#### **M** winmostar チュートリアル

# Gromacs 溶解度/x/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

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



- 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<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。

#### 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
 cygwin wmをビルドする場合 (非推奨、上級者向け)

<u>Cygwinの代わりにWindows Subsystem for Linuxを用いる場合</u>(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)	- L	^
🚾 🛱 🚾 📑 (ラベル/電荷を隠す) 🗸	GAMESS(1): C:¥Users¥Public¥gamess-64¥gamest 5¥jmol.bat GAMESS(2): C:¥ff820_windows¥Firefly820.exe	s
Replace 🕜 🍝 🗇 🚳 🔗 🏘 🖽 🖧	Files¥CCDC¥Mercury 1.        C:¥G16W¥g16.exe         Files¥POV-Ray¥v3.7¥bi        NWChem:       C:¥nwchem¥bin¥nwchem.exe	]
655	Files¥OpenSCAD¥open: Cygwin: C:¥cygwin_wm	



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<sub>ii</sub>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。

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。



- 1. MDメニュー | 手動で電荷を割り当て | Acpypeを使用をクリックする。
- 2. Assign charges by acpypeウインドウで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。

		145	田住の			<b>T</b> -			±	
,M( <u>P</u> )	<u>0</u> M	MD	<b>固</b> 体( <u>5</u> )	アトオン( <u>A</u> )	(D	ナユー	トリノフル(	U) '	フィントワ	<u>(W)</u> (
ľ			溶媒を配置	置/セルを構築	(S)		Ħ	~~	-	(ラベ)
			分子を挿え	ν(N)						
6	-CH3	ð	自動で電荷	苛を割り当て(の	)	Repl		<u></u>	ø	<b>(</b>
			手動で電荷	苛を割り当て(C	D) 🕨	A	:pypeを	使用(	A) N	5 NO:
			ポリマ−(P)		Þ	₹.	ニュアル、	入力(M	VI) <sup>1</sup> /3	
.5908 r= *	i		界面ビルダ	(I)	L	1				

<			>
Hide Detail	Ð	ecute	Cancel
Item	Value		
Total charge [e]	0		
Method	AM1-BCC		



- 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。



- 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. **御 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。

🔤 Solvate/Build Cell			-	-		×
Name	# Mol	Position	mol/L ~	Compo	sition	
Add Displayed Molecule	$\mathbf{X}$	] [	Add Water		Delet	e
Simulation Cell Option						
• Set Density [g/cm^3]	l	0.6				
O Set Distance from Sol	lute [nm]					
◯ Set Lattice Constants	s [nm]					
Ang	les [deg]	90.0 90	).0 90.0	)		
		Same as	main window			
Box Type		cubic		$\sim$		
Total Number of Atoms:						
Reset			Build		Cano	el



#### 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。

🚾 Solvate/Build Cell					-		×
Name	# Mol	Position	mol/L	~	Compo	osition	
[DISPLAYED]	150	Random	7.681		C6H6		
Add Displayed Molecule	. Add	.mol2 File	Add \	Vater		Delet	e
Simulation Cell Option							
• Set Density [g/cm^3]	I	0.6					
O Set Distance from So	lute [nm]						
O Set Lattice Constants	; [nm]	3.1889 3	. 1889	3.18	389		
Ang	les [deg]	90.0 9	0.0	90.(	)		
		Same a	s main wi	ndow	I.		
Box Type		cubic			$\sim$		
Total Number of Atoms: 1800							
Reset		[	В	uild	$\overline{\langle}$		



#### I. 成分1の液相のMD計算(平衡化1)

- 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。





# I. 成分1の液相のMD計算(平衡化1)

- 1. ソルバー覧からGromacsを選択し、 M 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。



Preset Minimize (fast)		MPI (for Remote Job)	1 esses
asic Advance Output	Intera n Other	Automatic Ontions	
Run Control		Temperature Coupling	
it [ps]	0.002	tcoupl	berendsen $\vee$
isteps	5000	tc-grps	System
Total time: N/A		ref-t [K]	300.0
ntegrator	steep 🗸 🗸	tau-t [ps]	1.0
elocity Generation		Pressure Coupling	
jen-vel	yes 🗸 🗸	pcoupl	no 🗸
Fix random seed		pcoupltype	isotropic $\vee$
gen-seed	12345	ref-p [bar]	1.0
Explicitly set gen-temp [	<] 300.	tau-p [ps]	1.0
		compressibility [/bar]	4.5e-5
	_		

# 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。

M Grom	acs Setup				– 🗆 X
Exter	nding Simulati	on		# of Threads	2
Preset	NVT (fast		$\sim$	MPI (for Remote Job)	1 Processes
Basic	Advance Ou	Itput Interaction	Other	Automatic Options	
Run Co	ntrol			Temperature Coupling	g
dt [ps]		0.002		tcoupl	berendsen $\sim$
nsteps		25000		tc-grps	System
Total tim	ne: 50 ps	V		ref-t [K]	300.0
integrati	or	md	$\sim$	tau-t [ps]	1.0
Velocit	y Generatio	n		Pressure Coupling	
gen-vel		yes	$\sim$	pcoupl	no 🗸
Fix ra	andom seed			pcoupltype	isotropic $\vee$
gen-see	d	12345		ref-p [bar]	1.0
Explice Explicit	citly set gen-l	emp [K] 300.		tau-p [ps]	1.0
				compressibility [/bar]	4.5e-5
Reset	Load	Save		OK	Cancel Run Run

# 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。

Gromacs Setup			– 🗆 X
Extending Simulation		# of Threads	2
Preset NPT (fast)	~	MPI (for Remote Job)	1 Processes
Basic Advance Output	t Interaction Other	Automatic Options	
Run Control		Temperature Coupling	ı
dt [ps]	0.002	tcoupl	berendsen $\checkmark$
nsteps	25000	tc-grps	System
Total time: 50 ps		ref-t [K]	300.0
integrator	md $\sim$	tau-t [ps]	1.0
Velocity Generation		Pressure Coupling	
gen-vel	no 🗸	pcoupl	Parrinello-Rahma $ \smallsetminus $
Fix random seed		pcoupltype	isotropic $\checkmark$
gen-seed	12345	ref-p [bar]	1.0
Explicitly set gen-temp	[K] 300.	tau-p [ps]	1.0
		compressibility [/bar]	4.5e-5
Reset Load	Save	OK	Cancel RM Run

#### 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 | 力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. 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。

	セルを作成	×	加速 力場を割り当て - ロ ×	-
			力場を割り当てる方法を選択してください	
	距離を入力 [Å]: <mark>12</mark>		● 自動でパラメータを割り当て	
			(一般) GAFF V Exception	
		OK Cancel	(タンパク質/イオン) AMBER03 ~	
			(水分子) SPC/E ~	
			✓ タンパク質向けに[position_restraints]を追加	
MD		· 제품 - 티코바이아 · 주 · · · · · · · · · · · · · · · · ·	□ 選択原子(こ向け(こ[position_restraints]を追加 Edit	
MD	回14(S) アトイフ(A) ツール(T)	デュートリンル(U) ジョントリ(W) ヘル	□ 選択原子(こ向けに[distance/angle/dihedral_restraints]を追加 Edit	
	溶媒を配置/セルを構築(S)	- ▶ ▶ ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ● ●	Dump Now	
	分子を挿入(N)			
	点動であたまましょう(の)	Replace - A fr 6		
œ	日期で电何を割り目((C)		○トボロシファイノルに書かれたパラメータを使用	
	手動で電荷を割り当て(C) ▶			
	ポリマ−(P) ト			4
	界面ビルダ(I)		< Back OK	
	シャンシン 一次をくたいに実施(の)			-
	小を11ノに直接(0)		Winmostar	~
	Gromacs 🔹 🕨	力場を割り当て	Williostar	^
	LAMMPS •	☑ キーワード設定	正常に力場が設定されました	
	Amber •	♀ 実行		
	MODYLAS •	🚾 ログを表示 (log)		OK

# II. 成分1の気相のMD計算(平衡化1)

- 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。

Gromacs Setup			- 🗆 ×
Extending Simulatio		# of Threads	2
Preset Minimize (v	apor, fast)	인 (for Remote Job)	1 Processes
asic Advance Out	put Interaction ther	Automatic Options	
Run Control		Temperature Couplin	g
dt [ps]	0.002	tcoupl	berendsen $\sim$
nsteps	5000	tc-grps	System
Total time: N/A		ref-t [K]	300.0
integrator	steep $\checkmark$	tau-t [ps]	1.0
Velocity Generation		Pressure Coupling	
gen-vel	yes $\lor$	pcoupl	no 🗸
Fix random seed		pcoupltype	isotropic $\vee$
gen-seed	12345	ref-p [bar]	1.0
Explicitly set gen-te	mp [K] 300.	tau-p [ps]	1.0
		compressibility [/bar]	4.5e-5
Reset Load	Save	ОК	Cancel 🔐 Run

# II. 成分1の気相のMD計算(平衡化2)

- 1. **ビ 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。

Gromacs Setup		– 🗆 X
Extending Simulation	# Threads	2
Preset NVT (vapor, fast)	e Job	) 1 Processes
Basic Advance Output Interaction Othe	er Auto atic Options	
Run Control	Temperature Coupli	ng
dt [ps] 0.002	tcoupl	berendsen $\checkmark$
nsteps 5000	tc-grps	System
Total time: 10 ps	ref-t [K]	300.0
integrator md	v tau-t [ps]	1.0
Velocity Generation	Pressure Coupling	
gen-vel yes	~ pcoupl	no 🗸
Fix random seed	pcoupltype	isotropic $\vee$
gen-seed 12345	ref-p [bar]	1.0
Explicitly set gen-temp [K] 300.	tau-p [ps]	1.0
	compressibility [/bar]	4.5e-5
Reset Load Save	ОК	Cancel Run

# II. 成分1の気相のMD計算(本計算)

- 1. **ビ 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	Advance	Output	Interaction	Other				
Run Control								
dt [ps]		[	0.002					
nsteps	l.	[	5000					
Total t	ime: 10 ps							
integra	ator	[	md	$\sim$				
Veloc	ity Genera	ation						
gen-ve	el	[	no					

#### 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。
- X・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. 
  御 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。

Solvate/Build Cell				-		×
Name	# Mol	Position	mol/L ~	Compos	sition	
WATER	900	Random	49.957	H2O		
					1	
Add Displayed Molecule.	Add	.mol2 File	Add Wate	r		
Simulation Cell Option						
• Set Density [g/cm^3]	]	0.9				
○ Set Distance from So	lute [nm]					
O Set Lattice Constants	s [nm]	3.1043 3	. 1043 3. 1	043		
Ang	jles [deg]	90.0 9	0.0 90.	D		
		Same as	s main windov	I.		
Box Type		cubic		$\sim$		
Total Number of Atoms:	2700					
Reset		[	Build			

# 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。
- 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. **御 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。

Solvate/Build Cell				-	I		×
Name	# Mol	Position	mol/L	~ 0	Compos	ition	
WATER	1	Random	0.056	н	120		
Add Displayed Molecule.	Add	.mol2 File	Add \	Nater	$\langle$		
Simulation Cell Option							
• Set Density [g/cm^3]	]	0.001					
O Set Distance from So	lute [nm]						
O Set Lattice Constants	s [nm]	3.1043 3	. 1043	3,104	3		
Ang	jles [deg]	90.0 9	0.0	90.0			
		Same a	s main wi	indow			
Box Type		cubic			$\sim$		
Total Number of Atoms:	3						
Reset		[	В	uild			

# 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。
- 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。



- 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。
- 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。



 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<sub>ii</sub>は以下の場所に出力される。 <u>文献値等と比較の際には、単位に注意する。</u>

Molecule A Molecule B Chi / Aij					
Liquid Phase edr File C:¥winm	os10¥UserData¥c6h6_liquid	_gmx_tmp¥gmx_tmp_	Select		
gro File C:¥winm	os10¥UserData¥c6h6_liquid	_gmx_tmp¥gmx_tmp_i	Select		
/apor Phase edr File C:¥winm	os10¥UserData¥c6h6_vapo	r_gmx_tmp¥gmx_tmp_	Select		
Properties					
Molar Volume	Vma	[m^3/mol]	9.5544e-05		
Temperature	Т	[K]	302.552		
Isothermal Compressibility	Kt	[J/m^3]	5.80594e-09	_	
Dimensionless Compressibility	K=Vma/(R*T*Kt)	E)	6.54179		同種粒子問
DPD Parameter	Aii=(K-1)/(0.2*rho)	[-]	5.48692		
Liquid Potential Energy	E	[kJ/mol]	22.4125		
Vapor Potential Energy	Ev	[kJ/mol]	46.5639		
Cohesive Energy	dE=Ev-El	[kJ/mol]	24.15140		
Solubility Parameter	da=sqrt(dE/Vma)	[(J/cm^3)^1/2]	15.89899		溶解度パラメー <sup>,</sup>

xおよびDPDパラメータA<sub>ii</sub>を求める場合

- 1. Molecule B97 をクリックする。
- 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。
- 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。

ChySolubility Parameters		-		×		
Molecule B Chi / Aij						
quit Phase edr File C:¥winr	nos10¥UserData¥h2o_liquid_	_gmx_tmp¥gmx_tmp_m	Select			
gro File C:¥winr	nos10¥UserData¥h2o_liquid_	_gmx_tmp¥gmx_tmp_m	Select			
apor Phase edr File C:¥winr	nos10¥UserData¥h2o_vapor	_gmx_tmp¥gmx_tmp_r	Select			
operties						
Molar Volume	Vmb	[m^3/mol]	1.82555e-05			
Temperature	т	[K]	300.31			
Temperature Isothermal Compressibility	T Kt	[K] [J/m^3]	300.31 3.90545e-10		Г	
Temperature Isothermal Compressibility Dimensionless Compressibility	Т Кt К=Vmb/(R*T*Kt)	[K] [J/m^3] [-]	300.31 3.90545e-10 18.72056			
Temperature Isothermal Compressibility Dimensionless Compressibility DPD Parameter	T Kt K=Vmb/(R*T*Kt) Aii=(K-1)/(0.2*rho)	[K] [J/m^3] [-] [-]	300.31 3.90545e-10 18.72056 17.54511			同種粒子間
Temperature isothermal Compressibility Dimensionless Compressibility DPD Parameter .iquid Potential Energy	T           Kt           K=Vmb/(R*T*Kt)           Aii=(K-1)/(0.2*rho)           El	[K] [J/m^3] [-] [-] [kJ/mol]	300.31 3.90545e-10 18.72056 17.54511 -46.306			同種粒子間 DPDパラメー
Temperature Isothermal Compressibility Dimensionless Compressibility DPD Parameter Liquid Potential Energy Vapor Potential Energy	T           Kt           K=Vmb/(R*T*Kt)           Aii=(K-1)/(0.2*rho)           El           Ev	[X] [J/m^3] [-] [-] [kJ/mol] [kJ/mol]	300.31 3.90545e-10 18.72056 17.54511 -46.306 0			同種粒子間 DPDパラメー
Temperature Isothermal Compressibility Dimensionless Compressibility DPD Parameter Liquid Potential Energy Vapor Potential Energy Cohesive Energy	T           Kt           K=Vmb/(R*T*Kt)           Aii=(K-1)/(0.2*rho)           El           Ev           dE=Ev-El	[K] [J/m^3] [-] [-] [kJ/mo] [kJ/mo] [LJ/mo]	300.31 3.90545e-10 18.72056 17.54511 -46.306 0 46.30600			同種粒子間 DPDパラメー

**1.** Chi/Aijタブに、XパラメータおよびDPDパラメータ(A<sub>ij</sub> - A<sub>ii</sub>)が出力される。

M Chi/Solubility Parameters		-	- 🗆	×	
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]	1.8256E-005	5	
Chi Parameter	Chi=Vb*(da-db)^2/RT	[-]	9.51507		
DPD Parameter	Aij-Aii	[-]	13.79685		異種粒子間
Ch. K.					DPDパラメータ
Citation					
R. D. Groot and P. B. Warren, J.	Chem. Phys., 107 (11), 199	7.			
Death		<b>F</b> actor			
Reset		Exce	Clos	e	

# 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。
- 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。

MD 🖪	固体(S)	アドオン(A)	ツール	(T)	Ŧ:	1-トリフ	アル(U)	ウィンド	<sup>:</sup> ウ(W)	ヘルブ	(H)			
(2) 溶	媒を配置	/セルを構築 (N)	(S)		6	) <b> </b>	•	•	(5	ベル/電	荷を隠	す) 〜		
。 。 1111111111111111111111111111111111	」 動で電荷	(い) を割り当て((	C)		Rep	lace	2	4	Ø	<b>(</b> )	e	- 42	te	∲⊒ ₽₹
Ŧ	動で電荷	を割り当て((	C)	۲										
ポリ	IJ⊿–(b)			F										
界	面ビルダ(	)												
水	をイオンに	置換(0)												_
Gr	romacs			F										
LA	AMMPS			×		力場を	割り当て							
An	mber			۲	$\mathbf{M}$	キーワ-	ド設定							
M	ODYLAS			•	RUN	実行								
						ログを得	表示 (lo	g)						
					Ħ	アニメー	-ション							
					≁~	エネル・	ギー変化							
						最終權	載造を読	み込み	(data)	.				
					+	結果創	罕析			•				
						散逸和	立子動力	学法		•	DF	ロセルビノ	レダ	$\boldsymbol{<}$
					-	_		-			<b>ಸ</b> ೆ	テンシャル	<b><b></b>攘集…</b>	

olecule A Molecule B	Chi / Aij		
ensity for DPD [-]		5.	1
operties			
(Aij-Aii) / Chi			[-]
(Aij-Aii) / Chi /olume of a Bead		Vb=Min(Vma,Vmb)	[-] [m^3/mol]
(Aij-Aii) / Chi Volume of a Bead Chi Parameter		Vb=Min(Vma,Vmb) Chi=Vb*(da-db)^2/RT	[-] [m^3/mol] [-]



#### V. 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 $A_{ij}$ 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 ( $A_{ij} - A_{ij}$ )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。

MD	) 固体(S) アドオン(A) ツー	ll(T)	チュートリン	י (U) אוק	ウィンドウ	(W) ∧J	/プ(H)				🚾 DPD Potentia	al Editor				_		×
۲	溶媒を配置/セルを構築(S)	- 1		· · · ·	-	(ラベル)	(電荷を隠	す) ~			_							
	分子を挿入(N)			•			-			***	new		Mass	Bond	Nonbond			
ð	自動で電荷を割り当て(C)		Replace		<b>.</b>		9 🕈	- 22	CH	<b>₽</b> ¥			i	i	Aii	Reut		
	手動で電荷を割り当て(C)												Δ	Δ	15 00	1 000	1	
	ポリマー(P)	-											A	B	15.00	1.000		
	界面ビルダ(I)	- 1											В	В	15.00	1.000		
	水をイオンに置換(O)																	
	Gromacs	→					_											
	LAMMPS	•	力場	割り当て.														
	Amber	•	→ +-ワ	-ド設定											20	1	Set	
	MODYLAS	) ا	🎝 実行.															
_			■ ログを	表示 (log)							New Dele	ete			0	к	Cano	cel
		F	<b>7</b> 2×	-ション														
		5	🗠 エネル	ギー変化									_	17.4				-
			最終核	構造を読み	·込み (d	lata)					この例で	では、	同	種粒	立子間	バラ	メー	タ
			록 結果魚	解析		•					$ (CH_2OO) $	の値を	ē採	用し	、小	数点」	以下	の
			散逸精	立子動力的	学法	Þ	DF	PDセルビ	レダ			全石 7	λι.	$\overline{7}$	١Z			
							ポ	テンシャル	編集						י <b>ג</b> י			



• 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