

Winmostar - Gromacs

Tutorial 4

混合溶媒系(「溶媒として保存」機能を使用)

V5.014

株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2015/7/23

修正履歴

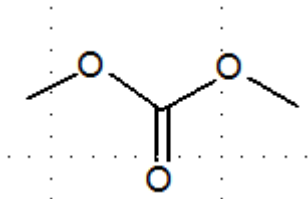
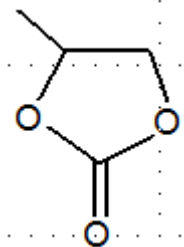
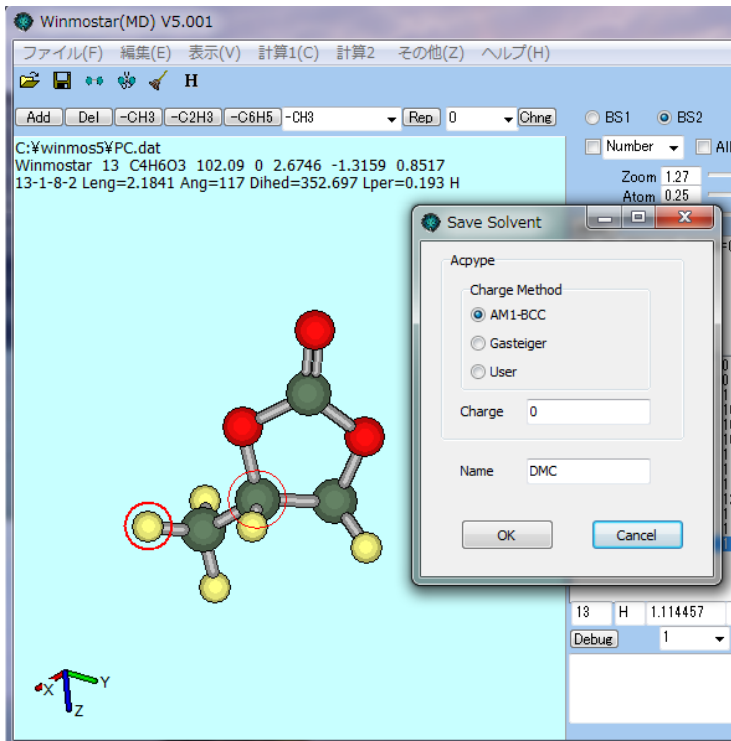
2015/7/23版

- (スライド2) 修正履歴を追加
- (全てのスライド) スライド番号およびフッターを追加
- (スライド7、12、19、21)MDP Run parameters画面の差し替え
- (スライド8、10、11、13、17)画面の差し替え
- (スライド20)エネルギー変化画面の差し替え
- (スライド23)「トラジェクトリーを確認手順」を追加

Contents

- ① はじめに
- ② PCとDMCの作成と登録
- ③ 混合溶媒系の作成とエネルギー極小化(最急降下法)計算の実行
- ④ 温度一定(nvt)のMD計算による構造緩和
- ⑤ 温度・圧力一定(npt)MD計算による凝集化
- ⑥ 温度・圧力一定(npt)MDの本計算

① はじめに(「溶媒として保存」機能について)



PC (Propylene carbonate) DMC (Dimethyl carbonate)

本チュートリアルでは、題材として非水電解液として多用されるPCとDMC(左下図参照)の混合溶媒系を取り上げ、計算条件の設定からGromacsによる計算実行までを行う。

「Winmostar V5 MDオプション」には、作成した任意の分子に対してGromacsのトポロジーファイル(itpファイル)と分子構造ファイル(groファイル)を生成させる「溶媒として保存」という機能がある。本機能では原子電荷の設定と力場のアサインにacpype¹⁾を内部で使用している。GAFF²⁾とOPLS-AA/L³⁾の両方の力場ファイル(トポロジーファイル: itp)が自動生成されるため、MDの計算条件設定画面でいずれかの指定が可能である。

なおOPLS-AA/Lのitpファイル*⁴⁾には、非結合ポテンシャル(non-bonded potential)パラメータはOPLS-AA/Lであるが、結合ポテンシャル(bonded potential)パラメータにはGAFFが書き込まれるため注意のこと。なお、OPLS-AA/Lは分子によってアサインが不完全となることがあるため、必ずアサイン結果をitpファイルで確認すべきである。また、生成したitpファイルをテキストエディターで追加/修正することで、原子電荷やポテンシャルパラメータの変更が可能である。

1) acpype

<https://code.google.com/p/acpype/>

2) GAFF

J. Wang, W. Wang, P.A. Kollman and D.A. Case. Journal of Molecular Graphics and Modelling, 25, 247-260 (2006).; [J. Wang, R.M. Wolf, J.W. Caldwell, P.A. Kollman and D.A. Case. J. Comp. Chem., 25, 1157-1174 \(2004\).](#)

3) OPLS-AA/L

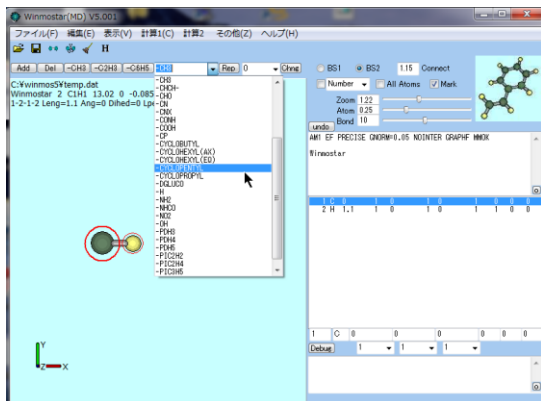
W. L. Jorgensen, D. S. Maxwell, and J. Tirado-Rives,; J. Am. Chem. Soc. 118, 11225-11236 (1996).; W. L. Jorgensen and N. A. McDonald, Theochem 424, 145-155 (1998).; W. L. Jorgensen and N. A. McDonald, J. Phys. Chem. B 102, 8049-8059 (1998).; R. C. Rizzo and W. L. Jorgensen, J. Am. Chem. Soc. 121, 4827-4836 (1999).; M. L. Price, D. Ostrovsky, and W. L. Jorgensen, J. Comp. Chem. (2001).; E. K. Watkins and W. L. Jorgensen, J. Phys. Chem. A 105, 4118-4125 (2001).; G. A. Kaminski, R.A. Friesner, J.Tirado-Rives and W.L. Jorgensen, J. Phys. Chem. B 105, 6474 (2001).

4) OPLS-AA/Lのitpファイル

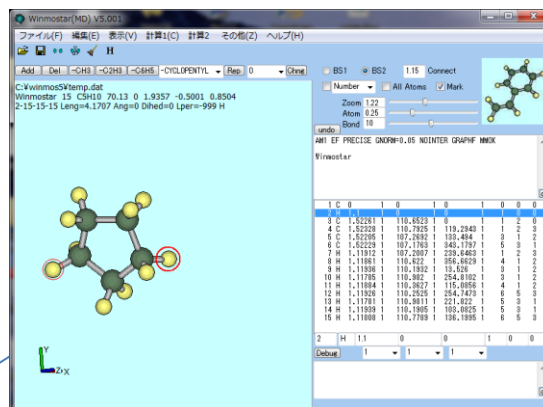
「溶媒として保存」したNameがaaa.datの場合、Winmostarインストールフォルダ直下のaaa_OPLS.itp

② PCとDMCの作成と登録

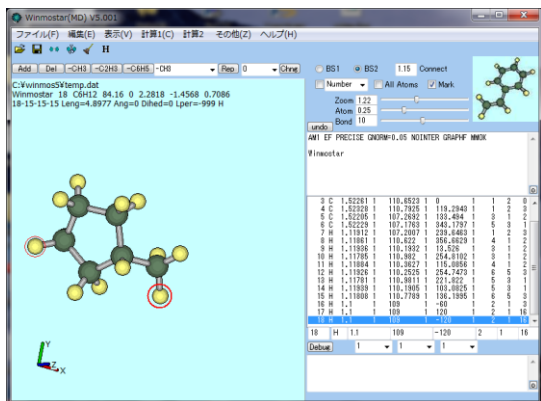
Winmostarを使って、PCを作成する



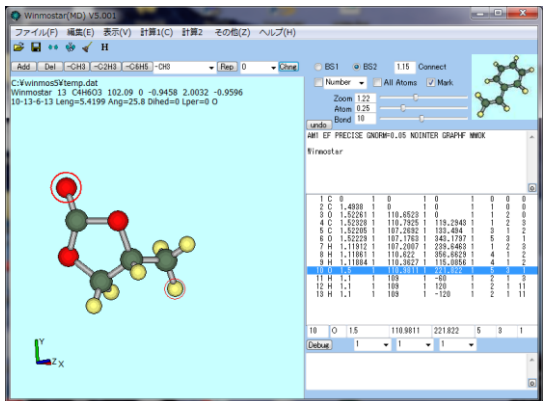
- CYCLOPENTYL
基を導入する



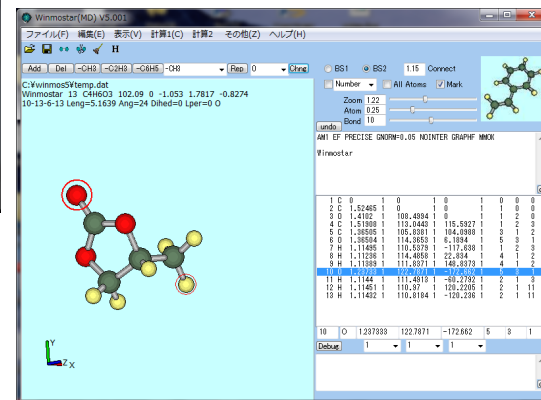
-CH3へ変更



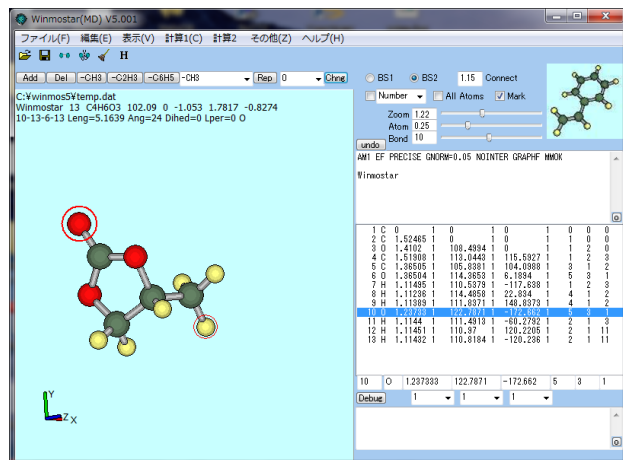
-HやCを適宜Oに
置き換え、余分
なHを削除する



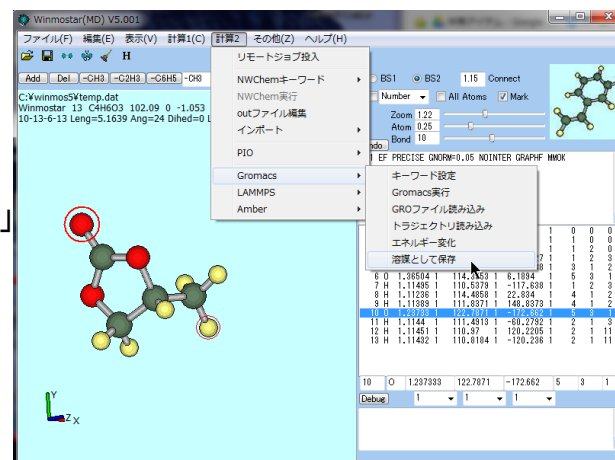
- クリーンをかける



PCを溶媒として保存する



「溶媒として保存」
を選択する

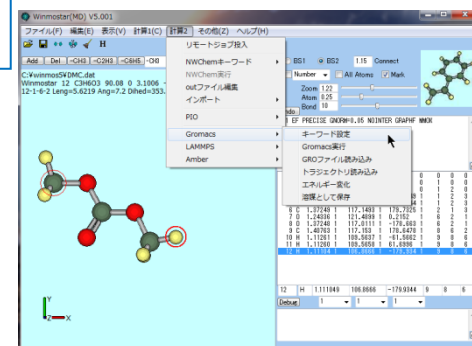


NameにPCと入力し[OK]をクリックする*。

PCが溶媒として登録される。

DMCについても同様に溶媒として登録する。

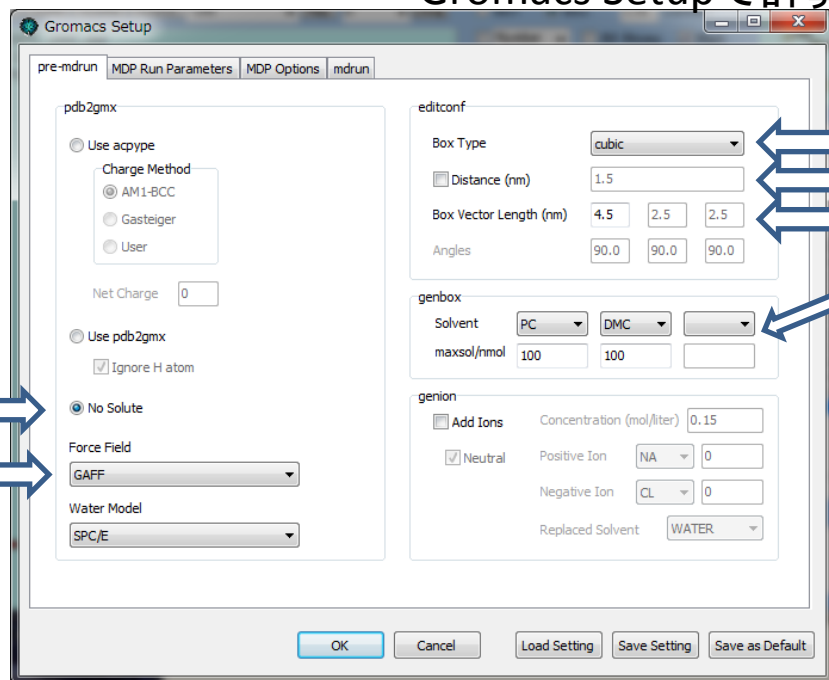
キーワード設定画面を起動させる



* GaussianなどのMO計算結果から原子電荷が求まっている場合は[Charge Method]で[User]を選択できる。

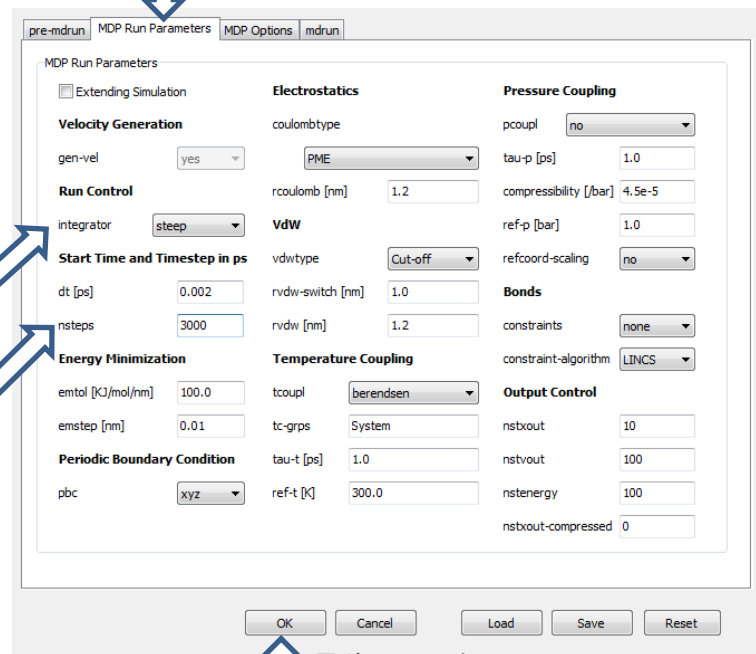
③ 混合溶媒系の作成とエネルギー極小化計算の実行

Gromacs Setupで計算条件を設定する



cubicを選択
Distanceのトグルを外す。
4.5 nmを入力
SolventにPCとDMCを選択し、maxsol/nmol
それぞれ100 分子を入力

[MDP Run Parameters]タブをクリック



steep (最急降下法)
を選択 (デフォルト)

3000ステップに変更

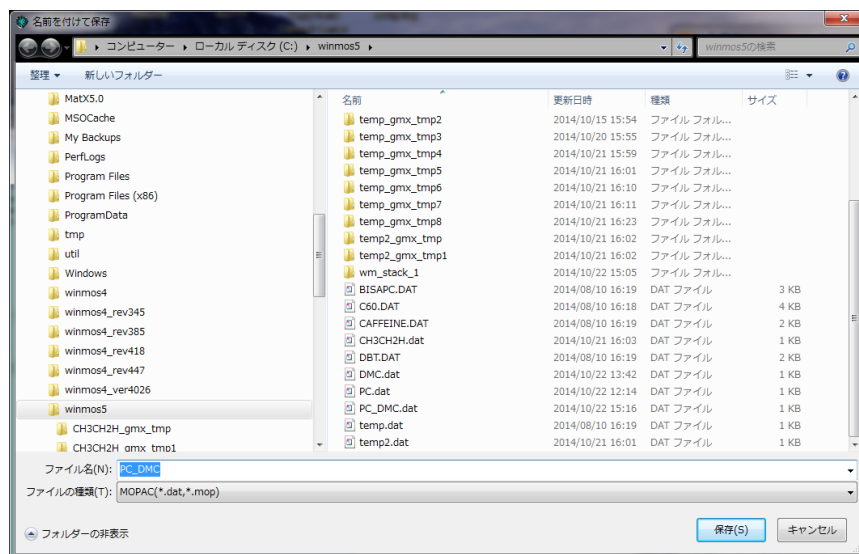
最後に[OK]をクリック

WinmostarからGromacsを起動する

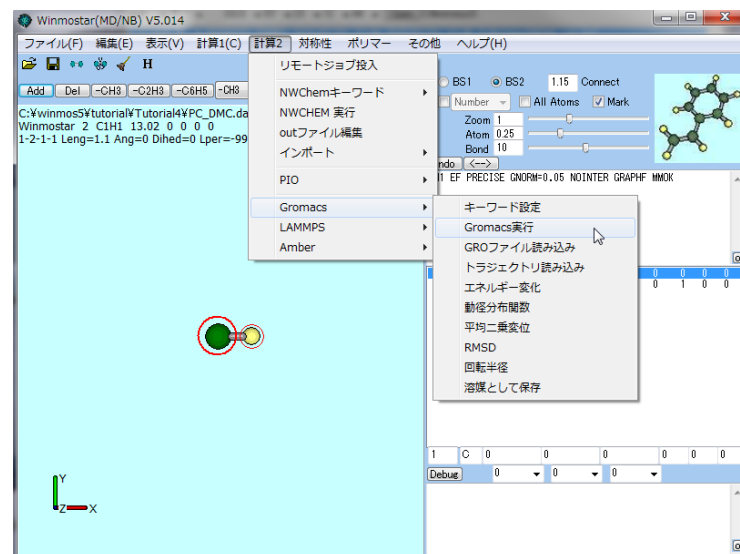
ファイルを保存



Gromacsを起動



ここではファイル名を
「PC_DMC」としている。



エネルギー極小化計算終了

エネルギー極小化の結果を確認する 1

PCとDMCが何分子配置されたかを確認する。

PC_DMC.datと同じ階層内の[PC_DMC_gmx_tmp]フォルダ内のgmx_tmp.topをテキストエディタで開く

```
#include "amber03.ff/forcefield.itp"
#include "/cygdrive/C/winmos5/PC.itp"
#include "/cygdrive/C/winmos5/DMC.itp"
#include "gmx_tmp.itp"
#include "/cygdrive/C/winmos5/DMC.itp"
#include "/cygdrive/C/winmos5/PC.itp"
#include "amber03.ff/spce.itp"
#include "amber03.ff/ions.itp"
```

```
[ system ]
gmx_tmp
```

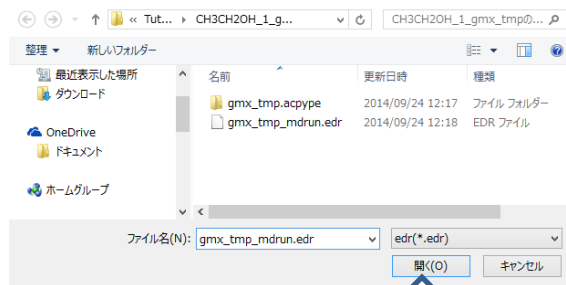
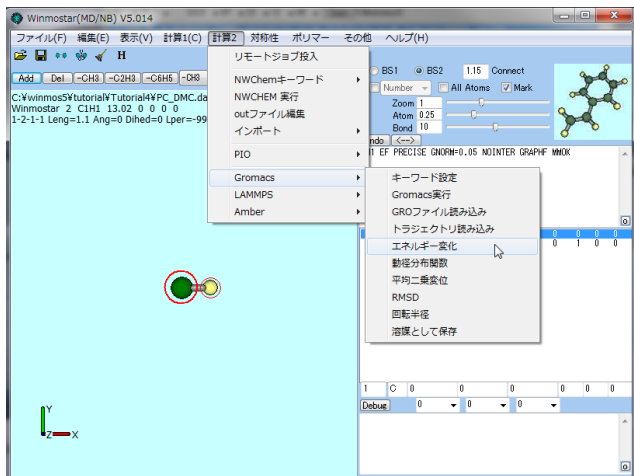
```
[ molecules ]
; Compound      nmols
PC 100           }
DMC 100          }
```

PCとDMCのどちらも100分子配置されている。

* セルサイズに対して設定分子数が多い場合は、実際に配置される分子数が設定数より少なくなることがある。

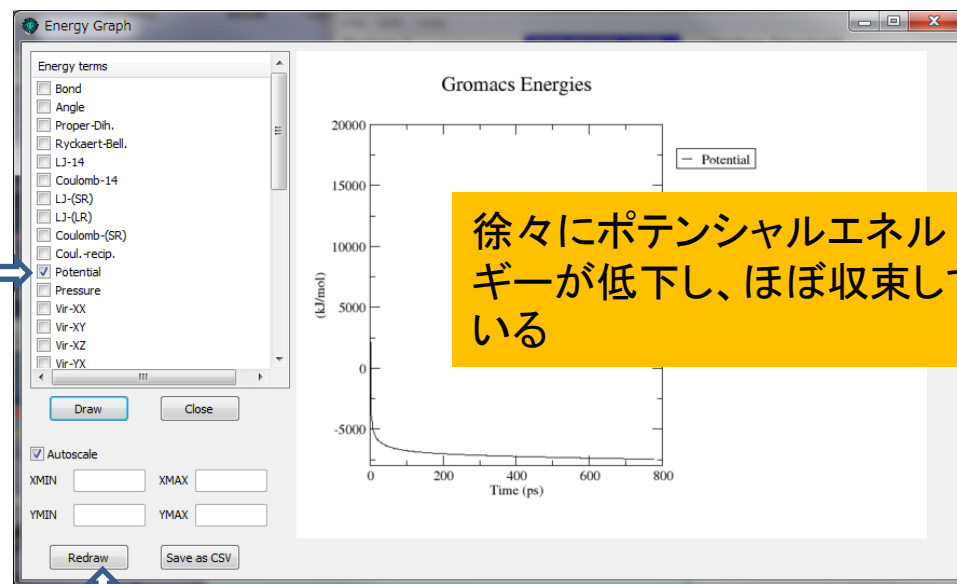
エネルギー極小化の結果を確認する 2

エネルギー変化を選択



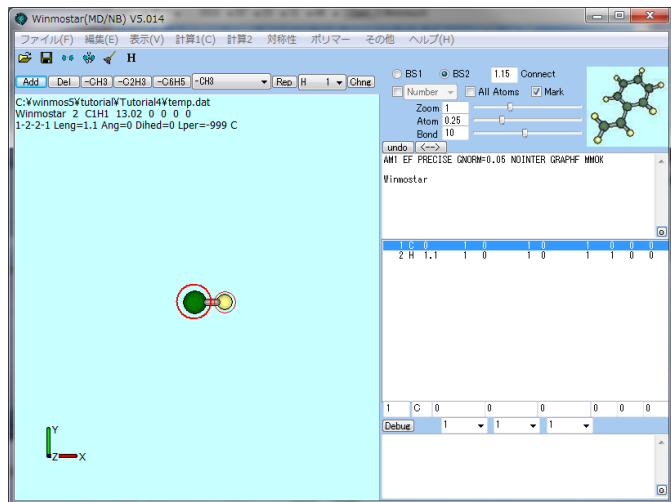
[開く]をクリック

①Potential
に トグルを
立てる

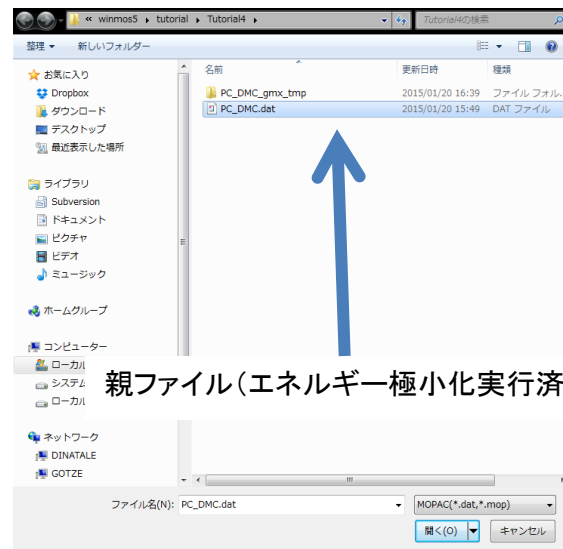


②Drawをクリック

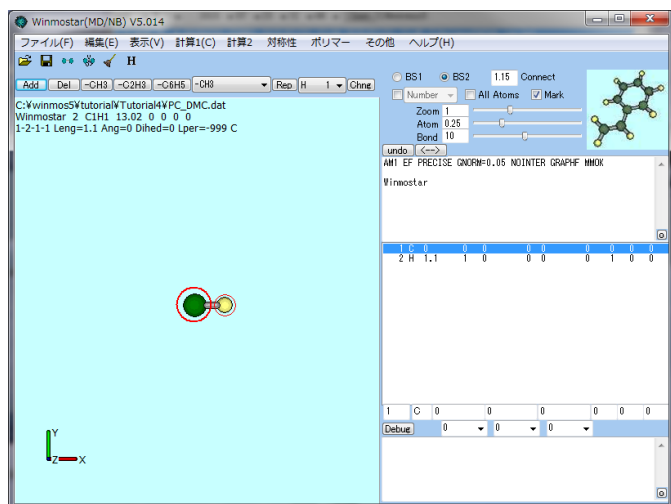
④ 温度一定(nvt)のMD計算による構造緩和



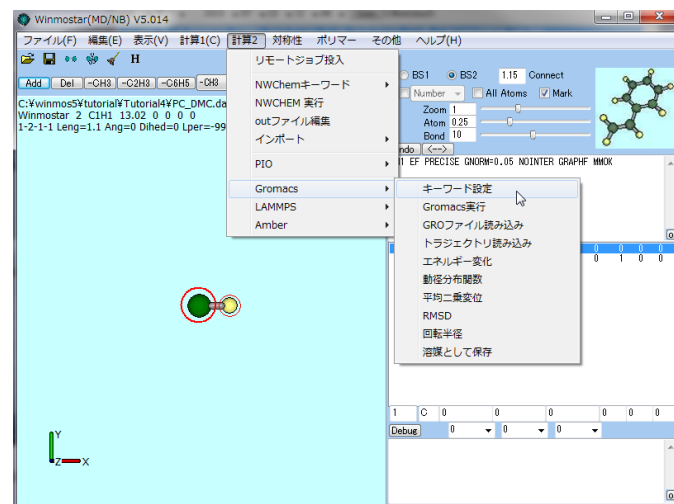
[File] → [開く]



親ファイル(エネルギー極小化実行済)を選択する



「キーワード設定」
画面起動



Gromacs Setupで計算条件を設定する

最初に[MDP Run Parameters]タブをクリック

The screenshot shows the 'Gromacs Setup' window with the 'MDP Run Parameters' tab selected. The window is divided into several sections with various settings:

- MDP Run Parameters:**
 - ☒ Extending Simulation
 - Velocity Generation:** gen-vel: yes
 - Run Control:** integrator: md
 - Start Time and Timestep in ps:** dt [ps]: 0.002, nsteps: 25000
 - Energy Minimization:** emtol [kJ/mol/nm]: 100.0, emstep [nm]: 0.01
 - Periodic Boundary Condition:** pbc: xyz
- Electrostatics:** coulombtype: PME, rcoulomb [nm]: 1.2
- VdW:** vdwtype: Cut-off, rvdw-switch [nm]: 1.0, rvdw [nm]: 1.2
- Temperature Coupling:** tcoupl: berendsen, tc-grps: System, tau-t [ps]: 1.0, ref-t [K]: 300.0
- Pressure Coupling:** pcoupl: no, tau-p [ps]: 1.0, compressibility [/bar]: 4.5e-5, ref-p [bar]: 1.0, refcoord-scaling: no
- Bonds:** constraints: all-bonds, constraint-algorithm: LINCS
- Output Control:** nstxout: 100, nstfout: 100, nstenergy: 100, out-compressed: 0

Annotations with arrows point to specific settings:

- Extending Simulationにチェックを入れる** (Check Extending Simulation)
- integratorをmdに変更** (Change integrator to md)
- 50 ピコ秒 (2 fs * 25000 step) のMD計算を行う。** (Perform MD calculation for 50 ps)
- all bondsに変更 (すべての結合を拘束する。)** (Change to all bonds)
- アウットputを100ステップ毎に設定する。** (Set output every 100 steps)
- Berendsen法で温度制御を行う。** (Use Berendsen method for temperature control)
- 300 K (約25°C)に設定する。** (Set to 300 K)

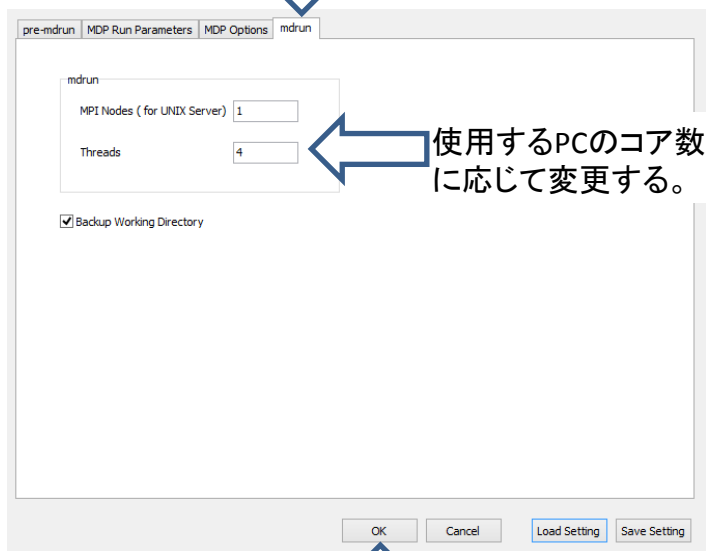
Gromacsの起動

計算実行環境を設定

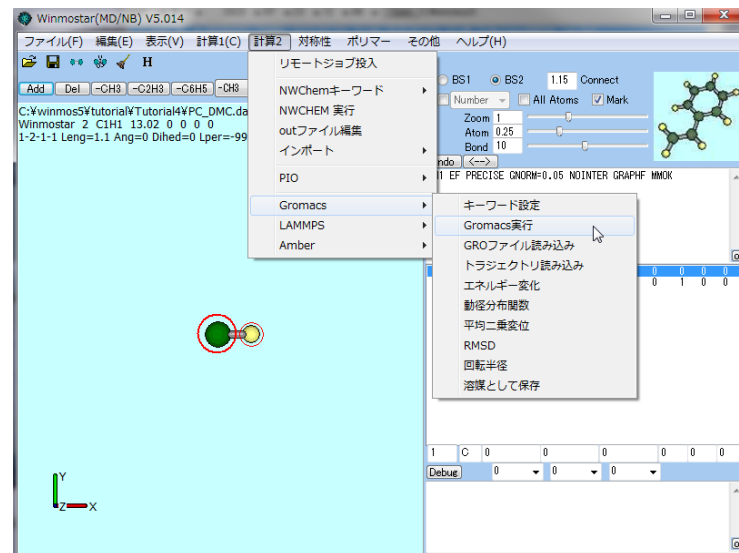


Gromacsを起動

[mdrun]タブをクリック



[OK]をクリック

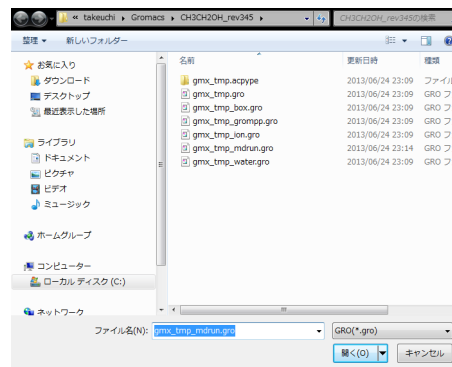
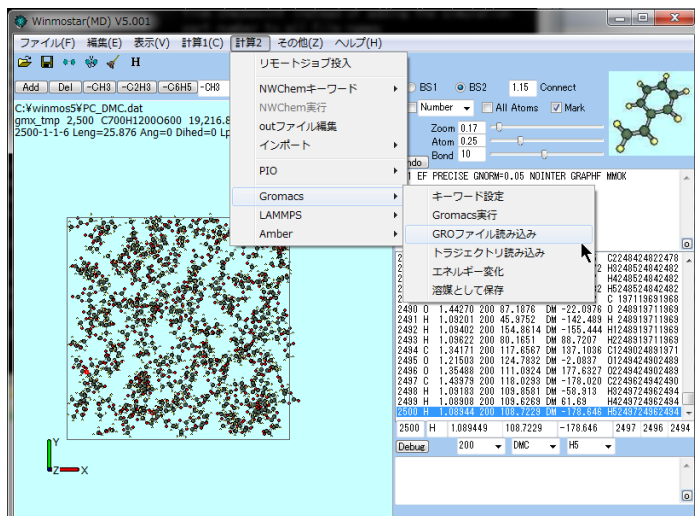


温度一定計算が始まる

計算終了

トラジェクトリーを確認する 1

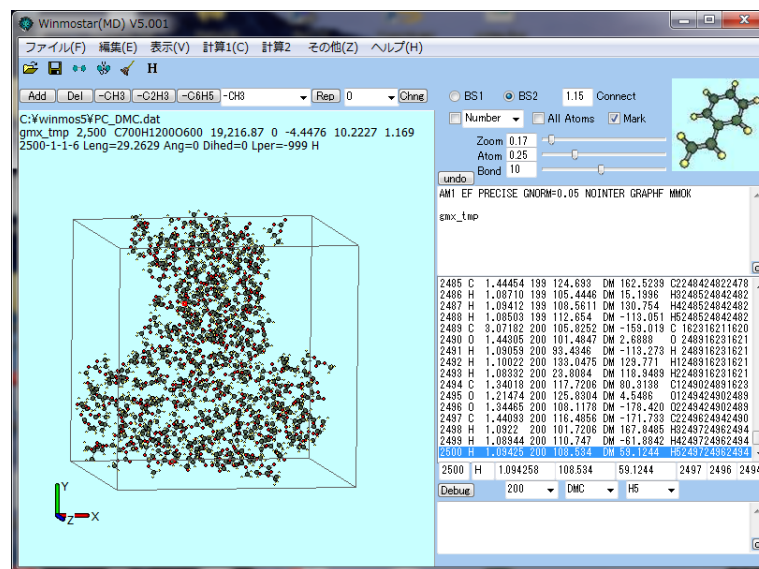
計算2→Gromacs→ GMOファイル読み込み を起動



gmx_tmp_mdrun.groを指定

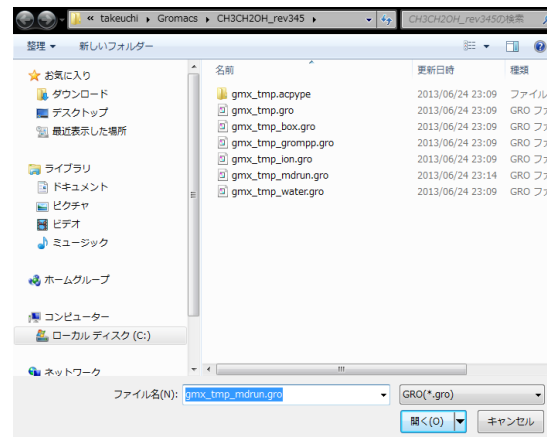
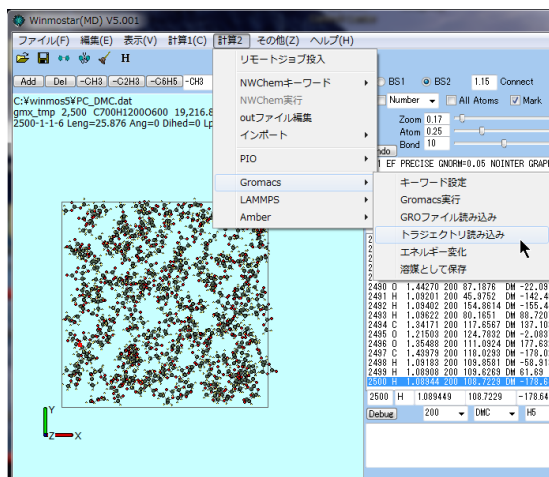


MDの最終ステップ(25000ステップ
=50 ps) の3D構造が表示される



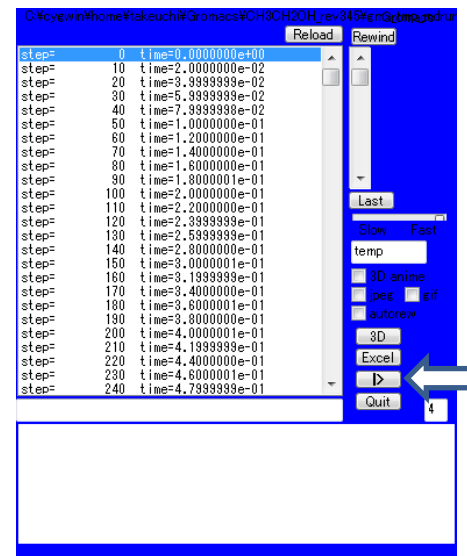
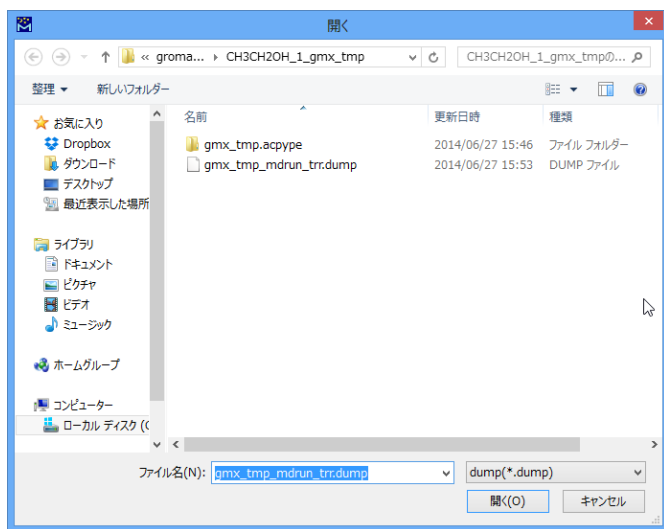
トラジェクトリーを確認する 2

計算2→Gromacs→トラジェクトリ読み込みを起動



gmx_tmp_mdunrun.groを指定

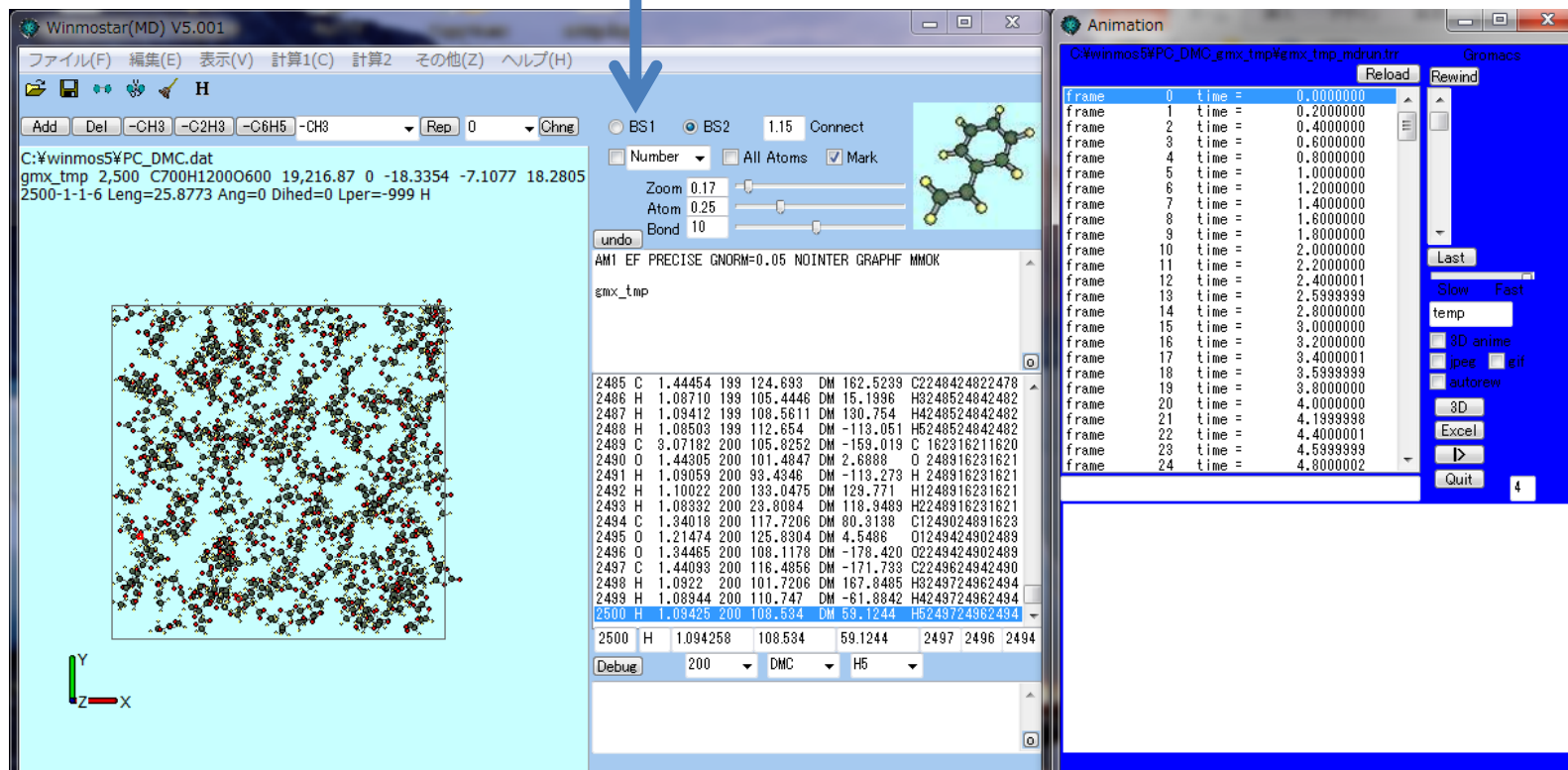
gmx_tmp_mdunrun_trrを指定



再生ボタンをクリック

トラジェクトリーを確認する 3

BS1に変更すると“動き”が速くなる



The screenshot shows the Winmostar(MD) V5.001 interface. The main window displays a 3D visualization of a molecular simulation. The right panel shows the 'Animation' window with a list of frames and time values.

Connect Section:

- ☐ BS1 (Selected)
- ☐ BS2
- 1.15 Connect
- ☐ Number
- ☐ All Atoms
- ☒ Mark
- Zoom 0.17
- Atom 0.25
- Bond 10
- undo
- AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF MMOK
- gmx_tmp

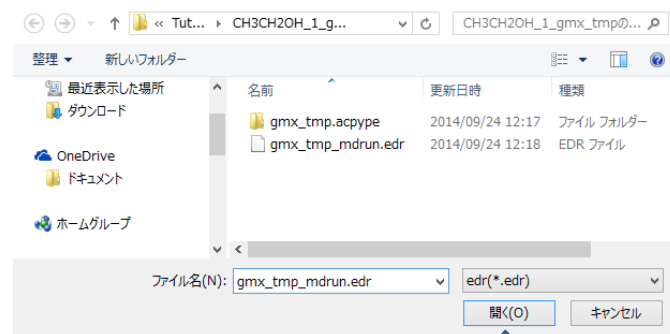
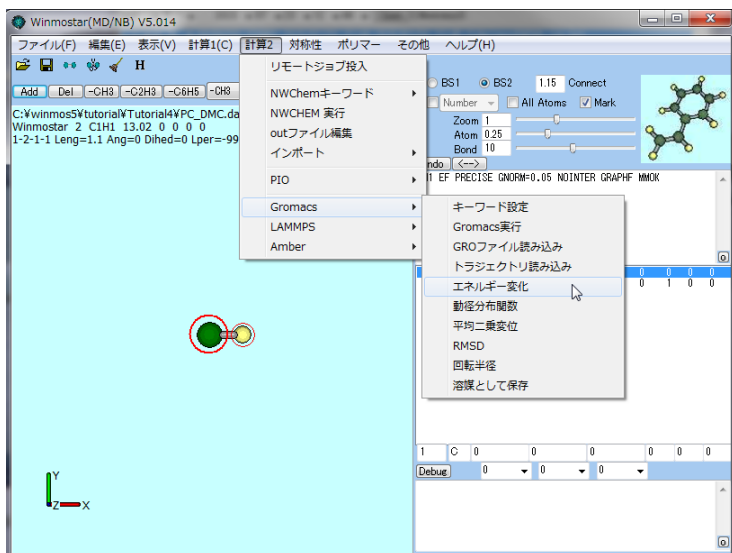
Animation Window:

frame	time
0	0.0000000
1	0.2000000
2	0.4000000
3	0.6000000
4	0.8000000
5	1.0000000
6	1.2000000
7	1.4000000
8	1.6000000
9	1.8000000
10	2.0000000
11	2.2000000
12	2.4000001
13	2.5999999
14	2.8000000
15	3.0000000
16	3.2000000
17	3.4000001
18	3.5999999
19	3.8000000
20	4.0000000
21	4.1999998
22	4.4000001
23	4.5999999
24	4.8000002

アニメーションが始まる。

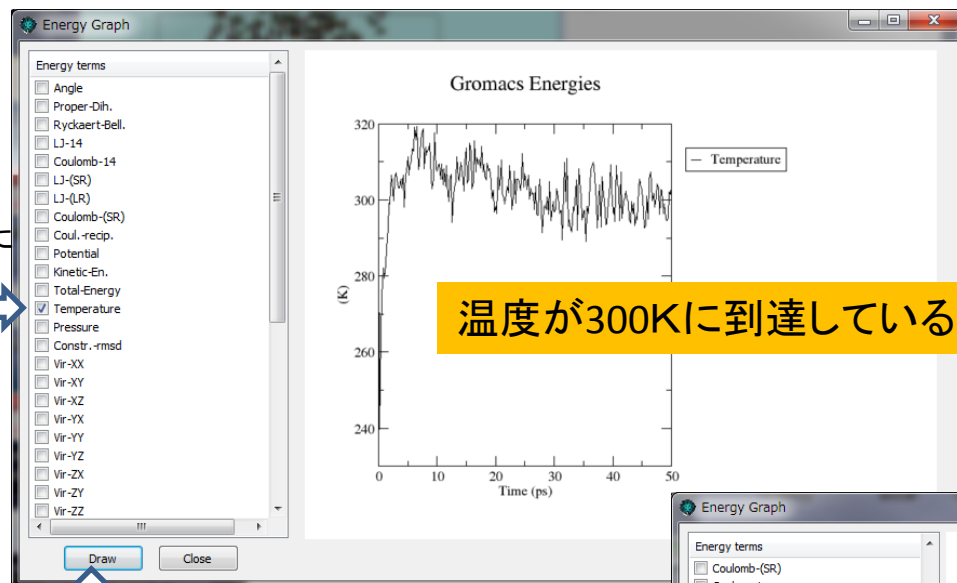
系の温度、エネルギー変化を確認する 1

エネルギー変化を選択



[開く]をクリック

系の温度、エネルギー変化を確認する 2

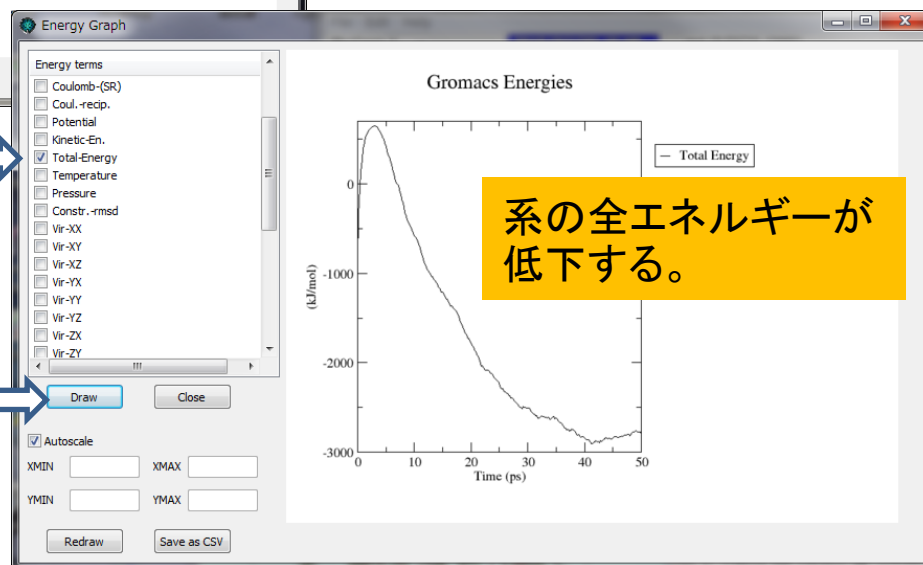


①Temperatureに
トグルを立てる

②Drawをクリック

③Total-Energyに
トグルを立てる

④Drawをクリック



⑤ 温度・圧力一定(npt)MD計算による凝集化

Gromacs Setupで計算条件を設定する

最初に[MDP Run Parameters]タブをクリック

Extending Simulationにチェックを入れる

integratorをmdに変更

100ピコ秒 (2 fs * 50000 step) のMD計算を行う。

vdwの長距離処理をswitching functionに設定する。

Parrinello-Rahman法で圧力制御を行う。

200 barで圧縮する。

all bondsに変更(すべての結合を拘束する。)

アウトプットを100ステップ毎に出力させる。

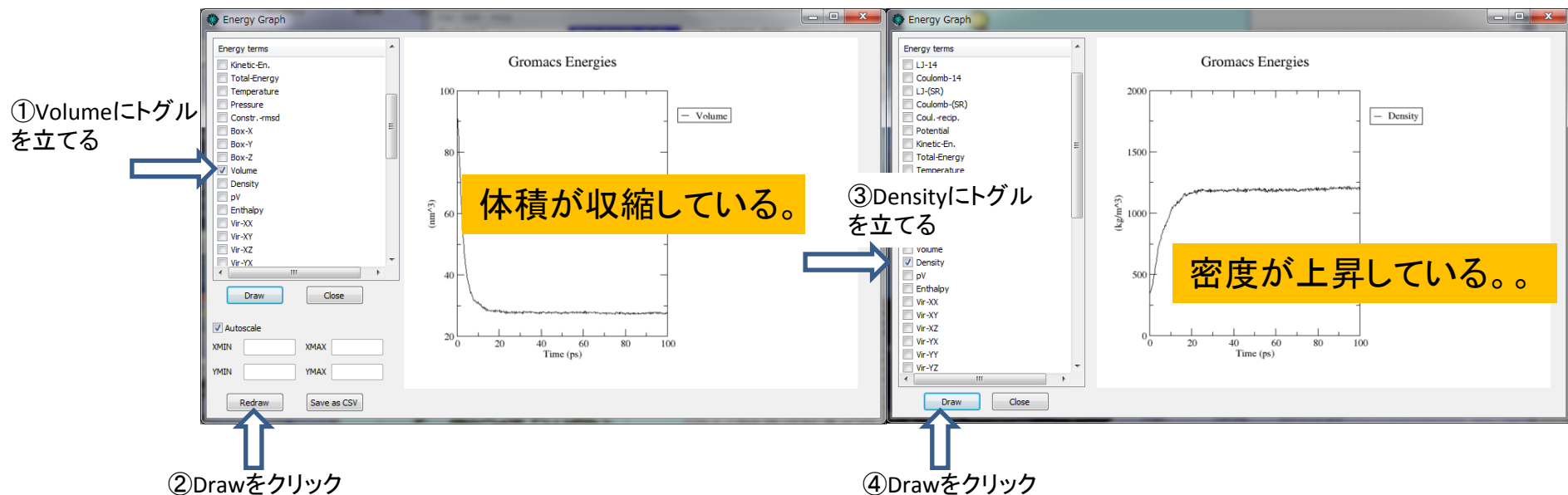
Berendsen法で温度制御を行う。

300 K (約25°C)に設定する。

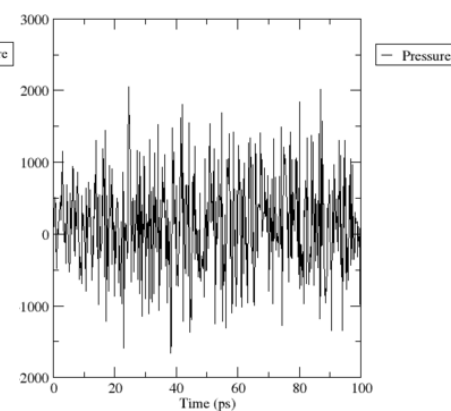
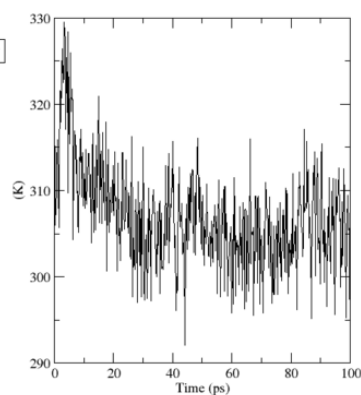
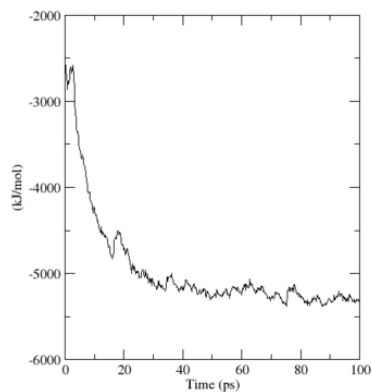
The screenshot shows the 'Gromacs Setup' window with the 'MDP Run Parameters' tab selected. The settings are as follows:

- Velocity Generation:** gen-vel is set to 'yes'.
- Run Control:** integrator is set to 'md'.
- Start Time and Timestep in ps:** dt [ps] is 0.002, nsteps is 50000.
- Energy Minimization:** emtol [KJ/mol/nm] is 100.0, emstep [nm] is 0.01.
- Periodic Boundary Condition:** pbc is set to 'xyz'.
- Electrostatics:** coulombtype is 'PME'.
- VdW:** vdwttype is 'Switch'.
- Temperature Coupling:** tcoupl is 'berendsen', ref-t [K] is 300.0.
- Pressure Coupling:** parrinello-Rahman is selected, ref-p [bar] is 200.0.
- Bonds:** constraints are set to 'all-bonds'.
- Output Control:** nstxout, nstfout, and nstenergy are all set to 100.

系の温度、エネルギー変化を確認する



⑤ Total-Energy や
Temperature, Pressure,
なども確認する。



⑥ 温度・圧力一定 (npt) MDの本計算

温度 (300K)・圧力 (1気圧) 一定の分子動力学計算を実行する

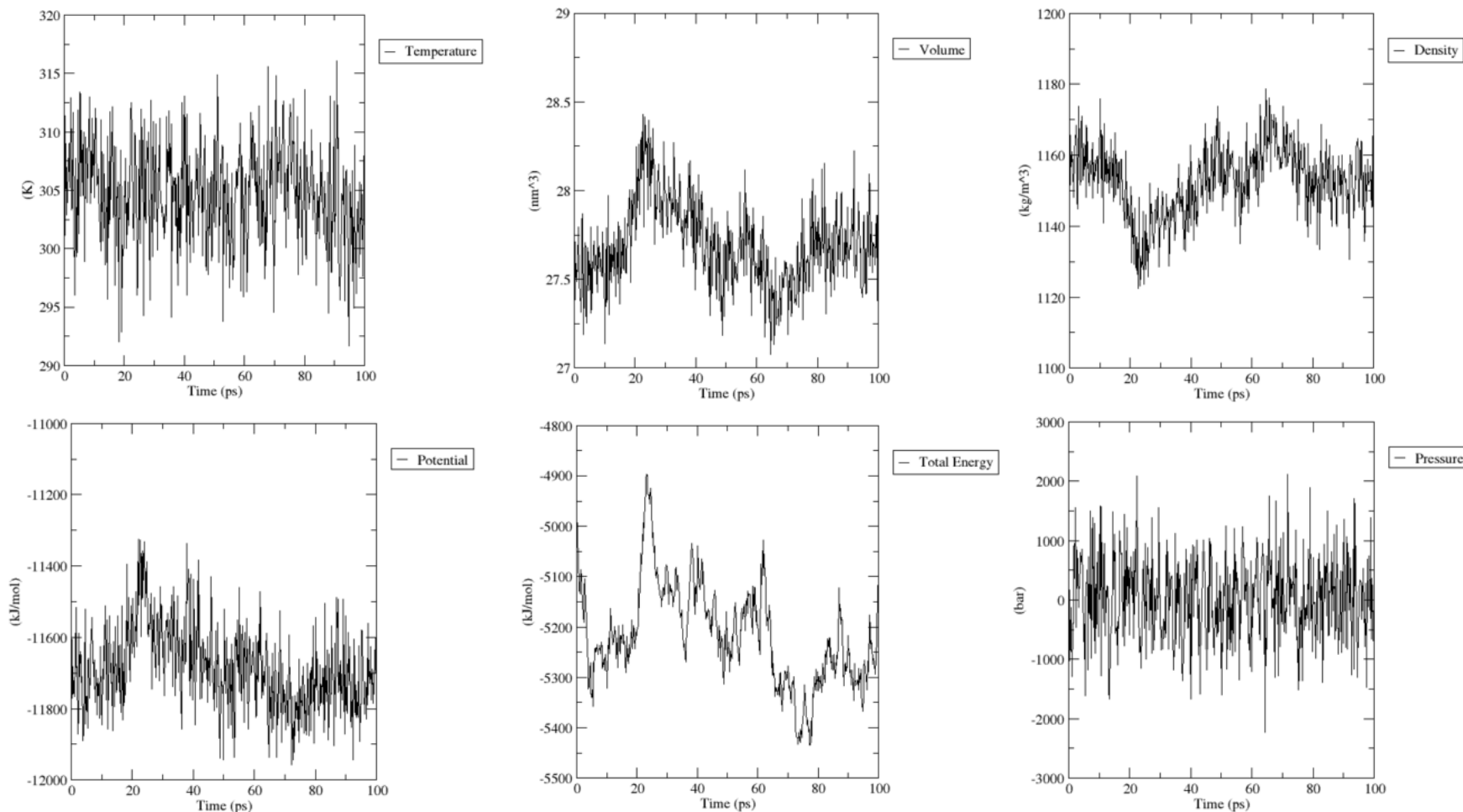
最初に[MDP Run Parameters]タブをクリック

The screenshot shows the 'Gromacs Setup' window with the 'MDP Run Parameters' tab selected. The window is divided into several sections with various settings. Annotations with arrows point to specific settings:

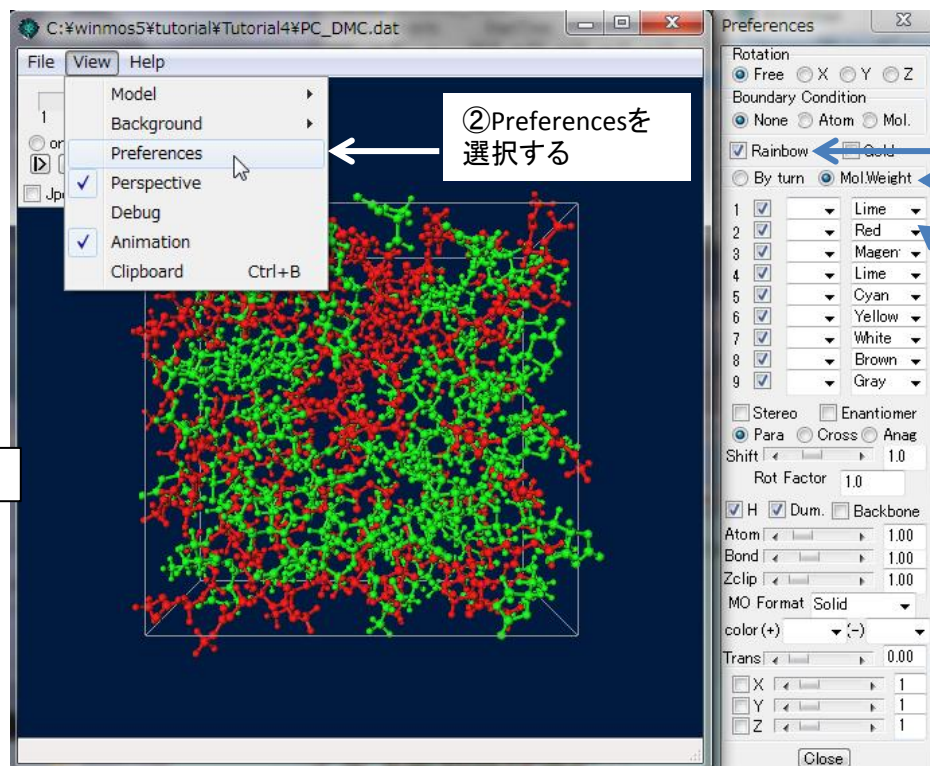
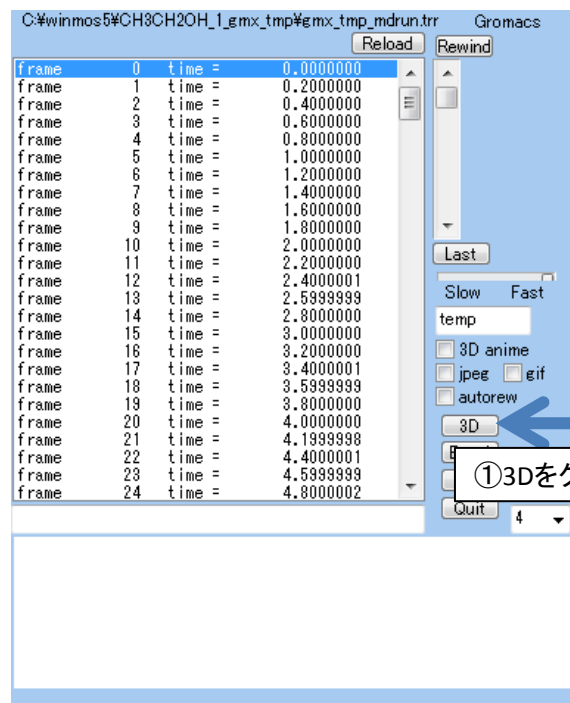
- Extending Simulationにチェックを入れる**: Points to the 'Extending Simulation' checkbox, which is checked.
- integratorをmdに変更**: Points to the 'integrator' dropdown menu, which is set to 'md'.
- 100ピコ秒 (2 fs * 50000 step) のMD計算を行う。**: Points to the 'nsteps' input field, which is set to 50000.
- 最初に[MDP Run Parameters]タブをクリック**: Points to the 'MDP Run Parameters' tab.
- vdwの長距離処理をswitching functionに設定する。**: Points to the 'vdwtype' dropdown menu, which is set to 'Switch'.
- Parrinello-Rahman法で圧力制御を行う。**: Points to the 'coupltype' dropdown menu, which is set to 'parrinello-Rahman'.
- 1 barに戻す。**: Points to the 'ref-p [bar]' input field, which is set to 1.0.
- all bondsに変更(すべての結合を拘束する。)**: Points to the 'constraints' dropdown menu, which is set to 'all-bonds'.
- アウットプットを100ステップ毎に出力させる。**: Points to the 'nstxout', 'nstvout', and 'nstenergy' input fields, all of which are set to 100.
- Berendsen法で温度制御を行う。**: Points to the 'tcoupl' dropdown menu, which is set to 'berendsen'.
- 300 K (約25℃) に設定する。**: Points to the 'ref-t [K]' input field, which is set to 300.0.

Buttons at the bottom: OK, Cancel, Load, Save, Reset.

系の温度、エネルギー変化を確認する



トラジェクトリーを確認する



③ Rainbowを選択する

④ Mol. Weight
を選択する

⑤ LimeとRed
を選択する

