

 winmostar チュートリアル

Gromacs

溶解度/ χ /DPDパラメータの算出

V10.0.0

2020年3月2日

株式会社クロスアビリティ

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。

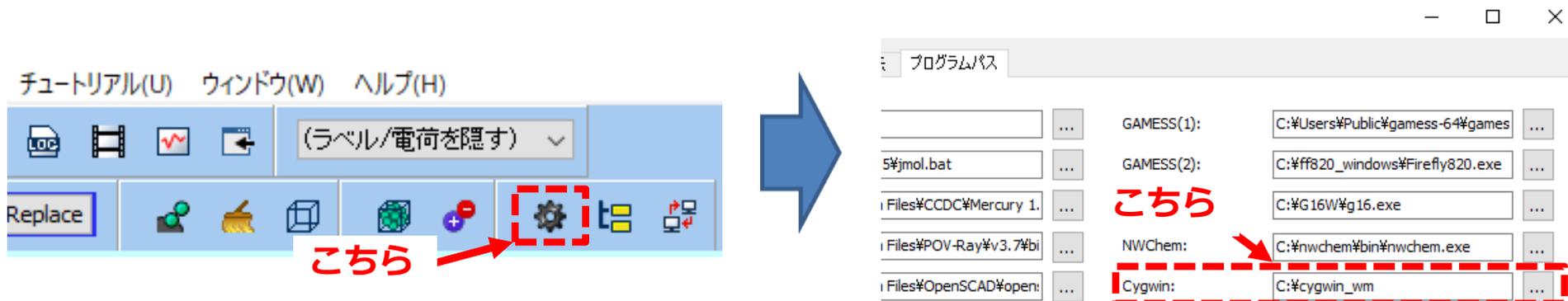
(6) 以下のいずれかのリンク先の手順でWinmostar用のCygwin環境 (cygwin_wmと呼びます) を構築します。

[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 \(非推奨、上級者向け\)](#)

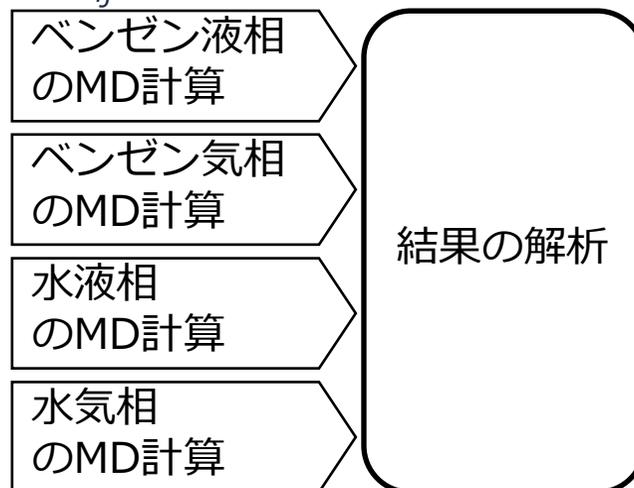
[Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合 \(ベータ版\)](#)

- 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。



概要

- 本チュートリアルでは、水・ベンゼンそれぞれの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：

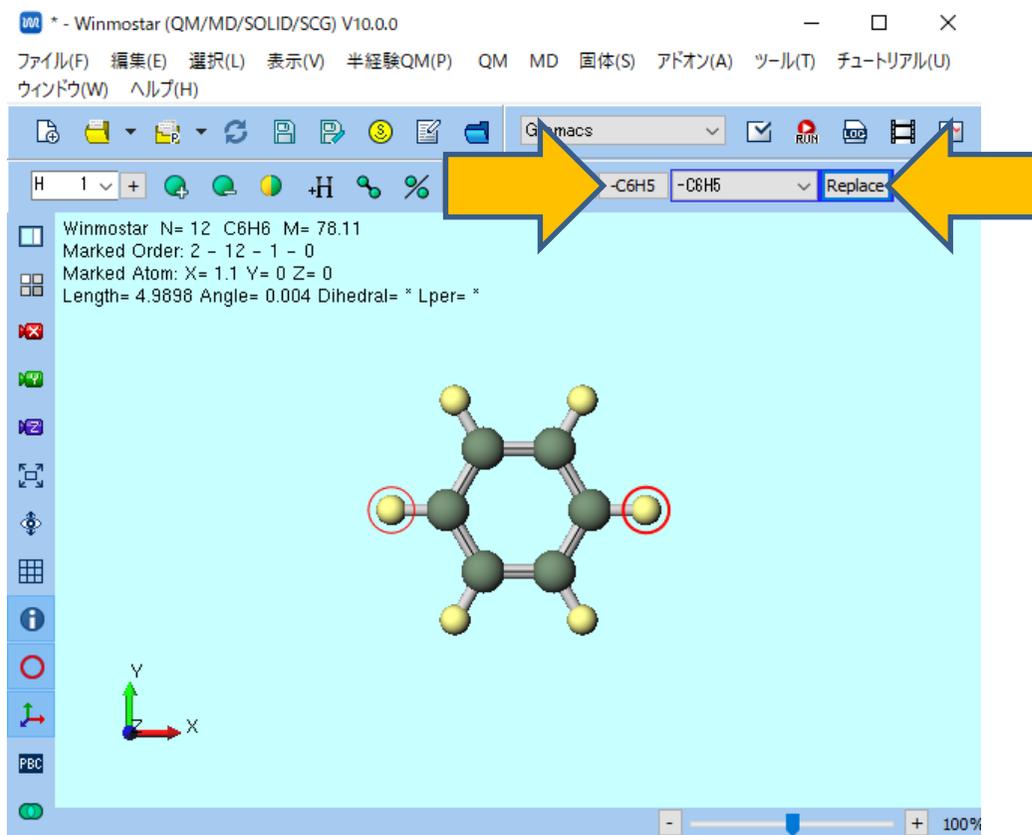
- 分子の種類、初期密度に応じて平衡化に必要なステップ数は変化します。
- “本計算”のステップ数が大きいほど、再現性が良く、信頼性の高い結果を取得することができます。
- 力場の種類、相互作用の計算条件も計算結果に大きく影響を与えます。
- 剛体モデルの水を用いるため本来なら水の気相の計算は不要ですが、現在のWinmostar™の仕様上エネルギーファイルが必要なため計算を実施します。

I. 成分1の液相のMD計算（モデリング）

ここでは成分1をベンゼンとする。

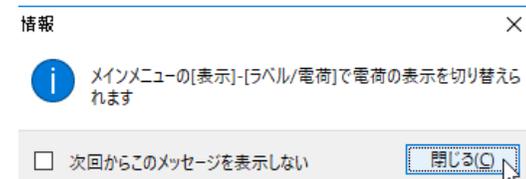
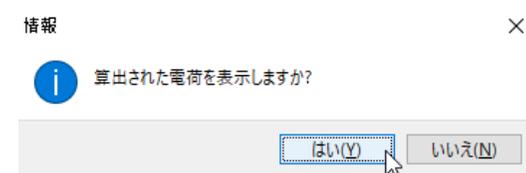
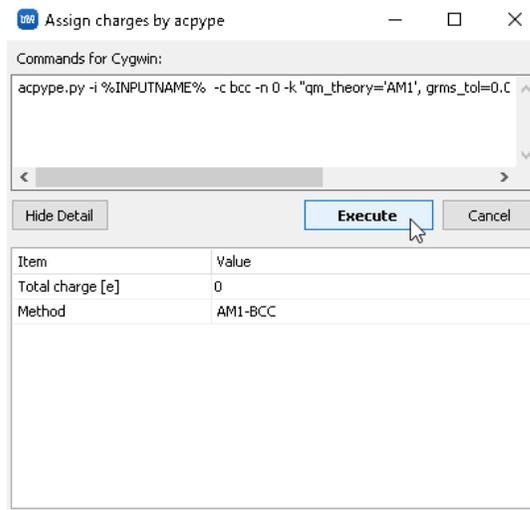
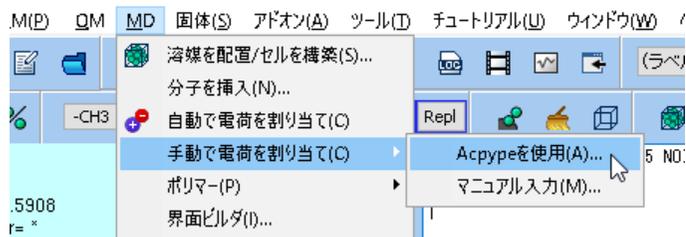
1. -C6H5ボタンをクリックする。

2. Replaceボタンをクリックすることでベンゼンが作成される。



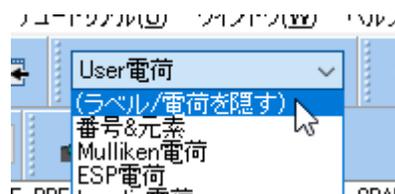
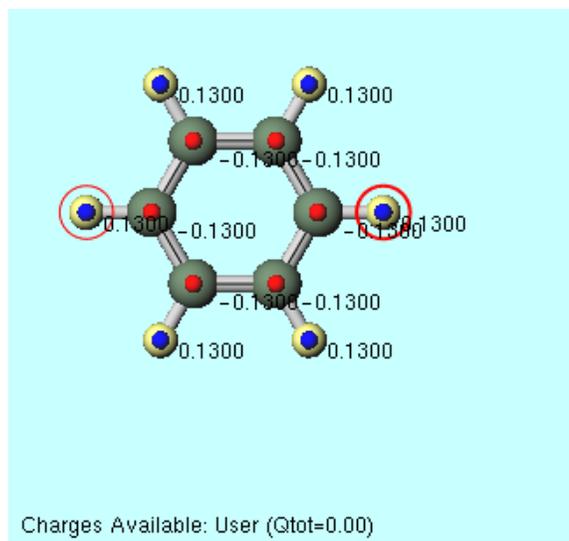
I. 成分1の液相のMD計算（モデリング）

1. MDメニュー | 手で電荷を割り当て | Acpypeを使用をクリックする。
2. Assign charges by acpypeウィンドウでExecuteボタンを押す。
3. 情報ダイアログが2回出現したらいずれもはいボタンを押す。



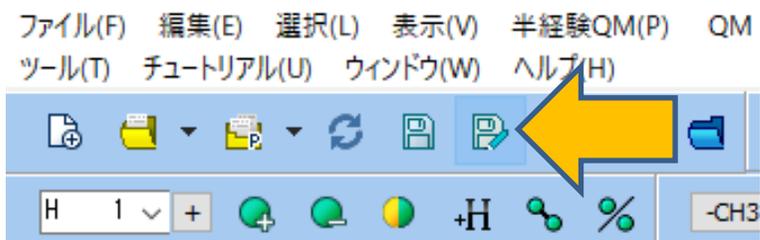
I. 成分1の液相のMD計算（モデリング）

1. 分子表示エリア下部に**Charges Avail: User**と表示され、割り当てられた電荷が表示されることを確認する。
2. ラベル/電荷プルダウンメニューで**(ラベル/電荷を隠す)**を選択し、電荷を非表示にする。



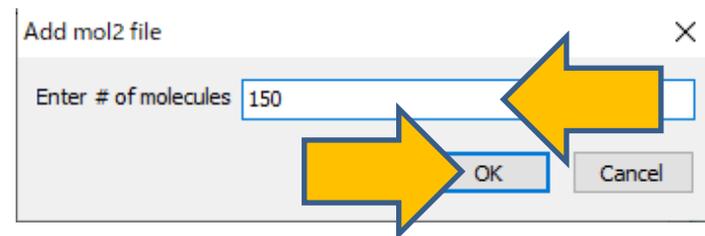
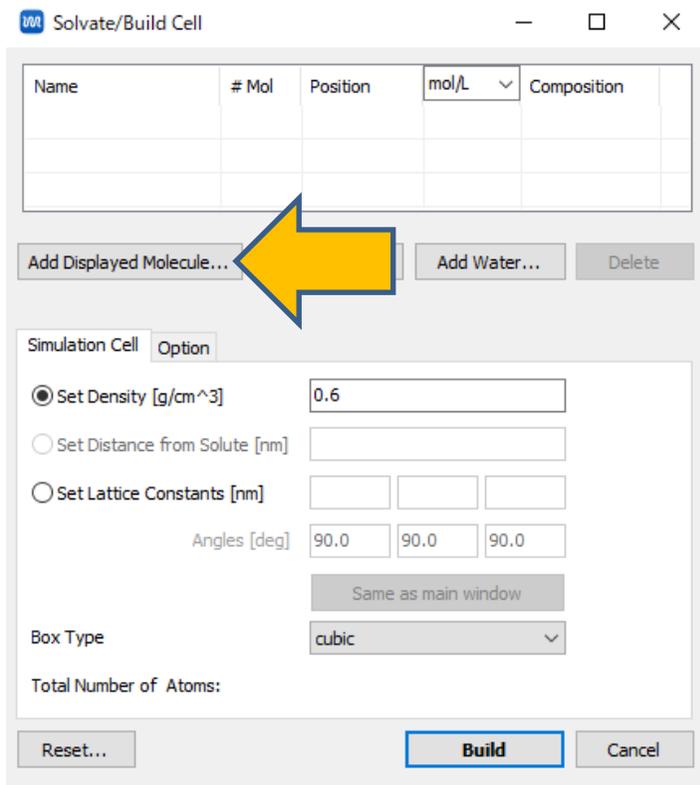
I. 成分1の液相のMD計算（モデリング）

1.  名前を付けて保存をクリックする。
2. benzene.mol2として保存する。



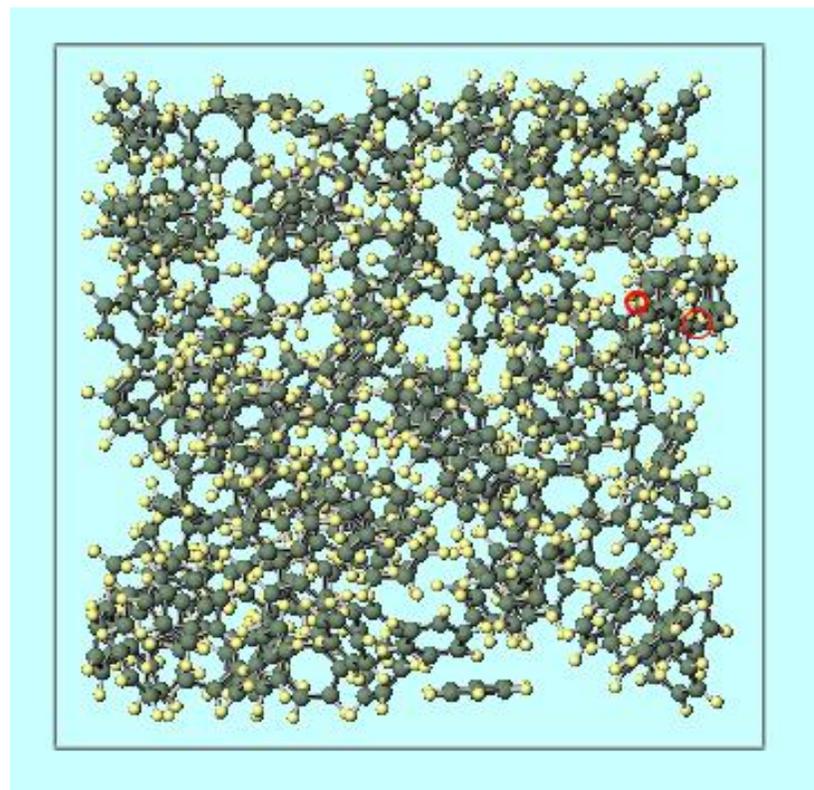
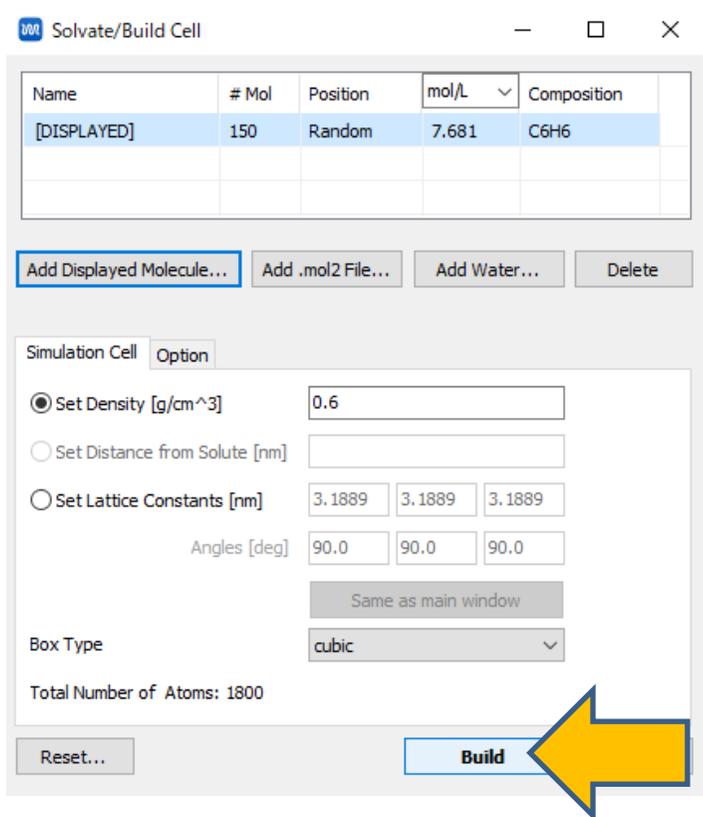
I. 成分1の液相のMD計算（系の作成）

1.  溶媒を配置/セルを構築をクリックする。
2. Add Displayed Moleculeをクリックする。
3. Enter # of moleculesに150と入力しOKをクリックする。



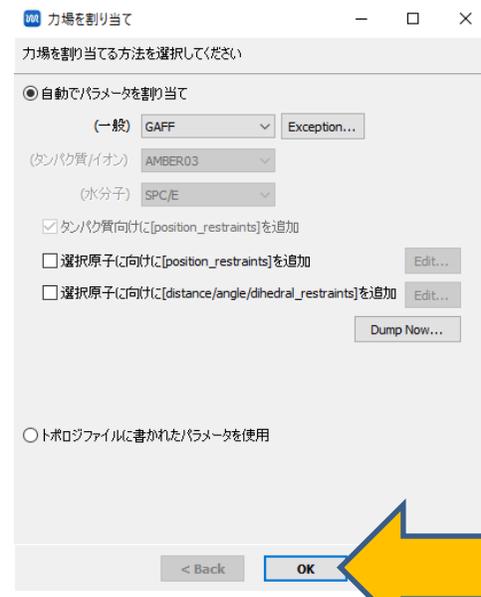
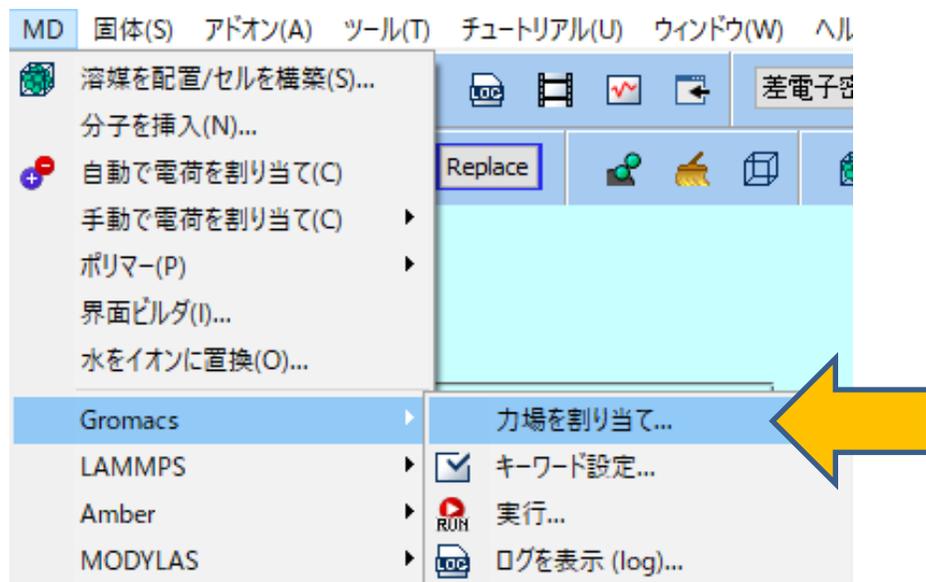
I. 成分1の液相のMD計算（系の作成）

1. **Build**をクリックすると右図のような系が作成される。



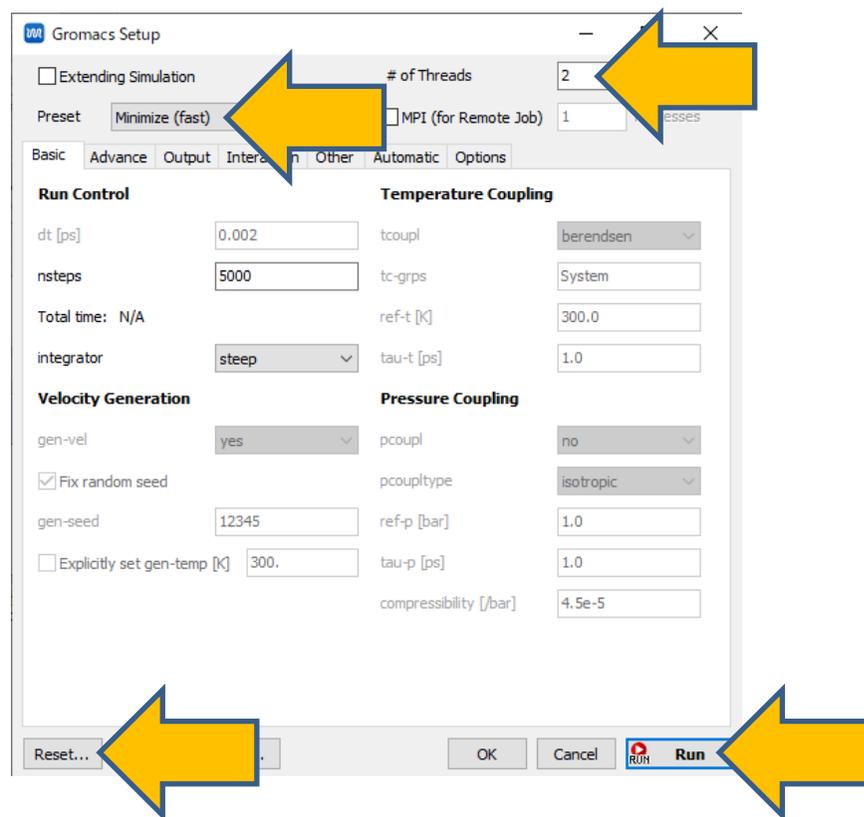
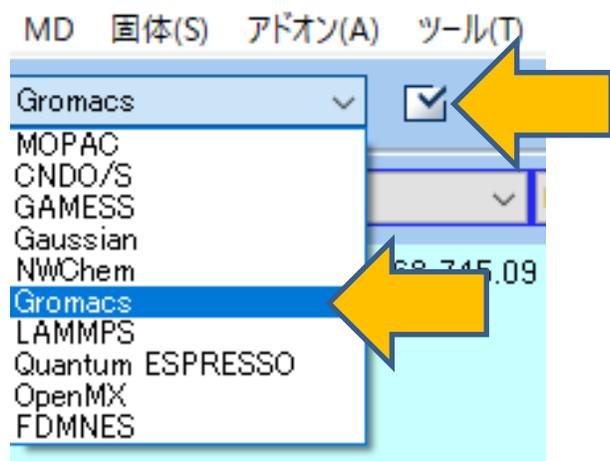
I. 成分1の液相のMD計算（平衡化1）

1. MD | Gromacs | カ場を割り当てをクリックする。
2. カ場を割り当てウィンドウでOKをクリックすると、設定したカ場が割り当てられる。



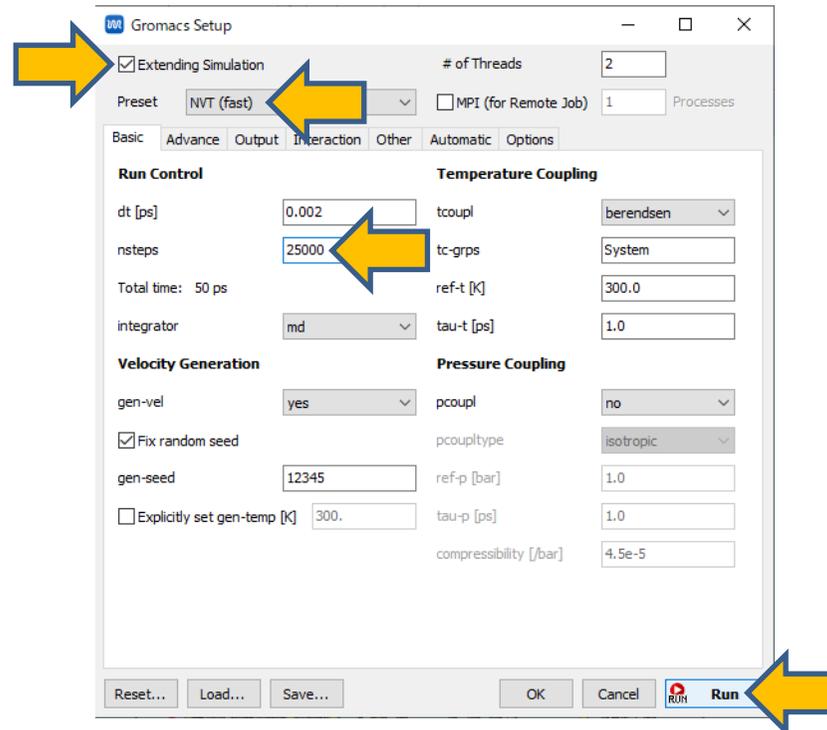
I. 成分1の液相のMD計算（平衡化1）

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. **Preset**に**Minimize (fast)**を指定する。
4. **Run**をクリックする。ファイル名を**c6h6_liquid.gro**, **c6h6_liquid.top**として保存する。



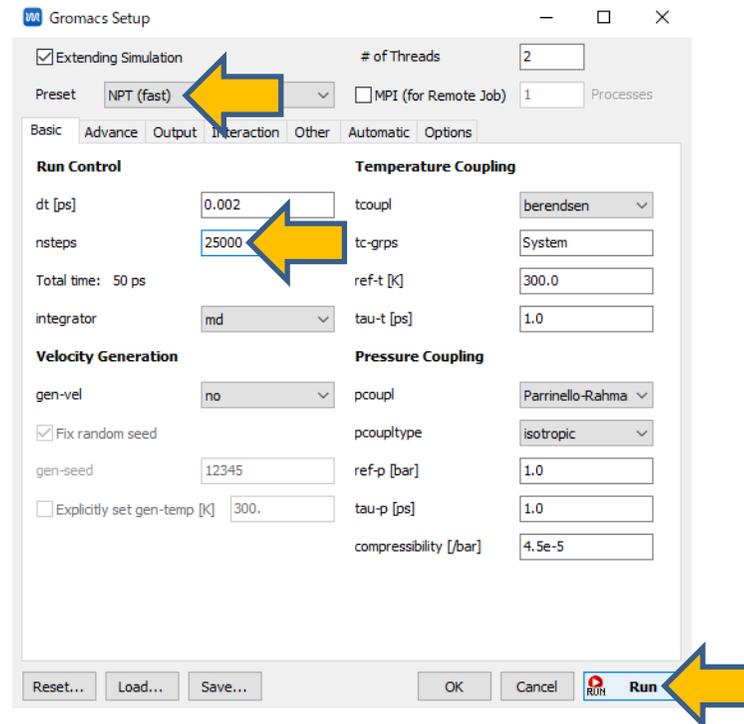
I. 成分1の液相のMD計算（平衡化2）

1. 計算終了後、 キーワード設定をクリックする。
2. Extending Simulationにチェックを入れる。
3. PresetにNVT (fast)を指定する。
4. Basicタブにてnstepsを25000に変更する。
5. Runをクリックする。



I. 成分1の液相のMD計算（平衡化3）

1. 計算終了後、 **キーワード設定**をクリックする。
2. **Preset**に**NPT (fast)**を指定する。
3. **Basic**タブにて**nsteps**を**25000**に変更する。
4. **Run**をクリックする。

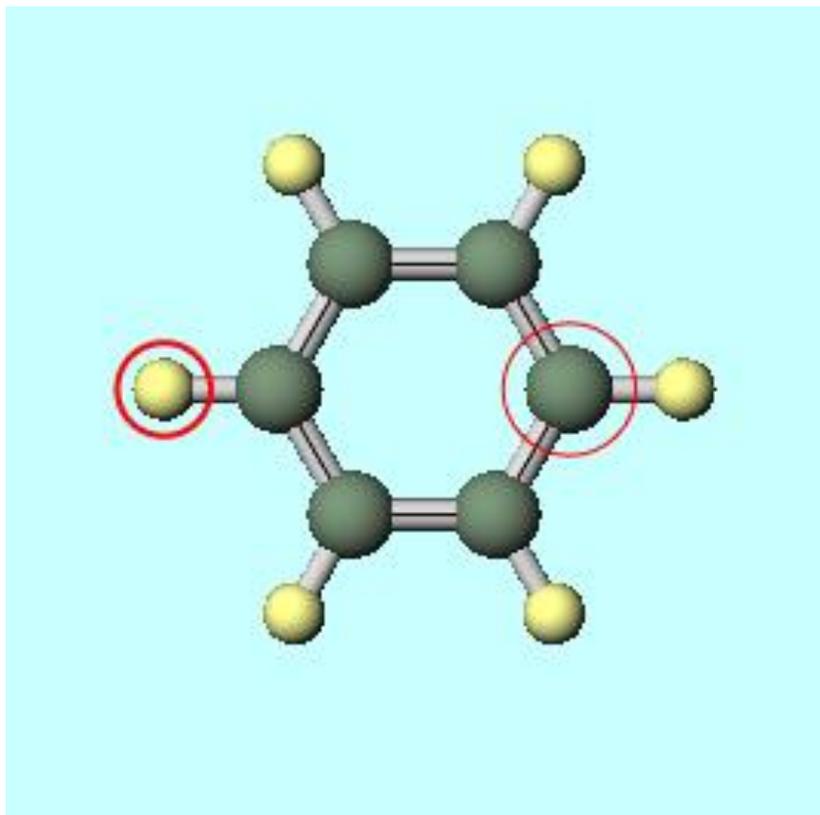


I. 成分1の液相のMD計算（本計算）

1. 計算終了後、キーワードは変更せず、 **実行**をクリックし、本計算を実行する。

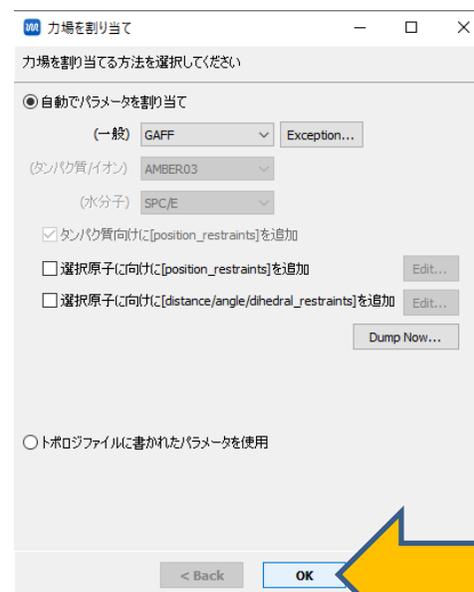
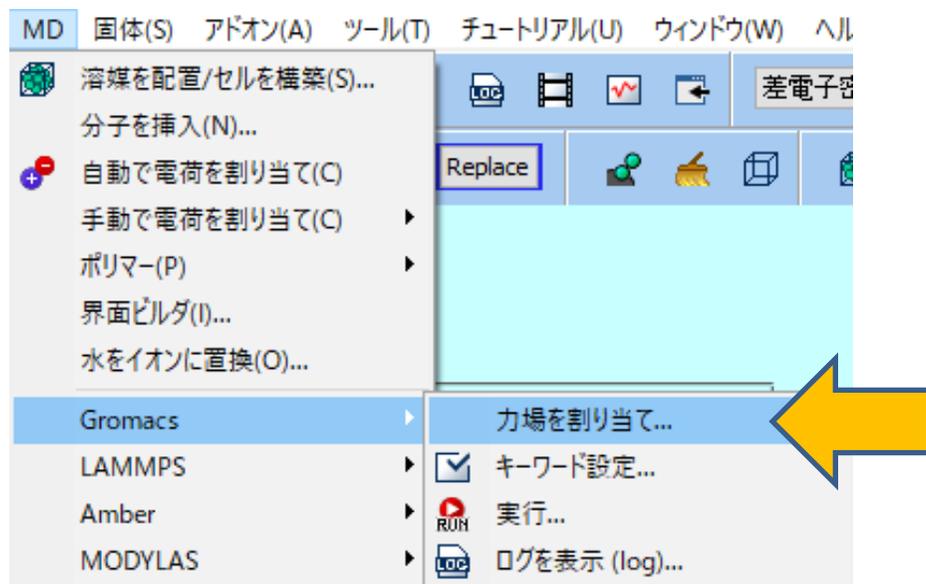
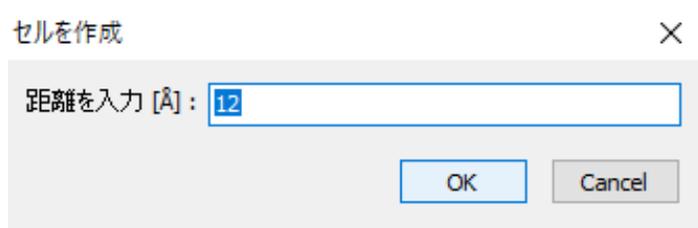
II. 成分1の気相のMD計算（系の作成）

1.  開くをクリックする。
2. 先ほど保存したbenzene.mol2を開く。



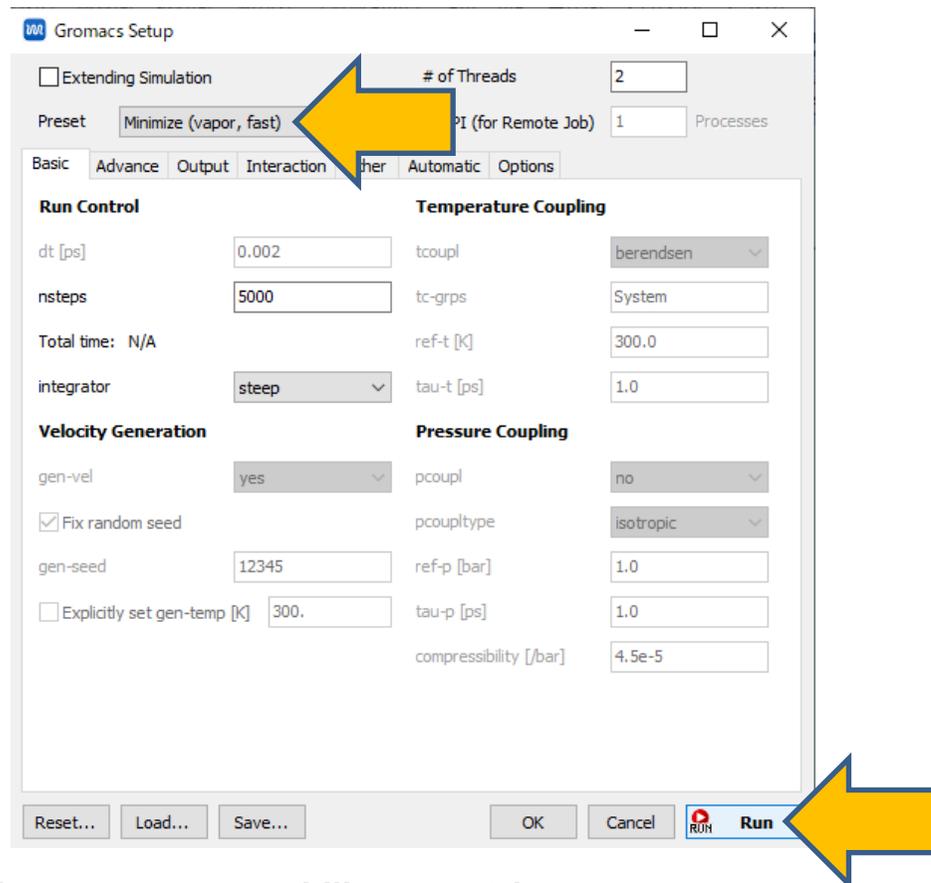
II. 成分1の気相のMD計算（平衡化1）

1. MD | Gromacs | カ場を割り当てをクリックする。
2. 表示されるセルを作成ウインドウにて、距離を入力に12を指定しOKをクリックする。
3. カ場を割り当てウインドウでOKをクリックすると、設定したカ場が割り当てられる。



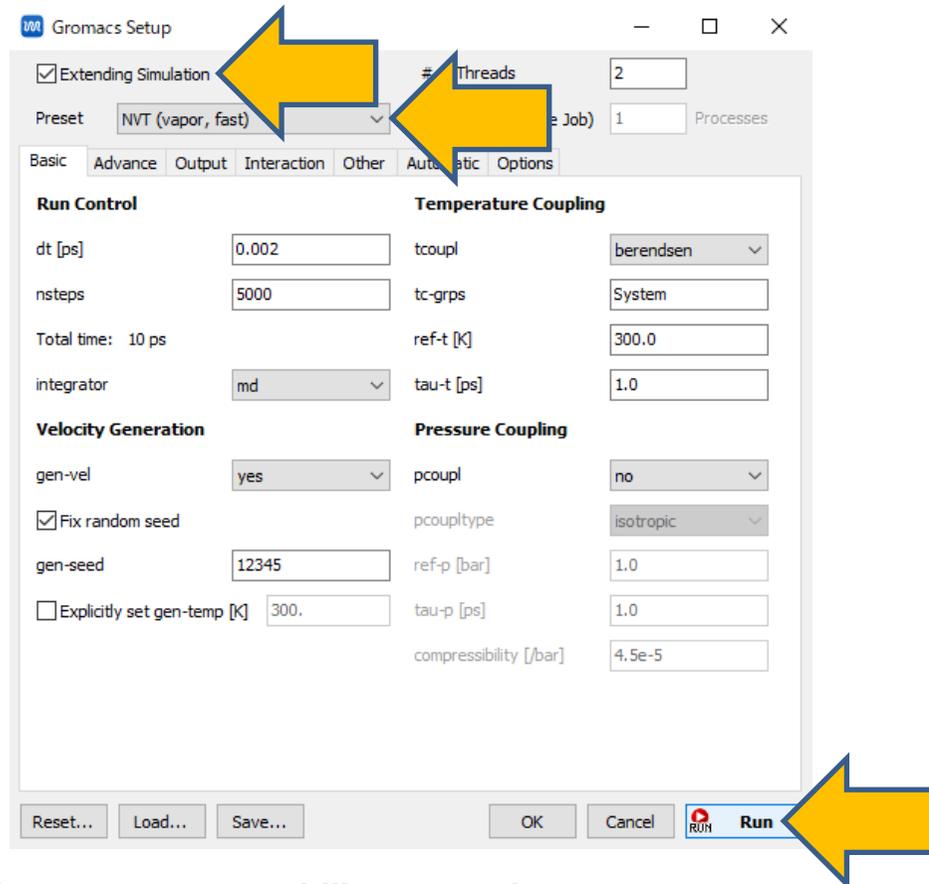
II. 成分1の気相のMD計算（平衡化1）

1.  キーワード設定をクリックする。
2. **Reset**をクリックし、**Preset**に**Minimize (vapor, fast)**を指定する。
3. **Run**をクリックする。ファイル名を**c6h6_vapor.gro**, **c6h6_vapor.top**として保存する。



II. 成分1の気相のMD計算（平衡化2）

1. キーワード設定をクリックする。
2. Extending Simulationにチェックを入れる。
3. PresetにNVT (vapor, fast)を指定する。
4. Runをクリックする。



II. 成分1の気相のMD計算（本計算）

1. キーワード設定をクリックする。
2. **Basic**タブにて**gen-vel**を**no**に設定する。
3. **Run**をクリックする。

Basic

Run Control

dt [ps]

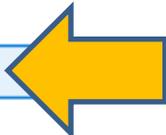
nsteps

Total time: 10 ps

integrator

Velocity Generation

gen-vel

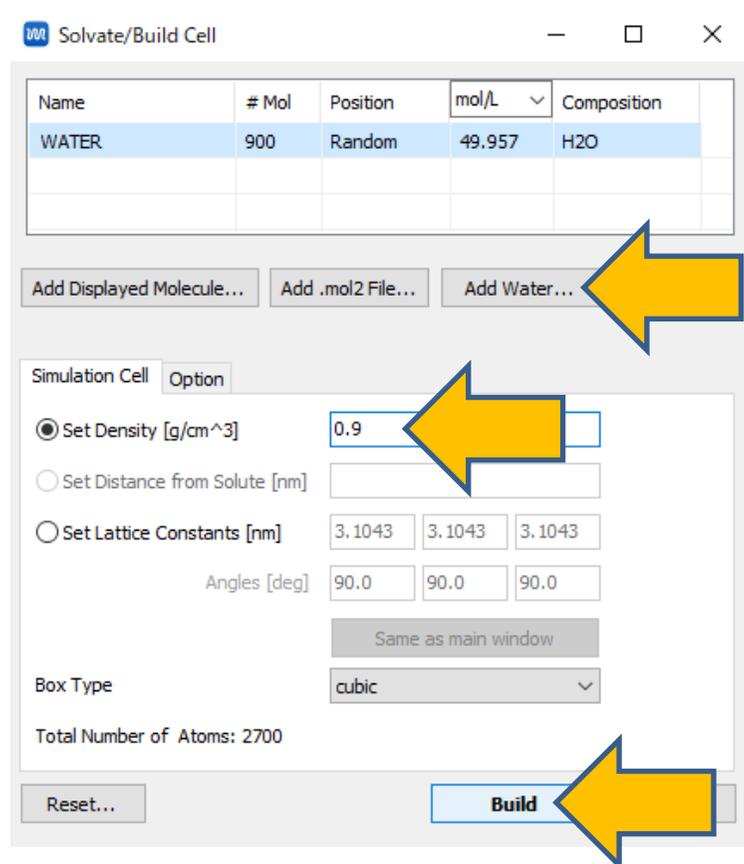


III.成分2のMD計算

- 成分1の溶解度パラメータのみ必要なときは「IV.結果解析」に進む。
- χ ・DPDパラメータが必要なときは、成分2の液相・気相の計算を実施する。
- ここでは成分2として水を取り上げる。

III.成分2の液相のMD計算（系の作成）

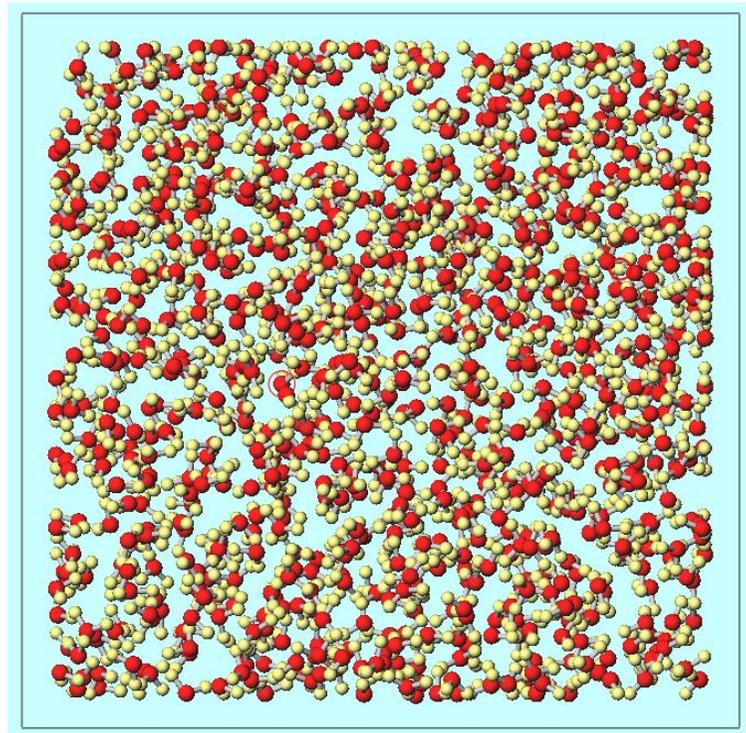
1.  溶媒を配置/セルを構築をクリックする。
2. Add WaterをクリックしEnter # of moleculesに900と入力し、OKをクリックする。
3. Set Densityに0.9と入力し、Buildをクリックする。



III.成分2の液相のMD計算

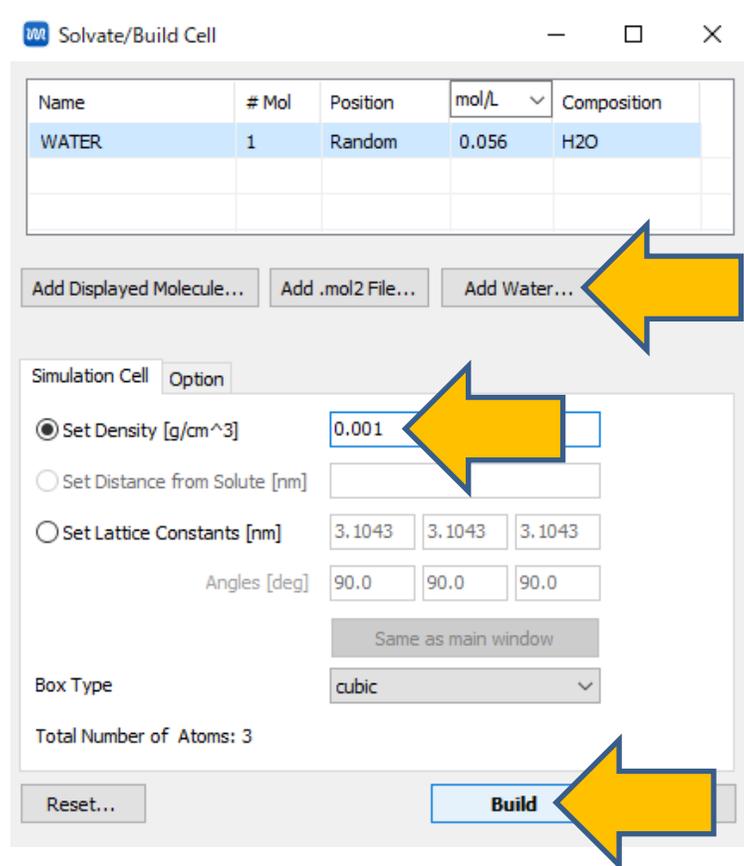
作成された系は下図のようになる。

1. 成分1の液相のMD計算（平衡化1～3および本計算）の手順に従い、成分2の液相の計算も実施する。
2. 保存する座標ファイル名とトポロジファイル名はそれぞれ **h2o_liquid.gro**, **h2o_liquid.top**とする。



III.成分2の気相のMD計算（系の作成）

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1と入力し、OKをクリックする。
3. Set Densityに0.001と入力し、Buildをクリックする。



Name	# Mol	Position	mol/L	Composition
WATER	1	Random	0.056	H2O

Add Displayed Molecule... Add .mol2 File... Add Water...

Simulation Cell Option

Set Density [g/cm³] 0.001

Set Distance from Solute [nm]

Set Lattice Constants [nm] 3.1043 3.1043 3.1043

Angles [deg] 90.0 90.0 90.0

Same as main window

Box Type cubic

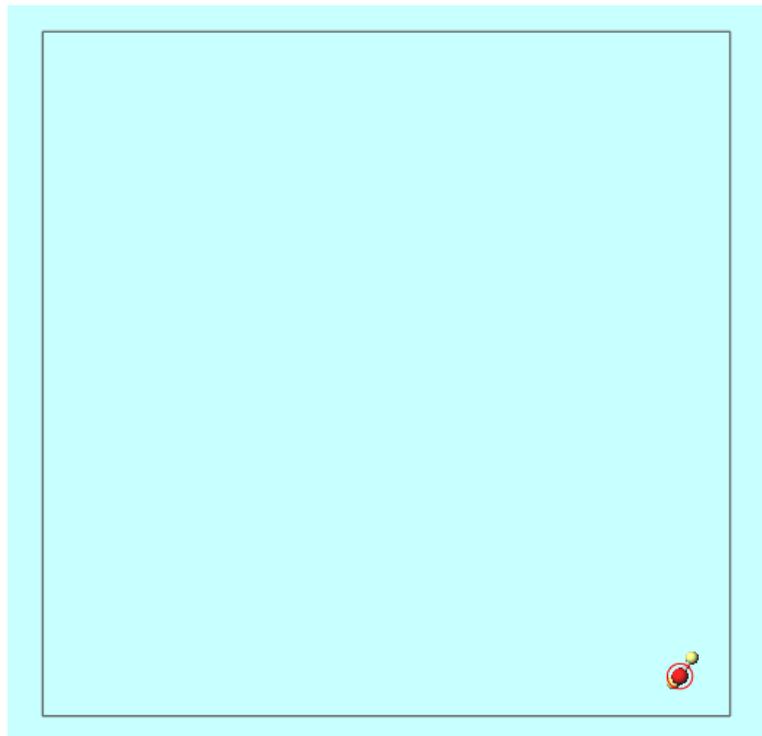
Total Number of Atoms: 3

Reset... Build

III.成分2の気相のMD計算

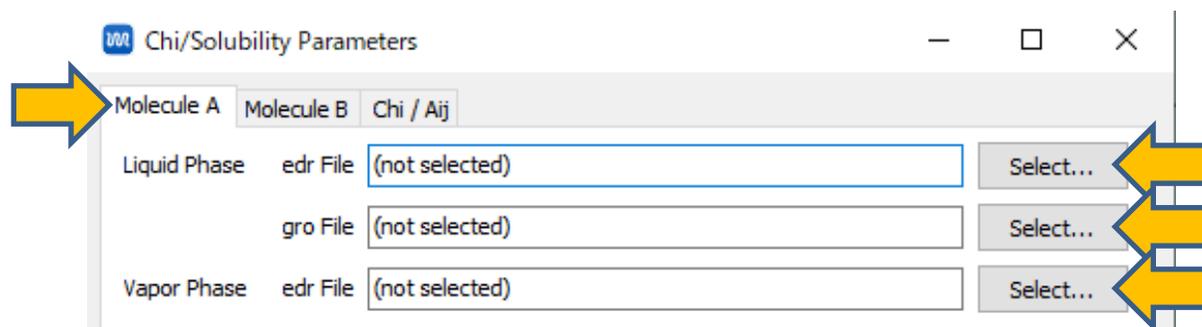
作成された系は下図のようになる。

1. 成分1の気相のMD計算（平衡化1～2および本計算）の手順に従い、成分2の気相の計算も実施する。
2. 保存する座標ファイル名とトポロジファイル名はそれぞれ **h2o_vapor.gro**, **h2o_vapor.top**とする。



IV. 結果解析

1.  結果解析 | χ /DPDパラメータをクリックする。
2. 表示されるウインドウにて、**Molecule Aタブ**をクリックする。
3. **Liquid Phase**のedr Fileの**Select**をクリックし、**c6h6_liquid_gmx_tmp**以下の**gmx_tmp_mdrun.edr**を選択する。
4. **Liquid Phase**のgro Fileの**Select**をクリックし、**c6h6_liquid_gmx_tmp**以下の**gmx_tmp_mdrun.gro**を選択する。
5. **Vapor Phase**のedr Fileの**Select**をクリックし、**c6h6_vapor_gmx_tmp**以下の**gmx_tmp_mdrun.edr**を選択する。



IV. 結果解析

1. 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_{ij} は以下の場所に出力される。
文献値等と比較の際には、単位に注意する。

The screenshot shows the 'Chi/Solubility Parameters' window with the following data table:

Property	Symbol	Unit	Value
Molar Volume	Vma	[m ³ /mol]	9.5544e-05
Temperature	T	[K]	302.552
Isothermal Compressibility	Kt	[J/m ³]	5.80594e-09
Dimensionless Compressibility	$K=Vma/(R*T*Kt)$	[-]	6.54179
DPD Parameter	$A_{ii}=(K-1)/(0.2*\rho)$	[-]	5.48692
Liquid Potential Energy	E _l	[kJ/mol]	22.4125
Vapor Potential Energy	E _v	[kJ/mol]	46.5639
Cohesive Energy	dE=E _v -E _l	[kJ/mol]	24.15140
Solubility Parameter	$\delta_a=\sqrt{dE/Vma}$	[(J/cm ³) ^{1/2}]	15.89899

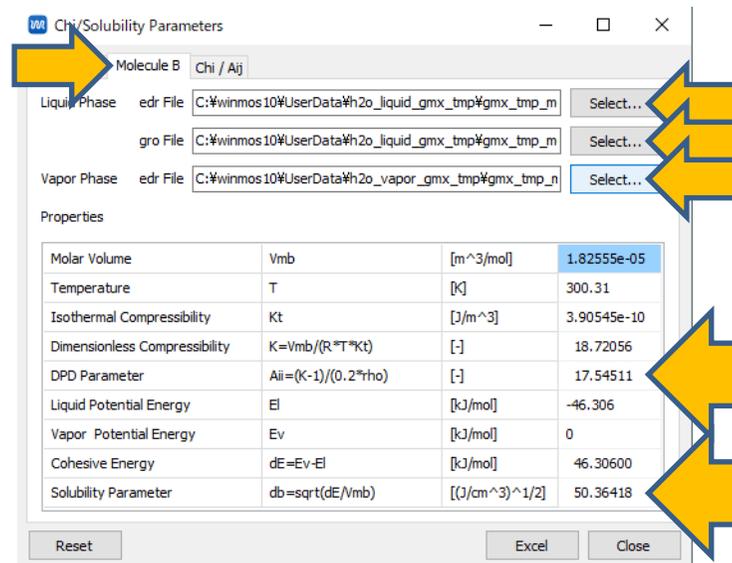
Annotations in the image:

- A yellow arrow points to the 'DPD Parameter' row (5.48692) with the callout box: 同種粒子間 DPDパラメータ
- A yellow arrow points to the 'Solubility Parameter' row (15.89899) with the callout box: 溶解度パラメータ

IV. 結果解析

χ およびDPDパラメータ A_{ij} を求める場合

1. Molecule Bタブをクリックする。
2. Liquid Phaseのedr FileのSelectをクリックし、h2o_liquid_gmx_tmp以下のgmx_tmp_mdrun.edrを選択する。
3. Liquid Phaseのgro FileのSelectをクリックし、h2o_liquid_gmx_tmp以下のgmx_tmp_mdrun.groを選択する。
4. Vapor Phaseのedr FileのSelectをクリックし、h2o_vapor_gmx_tmp以下のgmx_tmp_mdrun.edrを選択する。



同種粒子間
DPDパラメータ

溶解度パラメータ

IV. 結果解析

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

Chi/Solubility Parameters

Molecule A Molecule B Chi / Aij

Density for DPD [-] 5.

Properties

(Aij-Aii) / Chi		[-]	1.45000
Volume of a Bead	Vb=Min(Vma,Vmb)	[m ³ /mol]	1.8256E-005
Chi Parameter	Chi=Vb*(da-db) ² /RT	[-]	9.51507
DPD Parameter	Aij-Aii	[-]	13.79685

Citation

R. D. Groot and P. B. Warren, J. Chem. Phys., 107 (11), 1997.

Reset Excel Close

χパラメータ

異種粒子間
DPDパラメータ

V. 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。
2. 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、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。

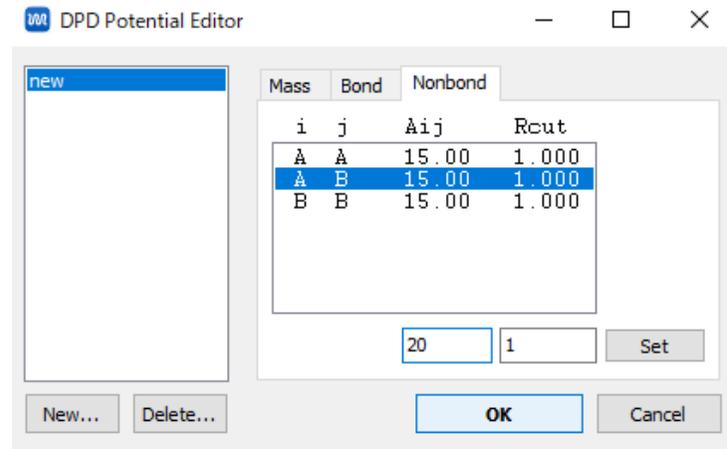
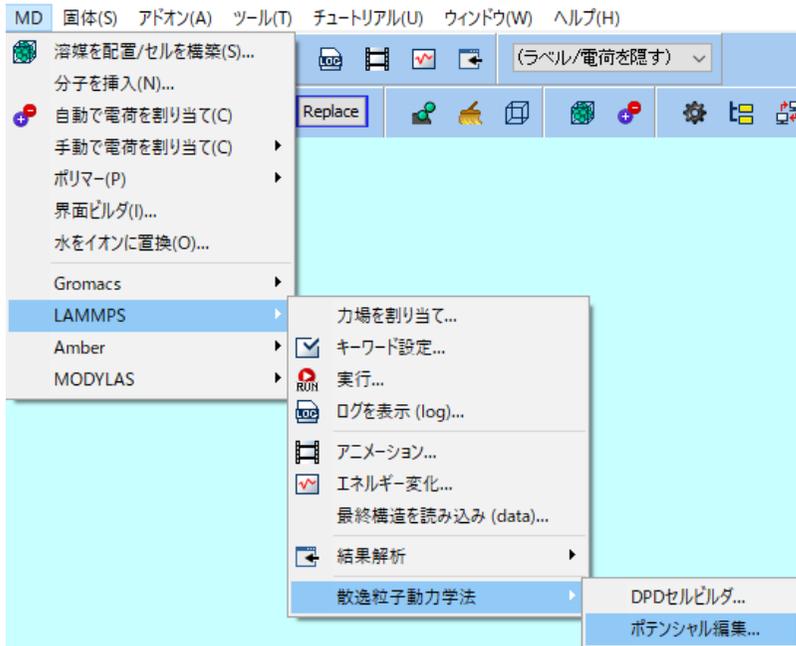
The image shows two screenshots from the Winmostar software. The top screenshot shows the 'Tools' menu with 'DPDセルビルダ...' selected, indicated by a yellow arrow. The bottom screenshot shows the 'Chi/Solubility Parameters' dialog box with the 'Chi / Aij' tab selected. The 'Density for DPD [-]' field contains the value '5.', also indicated by a yellow arrow. Below it is a table of properties:

(Aij-Aii) / Chi		[-]
Volume of a Bead	$V_b = \text{Min}(V_{ma}, V_{mb})$	[m ³ /mol]
Chi Parameter	$\text{Chi} = V_b * (d_a - d_b)^2 / RT$	[-]
DPD Parameter	Aij-Aii	[-]

The bottom screenshot also shows the 'DPD Cell Builder' dialog box. The 'Monomers Available' list contains A, B, C, D, E, F. 'A' and 'B' are selected. The 'Monomers Used' list contains 'B x 1'. The 'Polymers Used' list contains 'A x 1000' and 'B x 1000'. The 'Density' field contains '5.0', indicated by a yellow arrow.

V. DPD計算の設定

- 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 A_{ij} 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 A_{ij} は、上で採用した同種粒子間DPDパラメータで、取得した異種粒子間DPDパラメータ ($A_{ij} - A_{ji}$) を足した値を入力する。
- 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。



この例では、同種粒子間パラメータにH₂Oの値を採用し、小数点以下の値は四捨五入している。

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