

Winmostar チュートリアル

DC-DFTB

構造最適化計算

V7.019

株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2017/5/8

Contents

- I. 分子のモデリング
- II. 構造最適化計算
- III. 構造最適化のアニメーション表示

動作環境設定

本チュートリアルの実行にはDC-DFTB(別売)を入手する必要がある。
<http://x-ability.co.jp/dftb.php>

The graphic features the DFTB logo at the top, followed by the title "DC-DFTB on Winmostar". Below this, it states that the software was developed by a group at Shizuoka University and that it significantly reduces calculation volume compared to traditional QM/MM/MD methods. Pricing information is provided for individual users (90,000 yen) and corporations (900,000 yen). A diagram shows the integration of DC-DFTB with Winmostar, with "Input" and "Output" arrows. At the bottom, there is a descriptive text about full QM-MD simulations, a molecular model of CO₂ absorption, and a line graph comparing CPU time for Standard DFTB and DC-DFTB across a range of water molecules.

早稲田大学中井教授のグループで開発されたQM-MD計算手法で、QM/MM/MD法などの従来法に比べて大幅に計算量を減らせます。

ソルバのみ販売価格
 教育機関：90,000円/ユーザー
 民間企業・官公庁：900,000円~/ユーザー

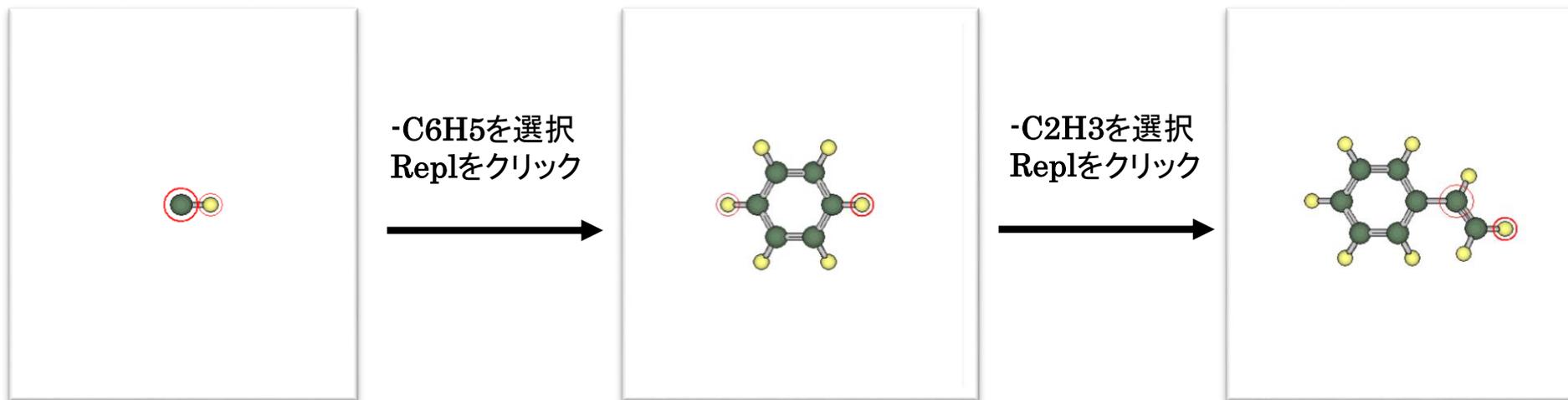
DC-DFTB enables full QM-MD simulations of chemical reactions including thousands of atoms.

(Snapshot of CO₂ absorption reaction in amine-water solution)

Number of water molecules	Standard DFTB [sec]	DC-DFTB [sec]
0	0	0
2000	~1500	~100
4000	~3000	~200
6000	~4500	~300
8000	~6000	~400
10000	~7500	~500

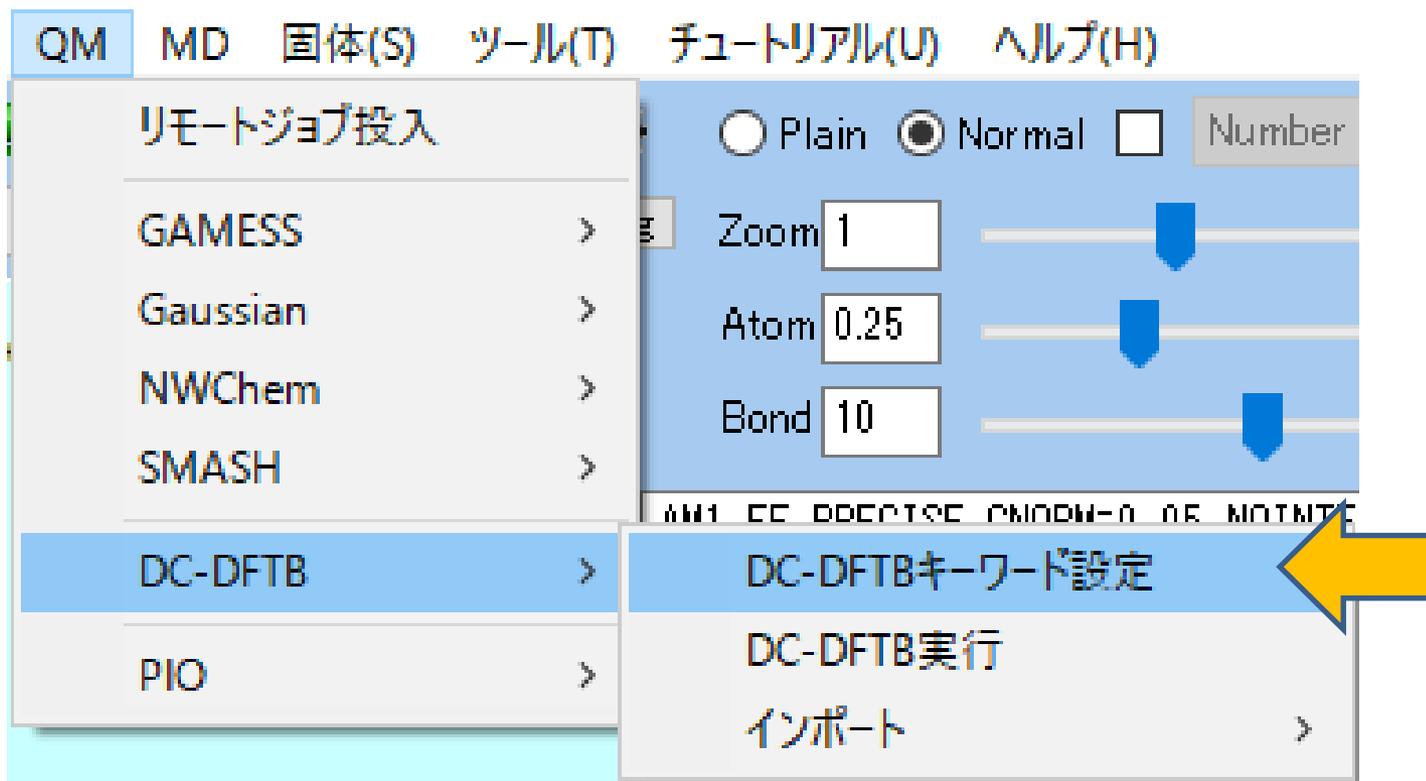
I. 分子のモデリング

メイン画面上にて下記のようにスチレン分子をモデリングする。
この時クリーン機能は使用しなければ、フェニル基とビニル基は同一平面に乗らない。
本チュートリアルでは、この構造を初期値として構造最適化の様子を確認する。



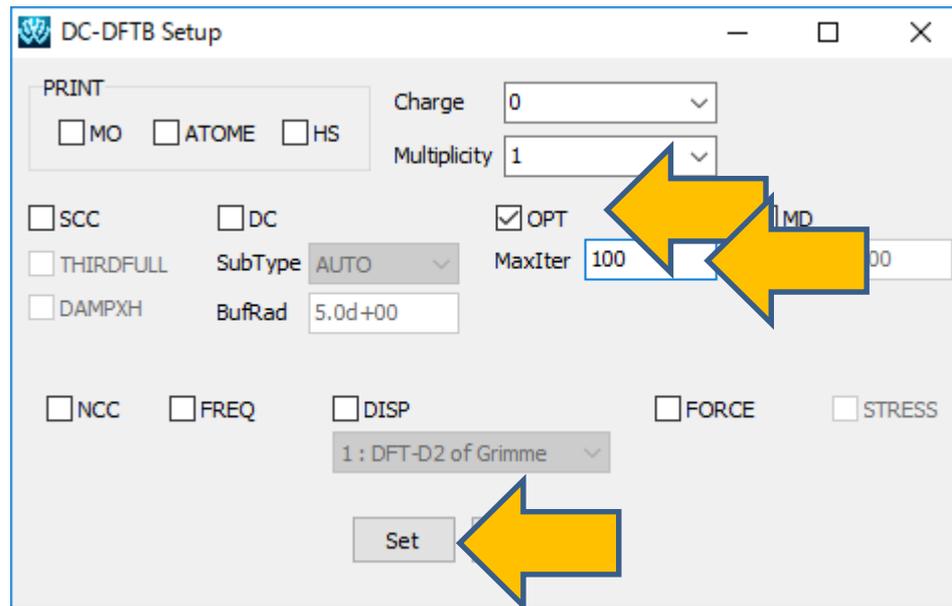
II. 構造最適化計算

QM | DC-DFTB | キーワード設定 をクリックする。



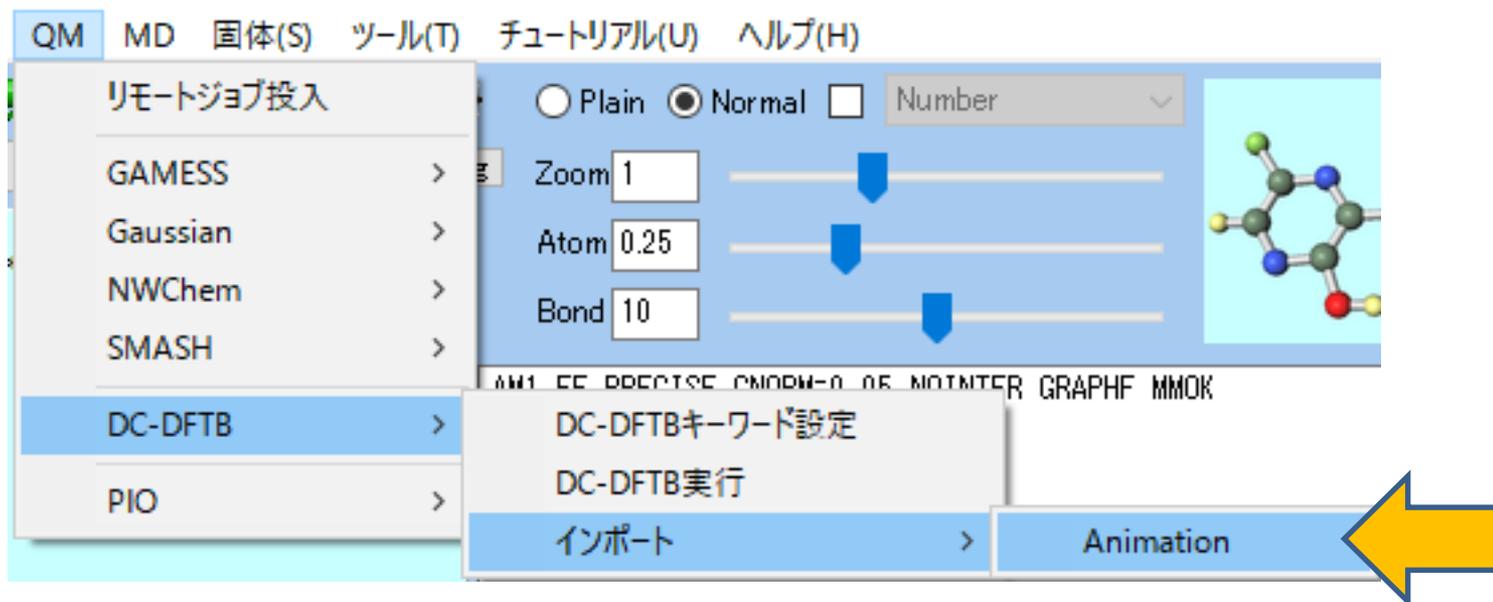
II. 構造最適化計算

1. **OPT** にチェックを入れ、**MaxIter** に **100** と入力する。
2. **Set** をクリックする。
3. **QM | リモートジョブ投入** をクリックする。
Hostname, LoginID等を適切に設定し、
Programから**dcdftb**を選択



III. 構造最適化のアニメーション表示

計算の終了後、**QM | DC-DFTB | インポート | Animation** を選択する。
アウトプットファイルを選択する。(拡張子は.dco)



III. 構造最適化のアニメーション表示

アニメーションウィンドウが表示され、各ステップの様子を確認できる。
例えば、「|>」ボタンを押すとアニメーションが開始される。

The screenshot displays a software window with a menu bar (File, Edit, View, etc.) and a toolbar. The main area shows a 3D ball-and-stick model of a molecule with a red circle highlighting a specific bond. Below the model is a coordinate system (X, Y, Z). To the right is an 'Animation' control panel with a list of search steps, a 'Reload' button, a 'Rewind' button, a 'Last' button, a 'temp' input field, and checkboxes for '3D animation', 'jpeg', 'gif', and 'autorew'. A large yellow arrow points to the 'Play' button (|>) in the animation control panel. At the bottom of the animation panel is a graph showing energy vs. search steps.

Search	E	Grad(max)
0	-16.7491278729	0.
1	-16.7481292819	0.
2	-16.7496630778	0.
3	-16.7501408233	0.
4	-16.7502007726	0.
5	-16.7507265633	0.
6	-16.7504879946	0.
7	-16.7506355811	0.
8	-16.7508942154	0.
9	-16.7505584856	0.
10	-16.7509434700	0.
11	-16.7507452462	0.
12	-16.7509781128	0.
13	-16.7503877597	0.
14	-16.7509582980	0.
15	-16.7509388679	0.
16	-16.7510486943	0.
17	-16.7510355471	0.
18	-16.7510565691	0.
19	-16.7510722370	0.
20	-16.7510518563	0.
21	-16.7510825729	0.
22	-16.7510632493	0.
23	-16.7511190779	0.
24	-16.7510867693	0.

facebook アカウント登録

メールアドレスまたは携帯番号 パスワード

ログインしたままにする

X-Ability Co.,Ltd.
さんはFacebookを利用しています。
Facebookに登録して、X-Ability Co.,Ltd.さんや他の

アカウント登録 ログイン

X-Ability Co.,Ltd.
コンピュータ・テクノロジー

タイムライン 基本データ 写真 いいね! 動画

ユーザー

いいね! 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ビジター投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30

最近発売された山口達明先生の新刊「フロンティアオービタルによる新有機化学教程」の図には弊社開発のWinmostarが使われています。
http://www.amazon.co.jp/.../47.../ref=oh_aui_detailpage_o00_s00...

山口 達明

フロンティアオービタルによる新有機化学教程
フロンティアオービタルによる新有機化学教程
AMAZON.CO.JP

いいね! コメントする シェア

X-Ability Co.,Ltd.さん (東京大学柏キャンパス)
11月9日 21:38

👍 いいね!