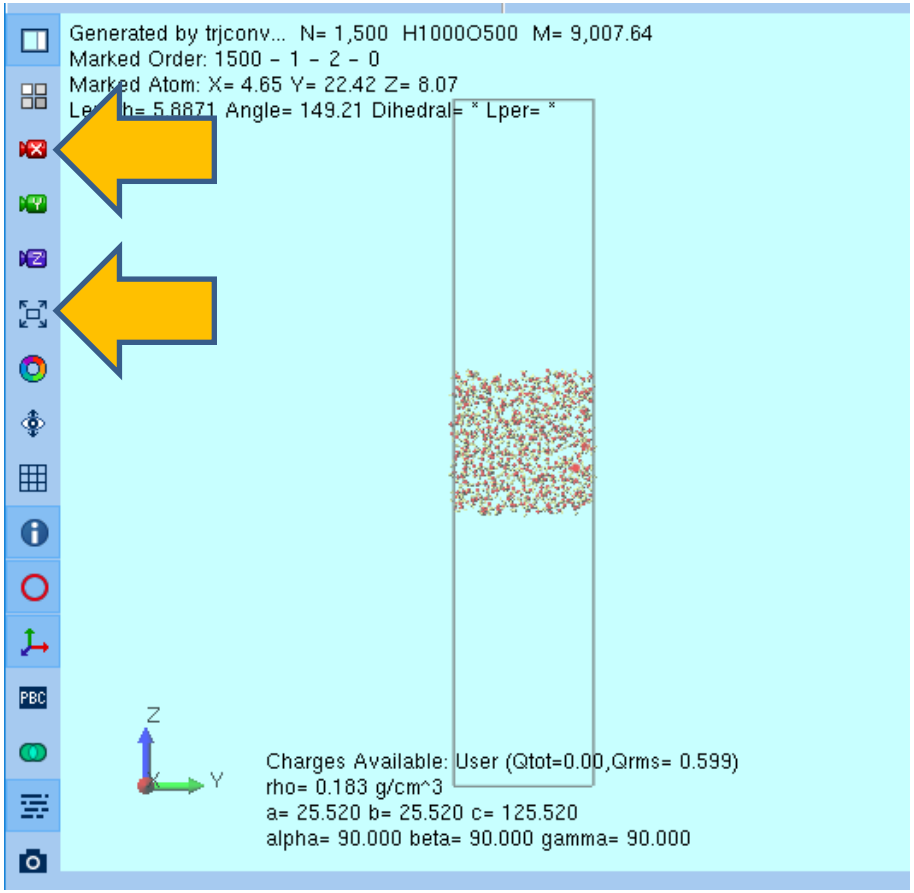
1. **セルを作成/編集｜セルを変形**をクリックする。
2. をクリックし視点を変更する。
3. **Set incremental length**の値を「100」に変更し、**OK**ボタンをクリックする。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.気液系の作成

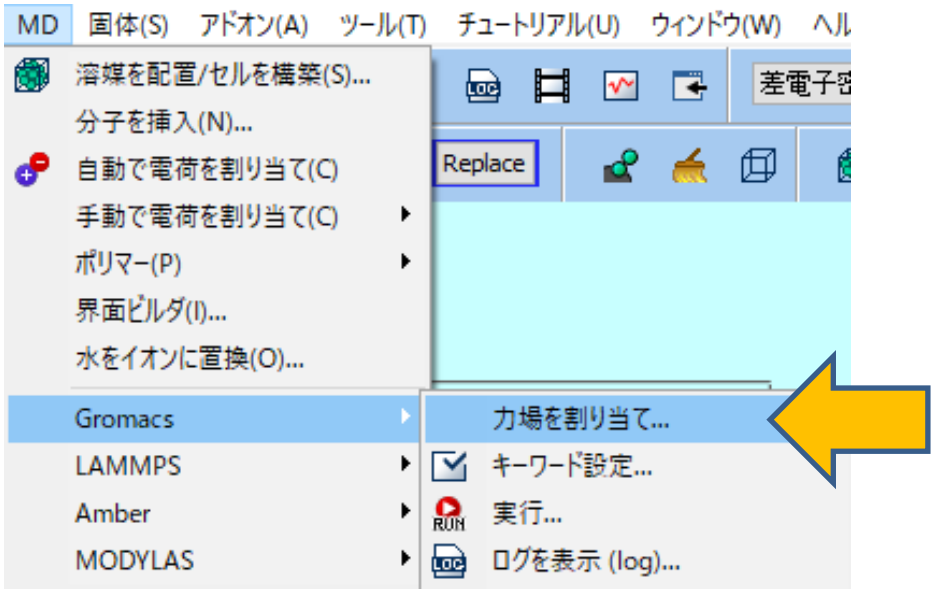
1. **X軸方向から表示**をクリックする。
2. **ウィンドウに合わせる**をクリックする。

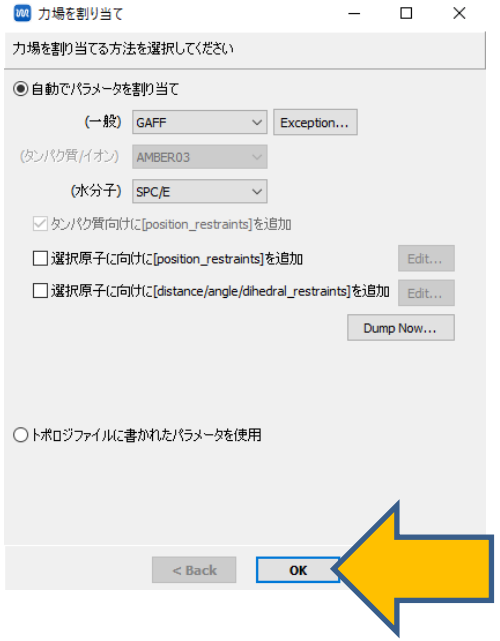


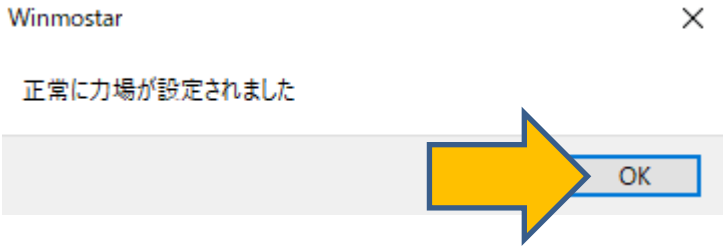
Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

IV.気液系の平衡化計算

1. **MD | Gromacs | 力場を割り当て**をクリックする。
2. **力場を割り当てウインドウ**で**OK**をクリックすると、設定した力場が割り当てられる。



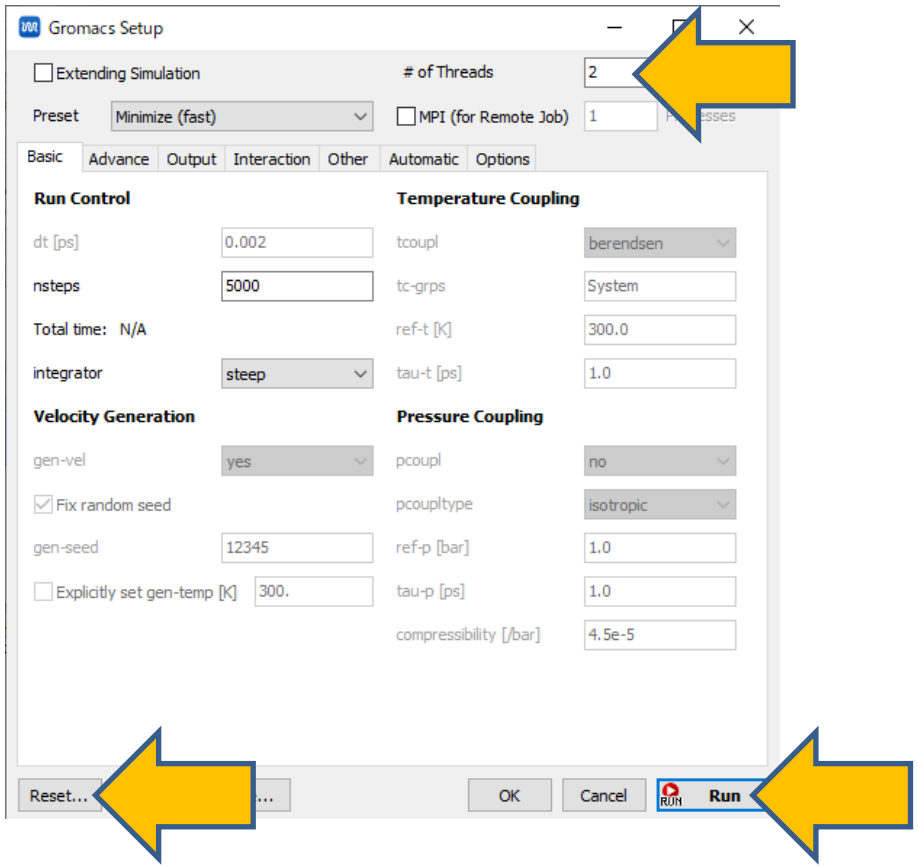




Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

IV.気液系の平衡化計算

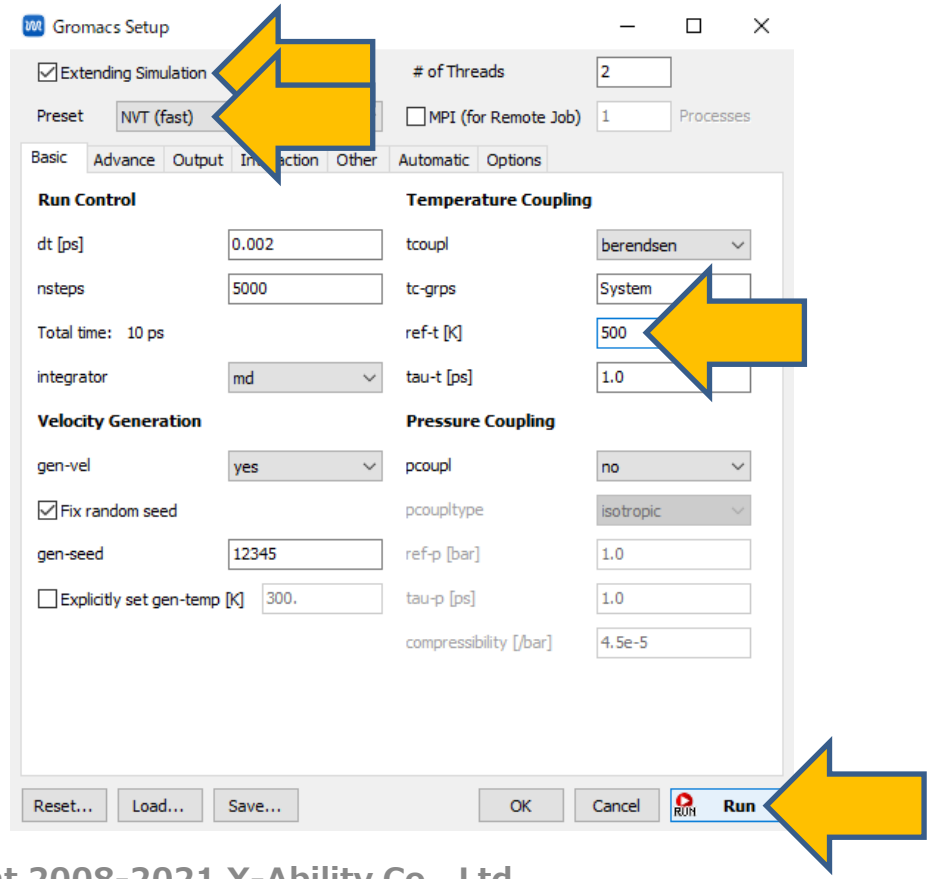
1. **キーワード設定**をクリックする。
2. **Reset**をクリックし、**# of Threads**に並列数を指定する。
3. **Run**をクリックする。ファイル名を**spce500k.gro**, **spce500k.top**として保存する。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

IV.気液系の平衡化計算

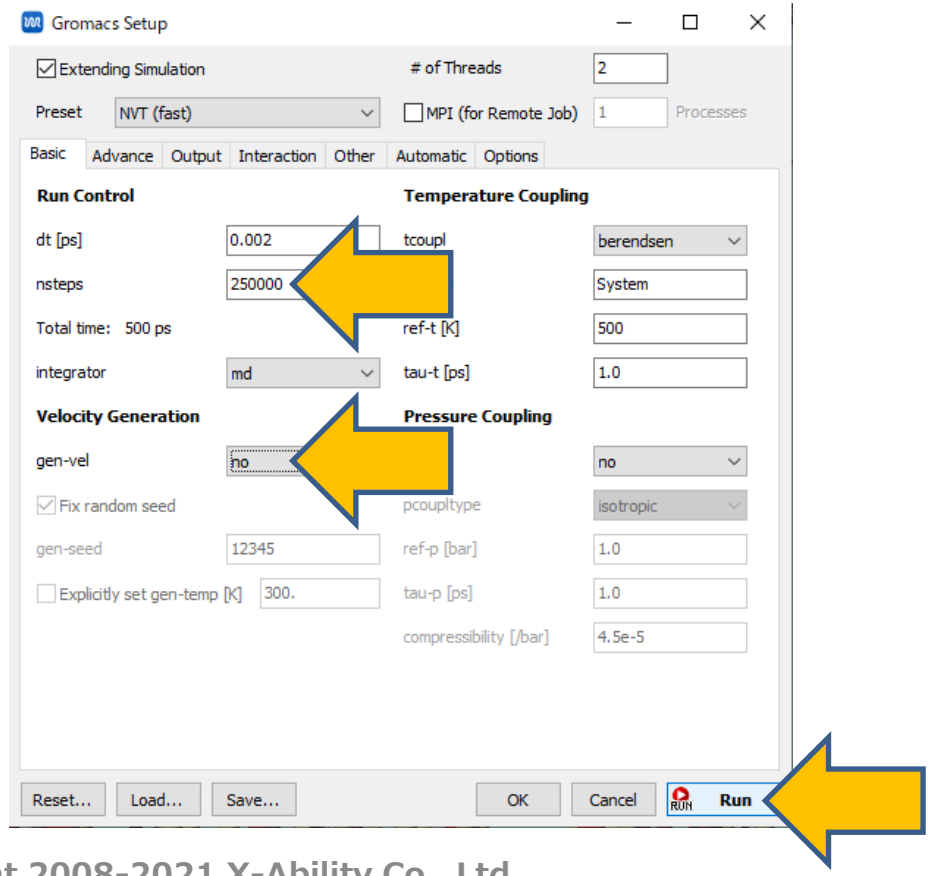
1. 計算終了後、 **キーワード設定**をクリックする。
2. **Extending Simulation**にチェックを入れ**Preset**に**NVT (fast)**を選択する。
3. **Basicタブ**にて**ref-t [K]**を**500**に変更する。
4. **Run**をクリックする。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

III.本計算

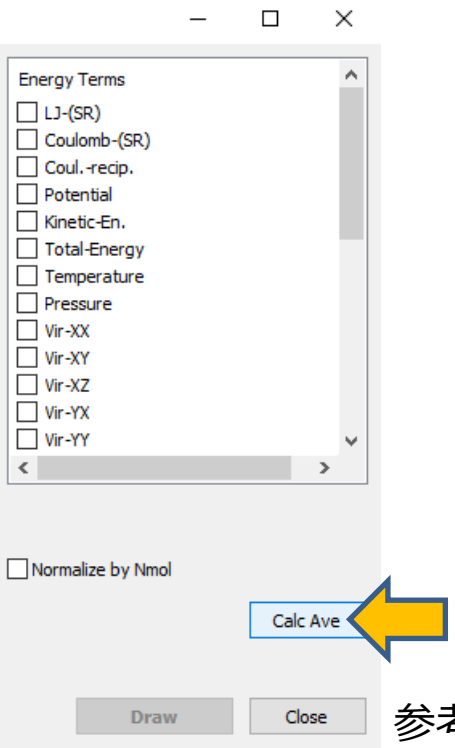
1. 計算終了後、**キーワード設定**をクリックする。
2. **Basicタブ**にて**nsteps**を**250000**に、**gen-vel**を**no**に変更する。
3. **Run**をクリックする。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

IV. 物性算出

1. **エネルギー変化**をクリックし、デフォルトで選ばれる**edr**ファイルを開く。
2. **Calc Ave**をクリックし、デフォルトで選ばれる**gro**ファイルを開く。
3. **Enter first frame to read**は**0**のまま**OK**をクリックする。
   Pres-ZZに蒸気圧（気液平衡圧力、単位はbar）、
   #Surf*SurfTenに界面数(2)と表面張力の積（単位はbar*nm）が書かれる。



energy_ave.log.dos - メモ帳

ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

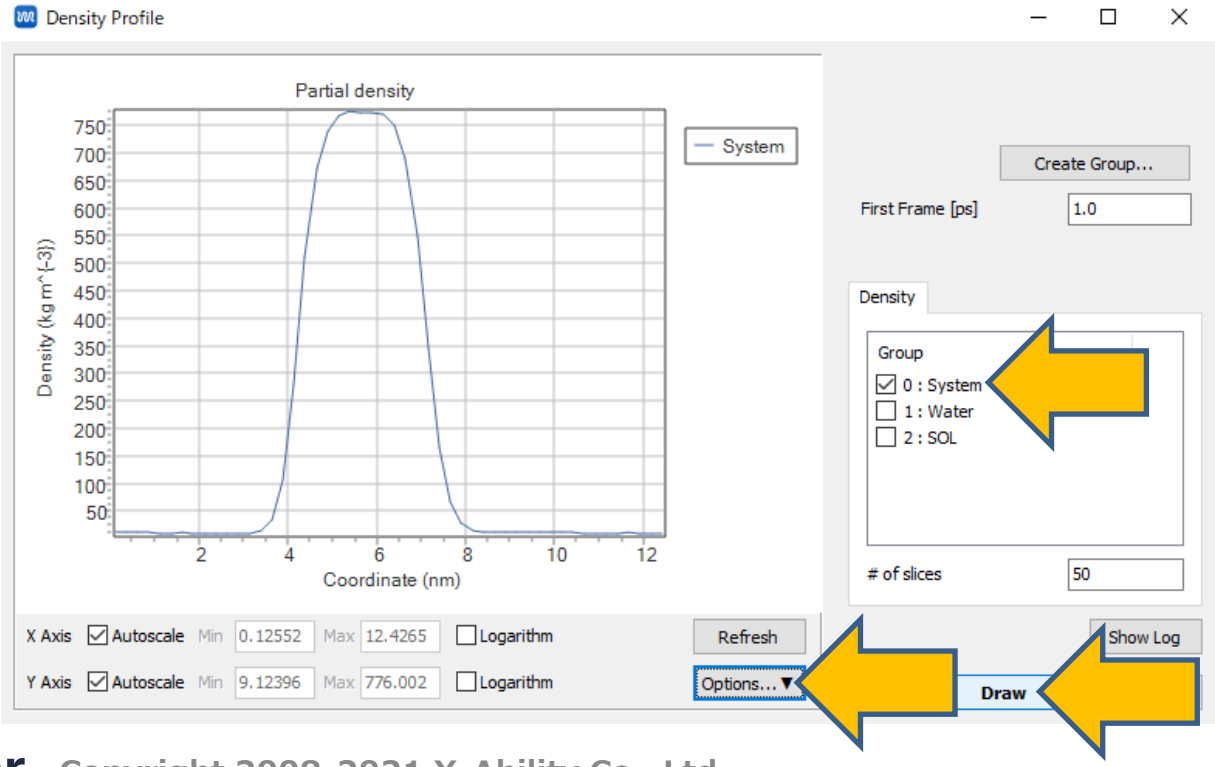
```
Statistics over 123911 steps [ 10.0000 through 257.8200 ps ], 29 data sets
All statistics are over 12392 points (frames)

Energy                      Average   Err.Est.       RMSD  Tot-Drift
---------------------------------------------------------------------------
LJ (SR)                     5.03085      0.014   0.318921 -0.0676702  (kJ/mol)
Coulomb (SR)               -37.3011      0.087   0.528861   0.473392  (kJ/mol)
Coul. recip.               0.843115     0.0076  0.0535031  0.0466155  (kJ/mol)
Potential                  -31.4271       0.08   0.370434   0.452337  (kJ/mol)
Kinetic En.                 12.4525     0.0063   0.264688  0.0301673  (kJ/mol)
Total Energy               -18.9746      0.084   0.279769   0.482504  (kJ/mol)
Temperature                 499.727       0.25    10.6221    1.21063  (K)
Pressure                   -8.56961        2.2    110.601    3.69723  (bar)
Vir-XX                      2118.76          8    389.158    12.6234  (kJ/mol)
Vir-XY                      2.36873        4.3    242.557    22.1606  (kJ/mol)
Vir-XZ                     0.946668        1.6    238.323    1.06992  (kJ/mol)
Vir-YX                      2.37487        4.3    242.566    22.2086  (kJ/mol)
Vir-YY                       2129.6        6.7    395.524   -11.4205  (kJ/mol)
Vir-YZ                      -1.9249       0.64    242.692    1.12329  (kJ/mol)
Vir-ZX                     0.950694        1.6    238.288    1.08255  (kJ/mol)
Vir-ZY                     -1.95265       0.63    242.687    1.01663  (kJ/mol)
Vir-ZZ                      2041.17        3.7    380.984   -13.4212  (kJ/mol)
Pres-XX                    -18.4655        2.5    161.082    1.12972  (bar)
Pres-XY                    -1.08653        1.4    102.088    -4.7904  (bar)
Pres-XZ                    0.653578       0.48     100.82    2.02039  (bar)
Pres-YX                    -1.08902        1.4    102.091   -4.80989  (bar)
Pres-YY                    -24.1422        3.3     164.16    4.77165  (bar)
Pres-YZ                      0.5815       0.69     102.37   0.440981  (bar)
Pres-ZX                    0.651943       0.48    100.807    2.01526  (bar)
Pres-ZY                    0.592773       0.69    102.367   0.484312  (bar)
Pres-ZZ                     16.8989        1.4    157.549    5.19032  (bar)
#Surf*SurfTen                479.521         30    2172.89    28.1119  (bar nm)
T-System                     499.727       0.25    10.6221    1.21064  (K)
Lamb-System                        1          0          0          0  ()
```

参考文献：R. Sakamaki *et al*., J. Chem. Phys., 134, 124708 (2011).

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

IV.物性算出

1. **結果解析 | 密度分布**をクリックし、デフォルトで選ばれる3つのファイルを開く。
2. **Draw**をクリックすると、z軸方向の密度分布が表示される。
3. 液相、気相それぞれの平衡密度を取得する際は、グラフ右下の**Options | Open Excel**をクリックし、csvファイルを生成し、各種のグラフソフトでフィッティングを行う。簡易的にグラフの区間平均を求めたいときは、**Options | Calculate Average**を使う。



Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.

最後に

- 各機能の詳細を調べたい方はユーザマニュアルを参照してください。

ユーザマニュアル

Winmostar 講習会の風景

- 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Winmostar基礎講習会へご登録、基礎編以外のチュートリアルについては個別講習会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、まずよくある質問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

Copyright 2008-2021 X-Ability Co., Ltd.