

Winmostar チュートリアル

Gromacs

溶解度/ χ /DPDパラメータの算出

V7.016

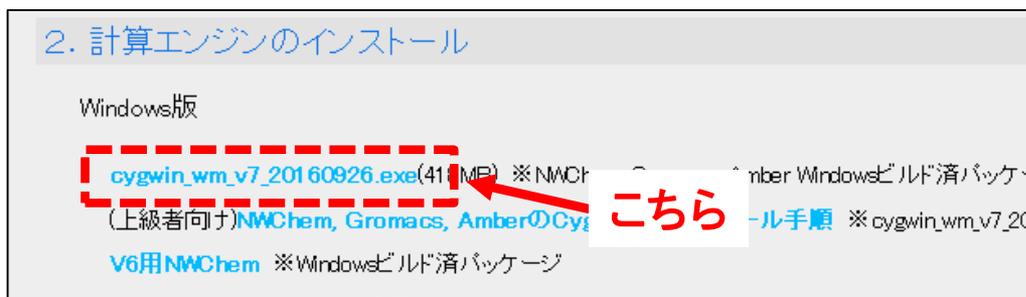
株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2017/03/30

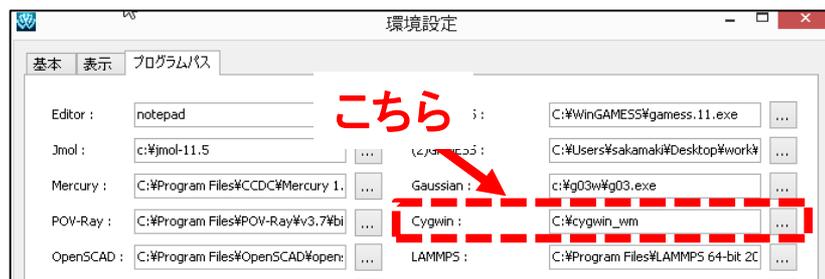
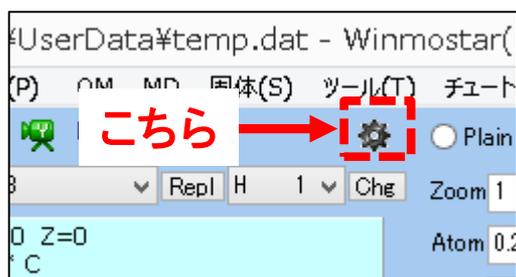
動作環境設定

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/manual_jp.htmlの「2. 計算エンジンのインストール」から、Cygwinの自己解凍書庫(exe)を入手し実行してください。



- 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。



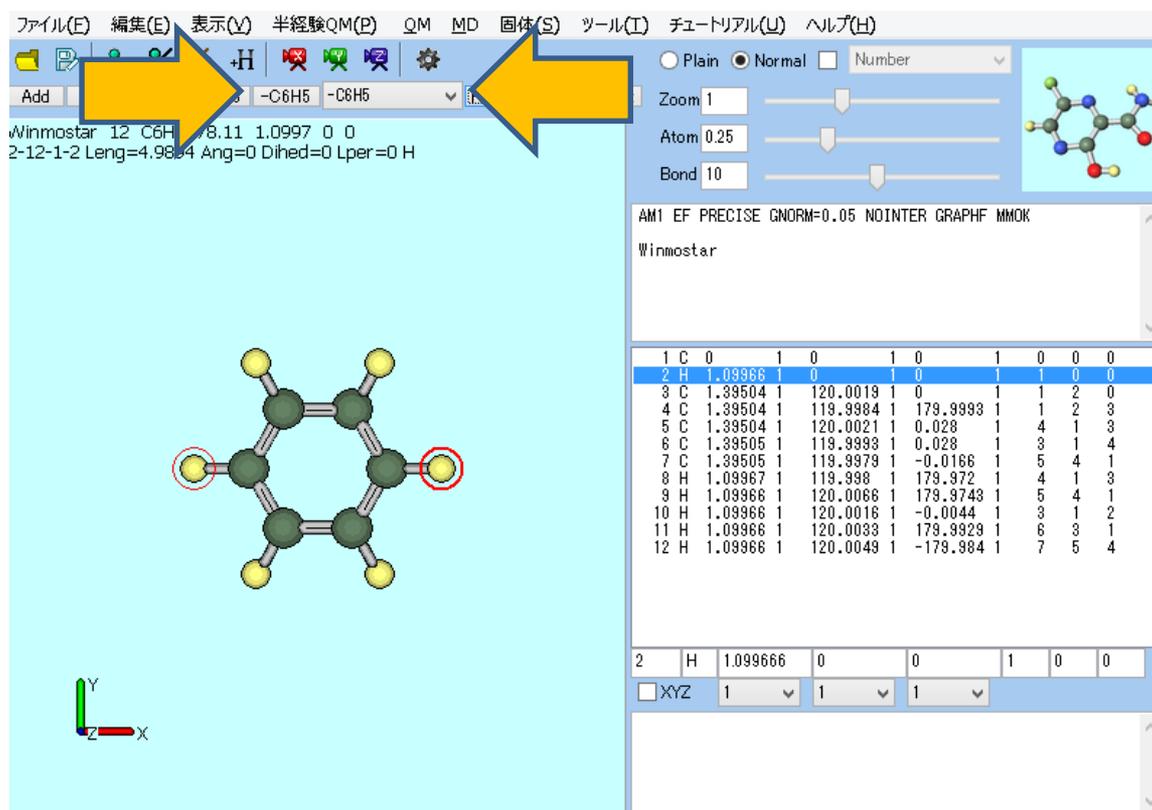
注意点

- ここではチュートリアルという性質上、平衡化に十分なステップ数を設定していません。また、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。
- 力場や相互作用の計算方法の種類・パラメータも計算結果に影響を与えます。

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。

メイン画面においてベンゼン分子をモデリングする。例えば、「-C6H5」ボタンを押して「Repl」ボタンを押すことでベンゼンが作成される。

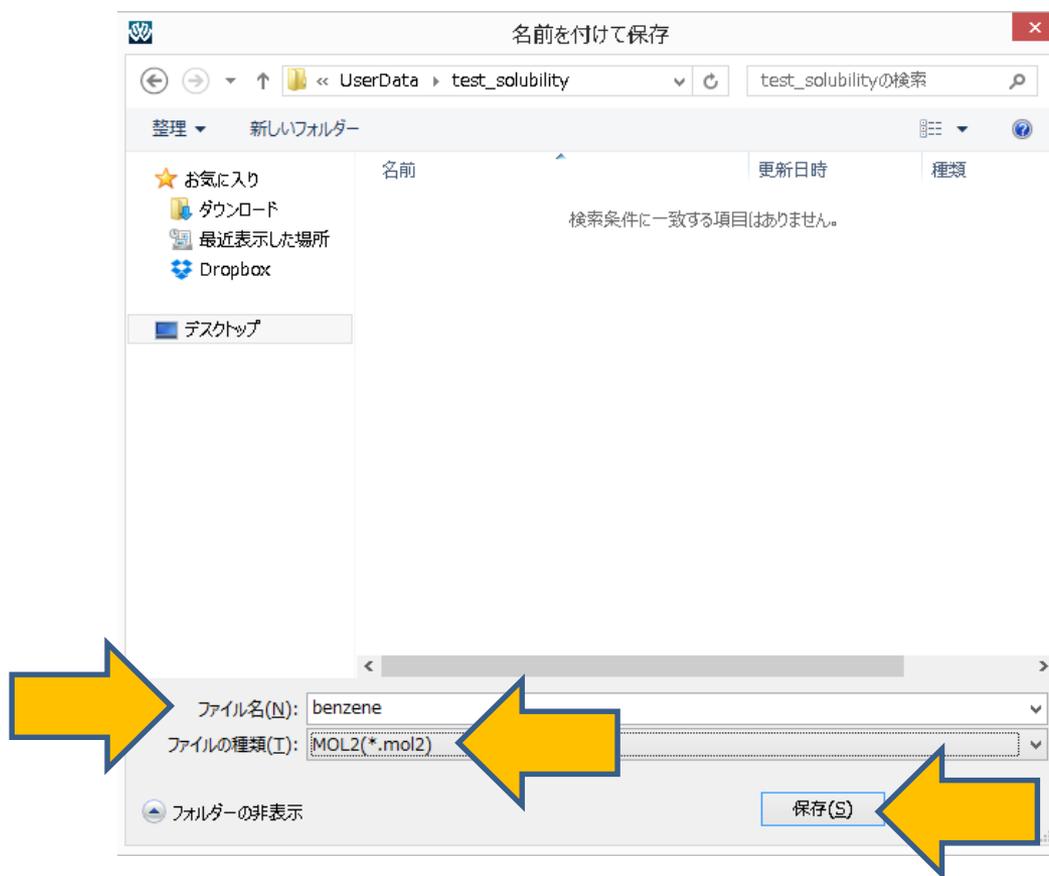


Winmostar 12 C6H 178.11 1.0997 0 0
2-12-1-2 Leng=4.9804 Ang=0 Dihed=0 Lper=0 H

Atom	X	Y	Z	Occupancy	Charge	Mass	Order
1	C	0	1	0	1	0	0
2	H	1.09966	1	0	1	0	0
3	C	1.39504	1	120.0019	1	0	1
4	C	1.39504	1	119.9984	1	179.9993	1
5	C	1.39504	1	120.0021	1	0.028	1
6	C	1.39505	1	119.9993	1	0.028	1
7	C	1.39505	1	119.9979	1	-0.0166	1
8	H	1.09867	1	119.988	1	179.872	1
9	H	1.09866	1	120.0066	1	179.8743	1
10	H	1.09866	1	120.0016	1	-0.0044	1
11	H	1.09866	1	120.0033	1	179.8929	1
12	H	1.09866	1	120.0049	1	-179.984	1

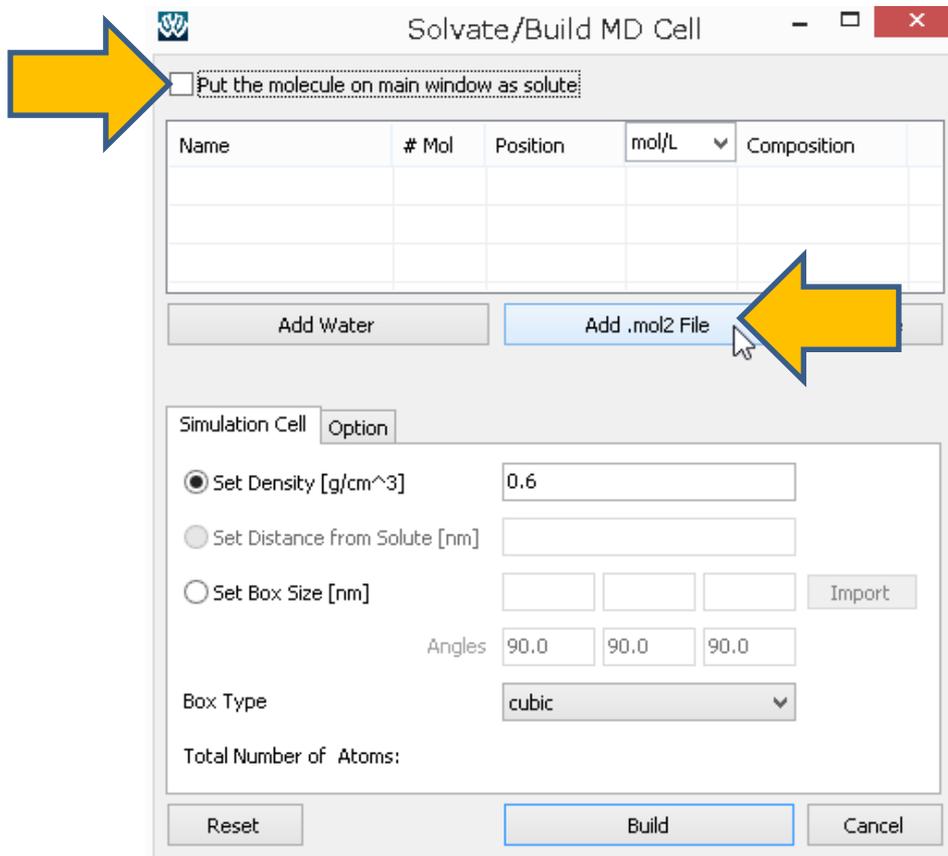
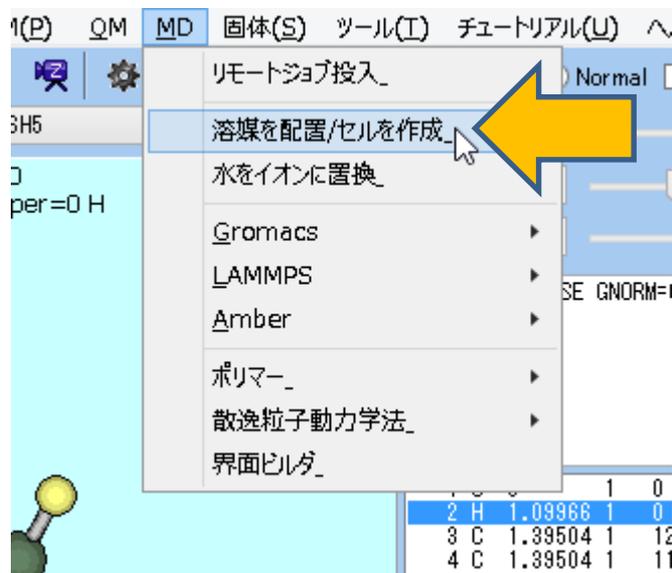
I. 成分1の液相のMD計算(モデリング)

「ファイル>名前を付けて保存」にて、ファイル名は「benzene」、ファイルの種類は「MOL2」で保存する。



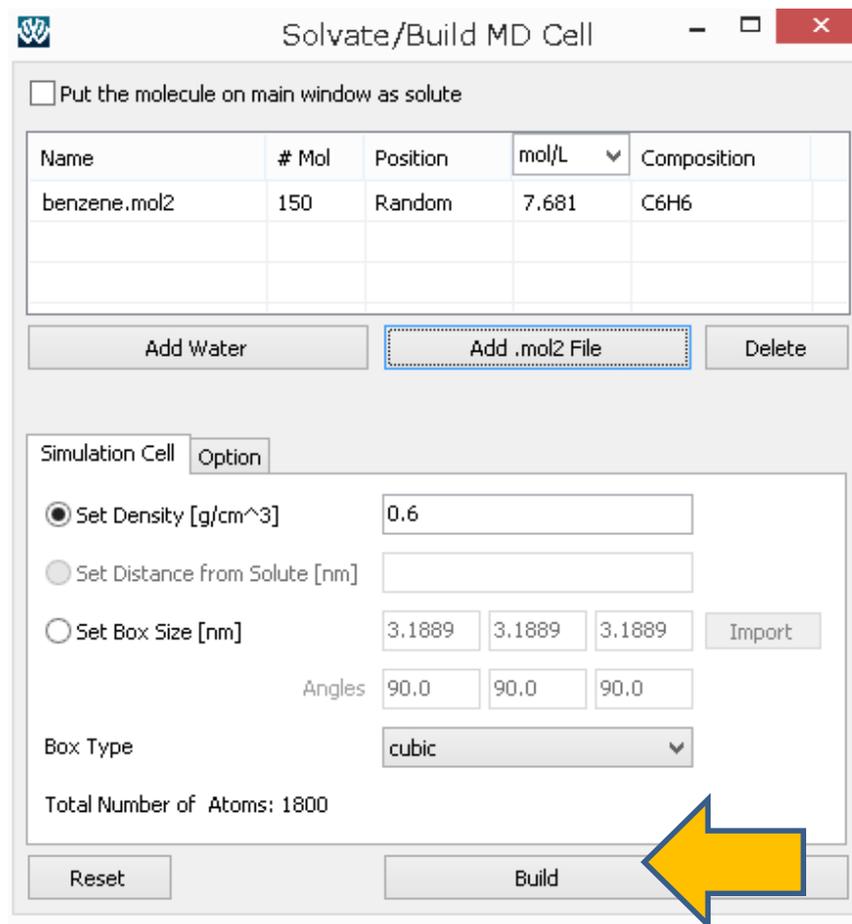
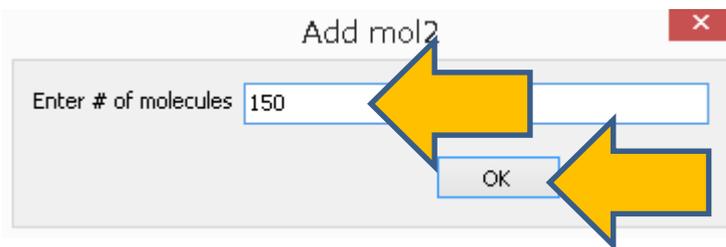
I. 成分1の液相のMD計算(系の作成)

「MD>溶媒を配置/セルを作成」にて、「Put the molecule on main window as solute」のチェックを外し、「Add mol2 File」ボタンを押して、先ほど保存した「benzene.mol2」を選ぶ。



I. 成分1の液相のMD計算(系の作成)

mol2ファイルを選んだ後、「Enter # of molecules」に「150」と入力し「OK」する。
そして「Build」ボタンを押す。



1. 成分1の液相のMD計算(系の作成)

以下のように、メイン画面に作成された系が表示される。

The screenshot shows the X-Ability software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a complex organic molecule, likely a protein or a large organic ligand, with yellow, green, and grey spheres representing atoms. The interface includes a menu bar (File, Edit, View, etc.), a toolbar with various icons, and a right-hand panel with a coordinate table and simulation parameters.

Simulation parameters shown in the right-hand panel:

- AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF MMOK
- Winmostar

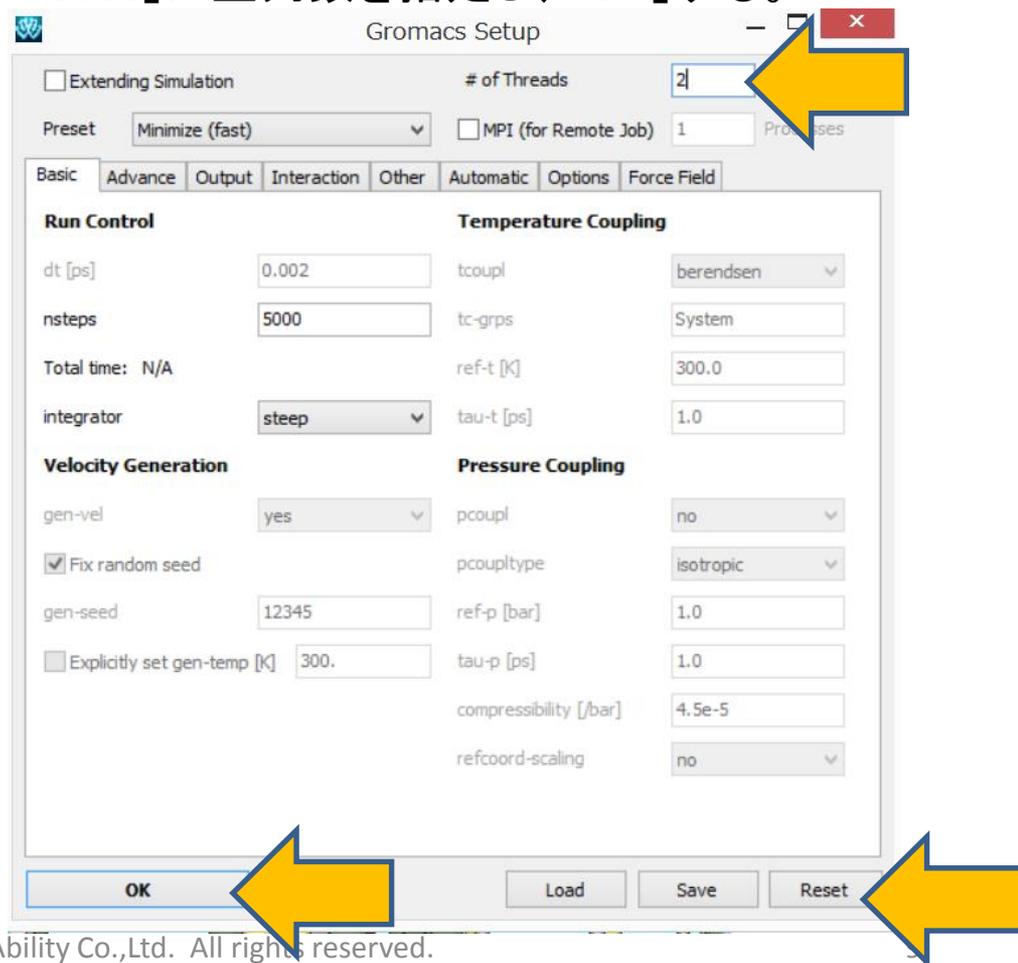
Coordinate table (selected row 1800 is highlighted):

1784	H	1.10145	149	120.317	UN	-44.0858	H	1780	1777	419
1785	H	1.09695	149	120.6122	UN	-179.688	H	1781	1780	1777
1786	H	1.09599	149	119.7558	UN	131.1273	H	1779	1777	419
1787	H	1.09622	149	120.327	UN	-179.809	H	1782	1779	1777
1788	H	1.10186	149	120.8773	UN	-179.997	H	1783	1781	1780
1789	C	4.48504	150	83.5823	UN	-95.4178	C	914	913	916
1790	H	1.09936	150	143.3199	UN	-66.6946	H	1789	914	913
1791	C	1.3956	150	49.8363	UN	-156.464	C	1789	914	913
1792	C	1.40676	150	80.7654	UN	61.1992	C	1789	914	913
1793	C	1.38383	150	119.7872	UN	32.6401	C	1792	1789	914
1794	C	1.38383	150	120.6344	UN	-44.0734	C	1791	1789	914
1795	C	1.39570	150	120.5525	UN	0.2993	C	1793	1792	1789
1796	H	1.09594	150	119.5345	UN	-147.384	H	1792	1789	914
1797	H	1.0995	150	120.0755	UN	179.6383	H	1793	1792	1789
1798	H	1.10127	150	119.2423	UN	136.3192	H	1791	1789	914
1799	H	1.09594	150	120.6783	UN	-179.856	H	1794	1791	1789
1800	H	1.09279	150	120.5912	UN	-179.473	H	1795	1793	1792

XYZ coordinates: 1, 1, 1

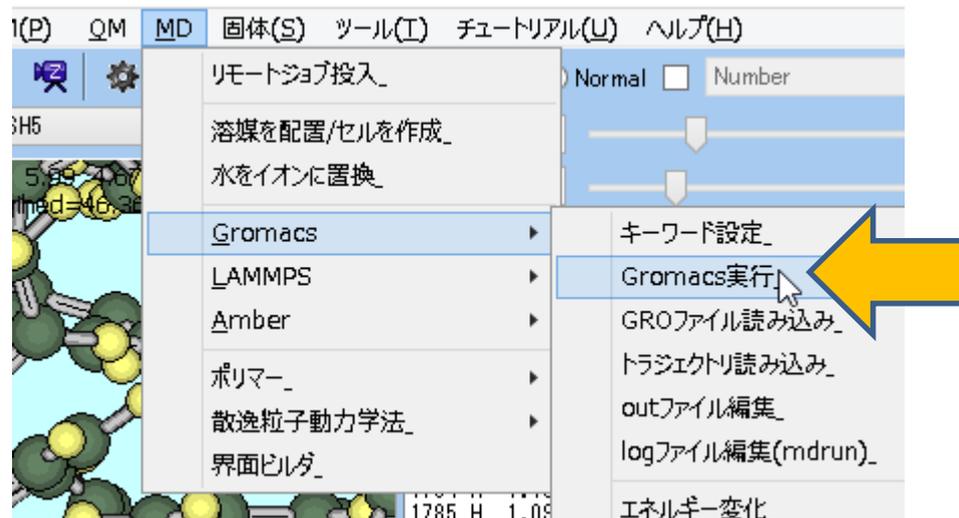
I. 成分1の液相のMD計算(平衡化1)

「MD>Gromacs>キーワード設定」において、一旦右下の「Reset」を押す。
「Preset」に「Minimize (fast)」、「# of Threads」に並列数を指定し、「OK」する。



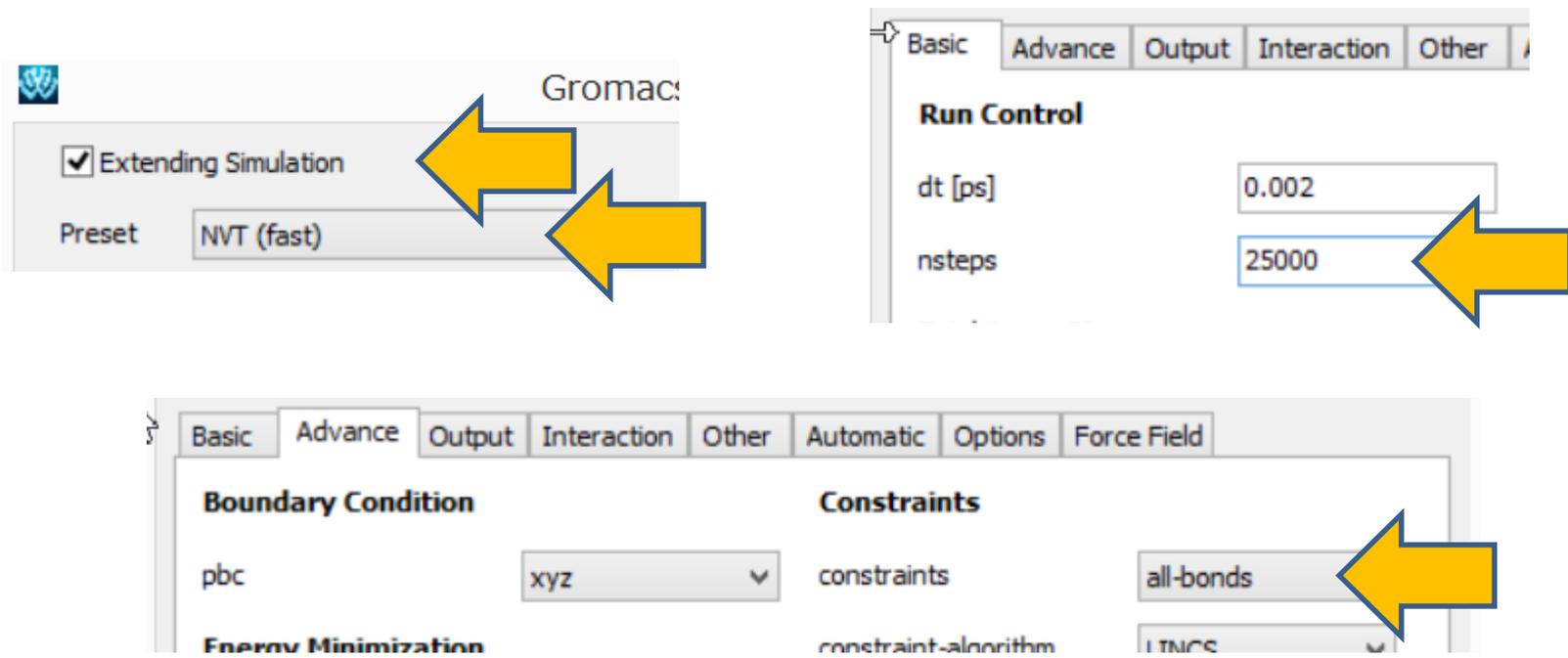
I. 成分1の液相のMD計算(平衡化1)

「MD>Gromacs>Gromacs実行」において、最初に聞かれる座標ファイルの名前は「c6h6_liquid.gro」、次に聞かれるトポロジファイルの名前は「c6h6_liquid.top」とする。その後、cygwinが立ち上がりGromacsの処理が開始される。



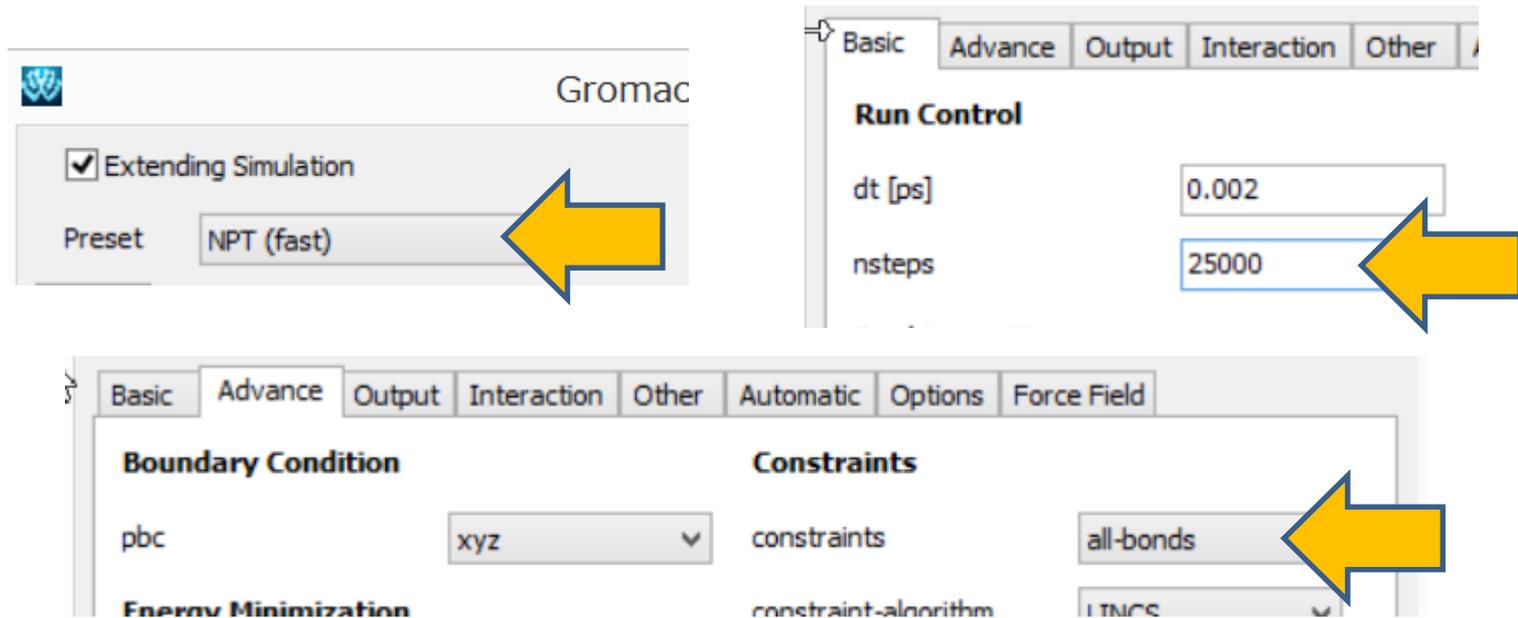
1. 成分1の液相のMD計算(平衡化2)

先ほどの平衡化1の計算が終了後、同様に「MD>Gromacs>キーワード設定」にて「Extending Simulation」をチェックを入れ、まず「Preset」に「NVT (fast)」を指定する。次に、「Basic」タブの「nsteps」に「25000」、「Advance」タブの「constraints」に「all-bonds」を指定し「OK」する。そして「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。



1. 成分1の液相のMD計算(平衡化3・本計算)

同様に、「MD>Gromacs>キーワード設定」にて、まず「Preset」に「NPT (fast)」を指定する。次に、「Basic」タブの「nsteps」に「25000」、「Advance」タブの「constraints」に「all-bonds」を指定し「OK」する。そして「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。



また、最後に、キーワードは変更せず、再度「MD>Gromacs>Gromacs実行」から本計算を実行する。

II. 成分1の気相のMD計算(系の作成)

「ファイル>開く」から先ほどの「benzene.mol2」を開く。

The screenshot shows the X-Ability software interface. The main window displays a ball-and-stick model of a benzene molecule (C₆H₆) with two hydrogen atoms highlighted by red circles. The interface includes a menu bar, a toolbar, and a central workspace. On the right side, there is a control panel with options for 'Plain', 'Normal', and 'Number' views, and sliders for 'Zoom', 'Atom', and 'Bond' settings. Below the control panel, a table displays the coordinates for the atoms in the system.

Winmostar 12 C6H6 78.11 -2.6425 2.1603 0.0007
11-12-2-12 Leng=2.4946 Ang=60 Dihed=0 Lper=0 H

Atom	X	Y	Z	Occupancy	Charge	Mass
1 C	0	1	0	1	0	12.011
2 H	1.09966	1	0	1	0	1.008
3 C	1.39504	1	120.0019	1	0	12.011
4 C	1.39504	1	119.9984	1	179.9993	12.011
5 C	1.39504	1	120.0021	1	-179.971	12.011
6 C	1.39505	1	119.9993	1	-179.972	12.011
7 C	1.39505	1	119.9979	1	-0.0166	12.011
8 H	1.09967	1	119.998	1	-0.0273	1.008
9 H	1.09966	1	120.0066	1	179.9743	1.008
10 H	1.09966	1	120.0017	1	-0.0044	1.008
11 H	1.09966	1	120.0033	1	179.9323	1.008
12 H	1.09966	1	120.0049	1	-179.984	1.008

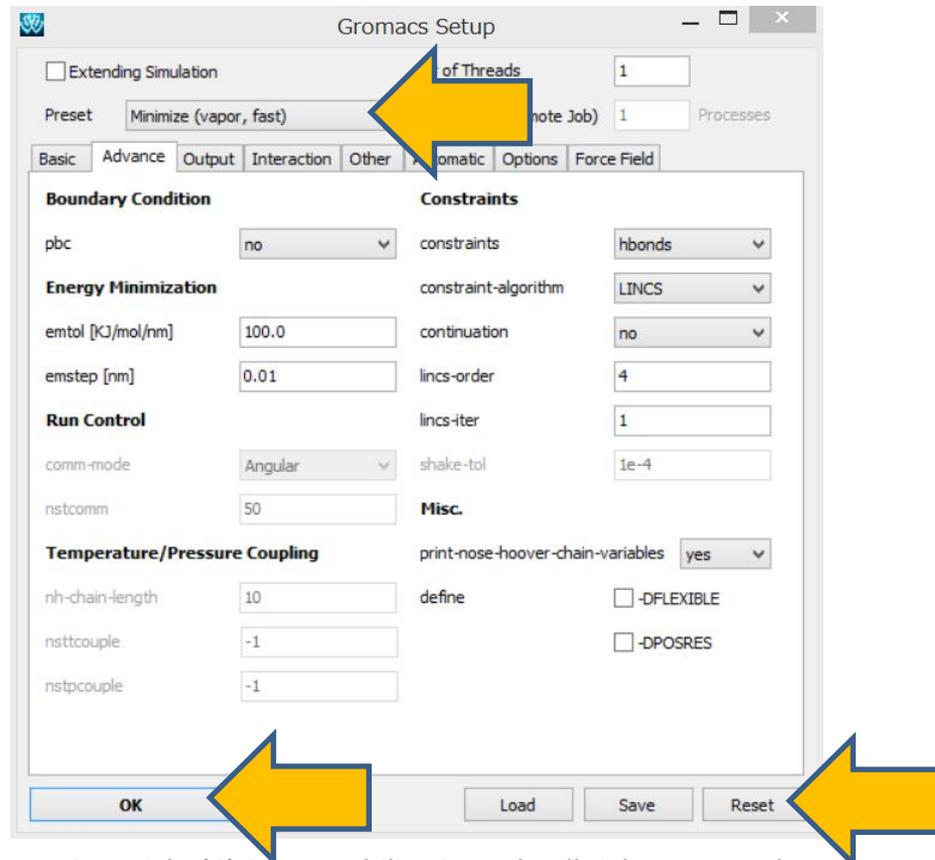
AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF MMOK
Winmostar

Atom	Element	X	Y	Z	Occupancy	Charge	Mass
11	H	1.099667	120.0033	179.9929	6	3	1

XYZ 1 1 1

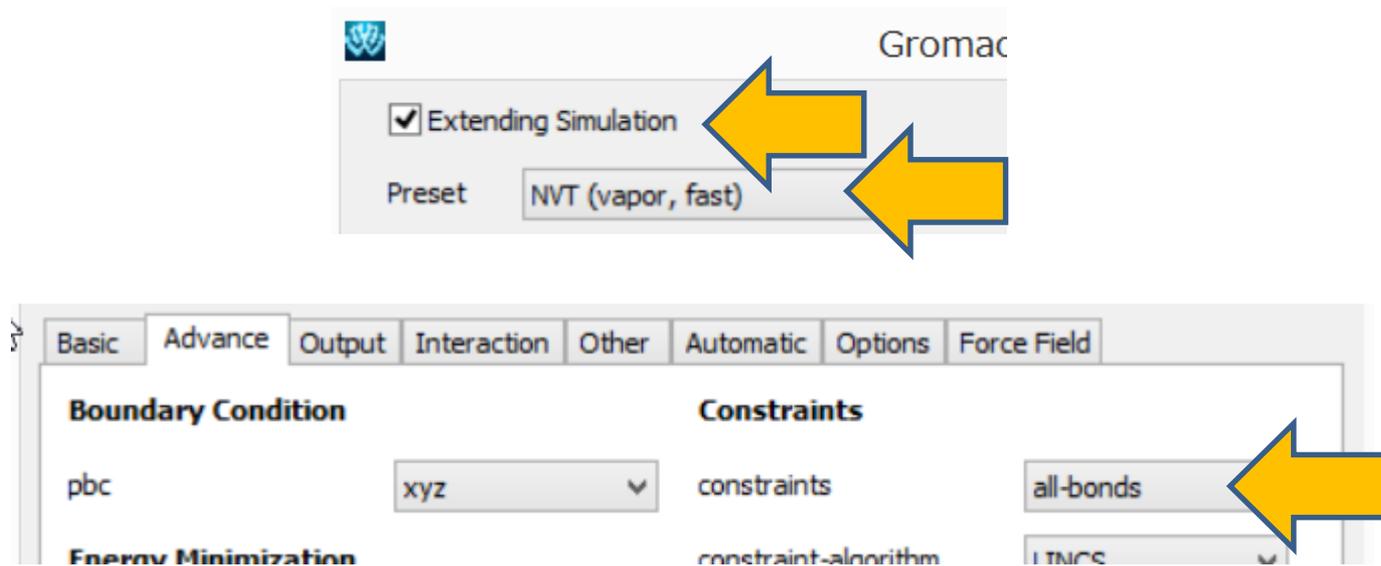
II. 成分1の気相のMD計算(平衡化1)

「MD>Gromacs>キーワード設定」にて、まず「Reset」し、「Preset」に「Minimize (vapor, fast)」を指定して「OK」とする。「MD>Gromacs>Gromacs実行」し、座標ファイルは「c6h6_vapor.gro」、トポロジファイルは「c6h6_vapor.top」とする。



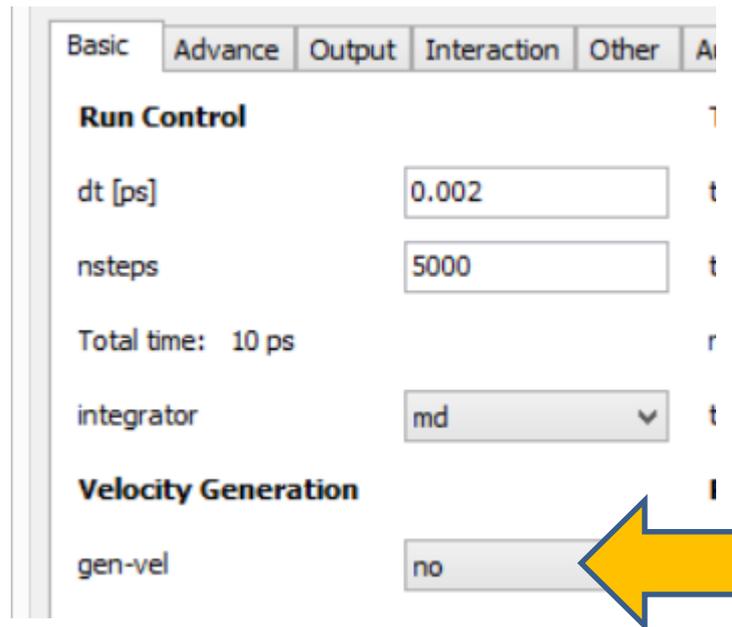
II. 成分1の気相のMD計算(平衡化2)

先ほどの平衡化1の計算が終了後、同様に「MD>Gromacs>キーワード設定」にて「Extending Simulation」をチェックを入れ、まず「Preset」に「NVT (vapor, fast)」を指定する。次に、「Advance」タブの「constraints」に「all-bonds」を指定し「OK」する。そして「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。



II. 成分1の気相のMD計算(本計算)

「MD>Gromacs>キーワード設定」の「Basic」タブの「gen-vel」を「no」に設定し「OK」とし、「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。



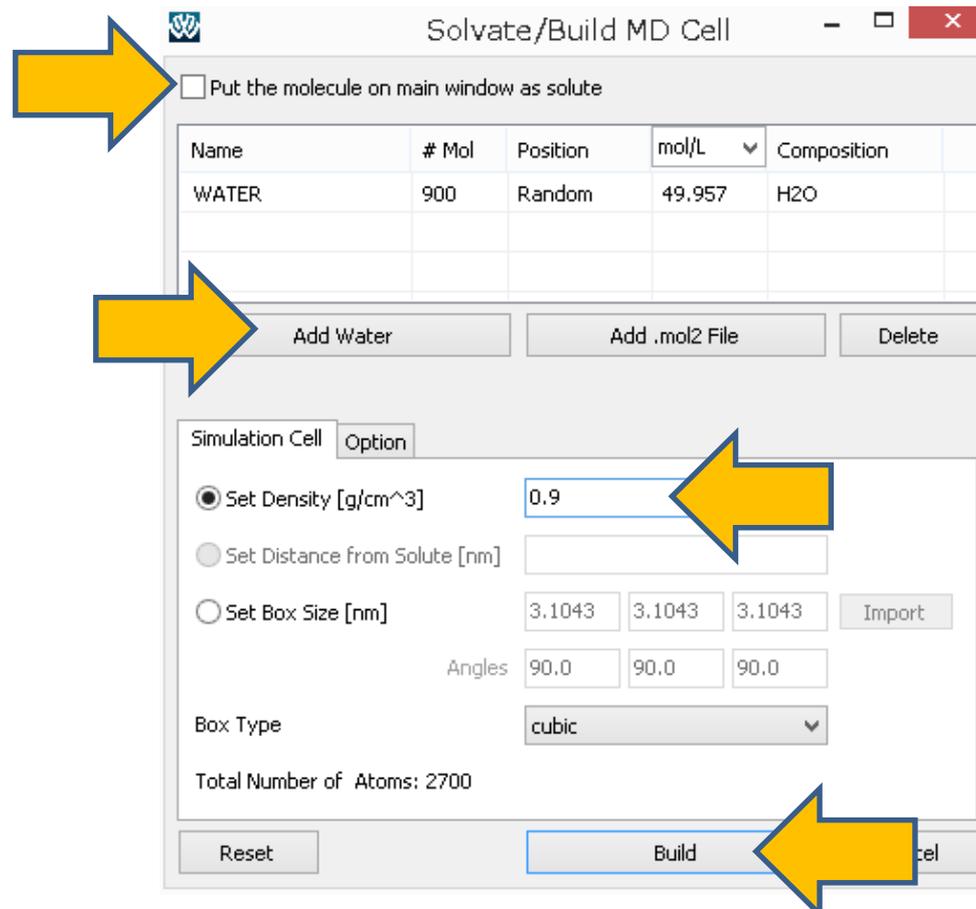
The image shows a screenshot of a software configuration window with several tabs: Basic, Advance, Output, Interaction, Other, and A. The 'Basic' tab is selected. Under the heading 'Run Control', there are fields for 'dt [ps]' (0.002), 'nsteps' (5000), and 'Total time: 10 ps'. Below this is the 'Velocity Generation' section, where the 'gen-vel' field is set to 'no'. A large yellow arrow points to the 'no' value in the 'gen-vel' field.

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. 結果処理」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)

「MD>溶媒を配置/系を作成」において「Put the molecule on main window as solute」のチェックを外し、「Add Water」ボタンで「900」個の水分子を追加し、「Set Density」の値を「0.9」に変更し「Build」する。

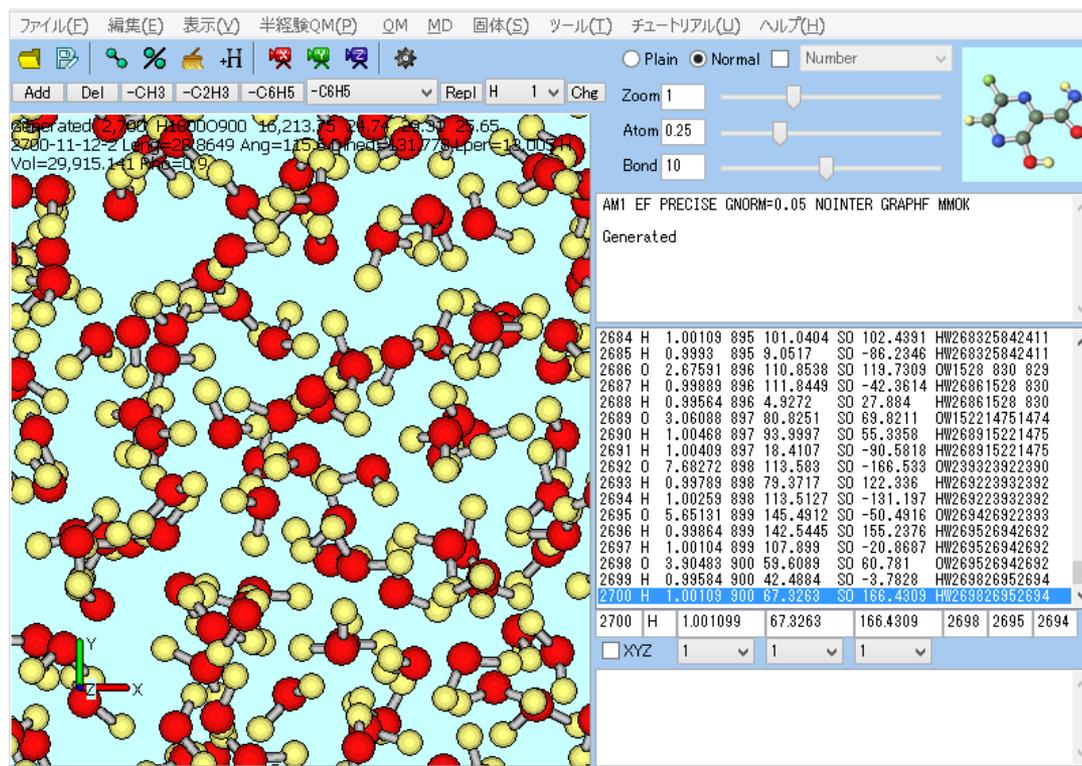


III. 成分2の液相のMD計算

作成された系は下図のようになる。

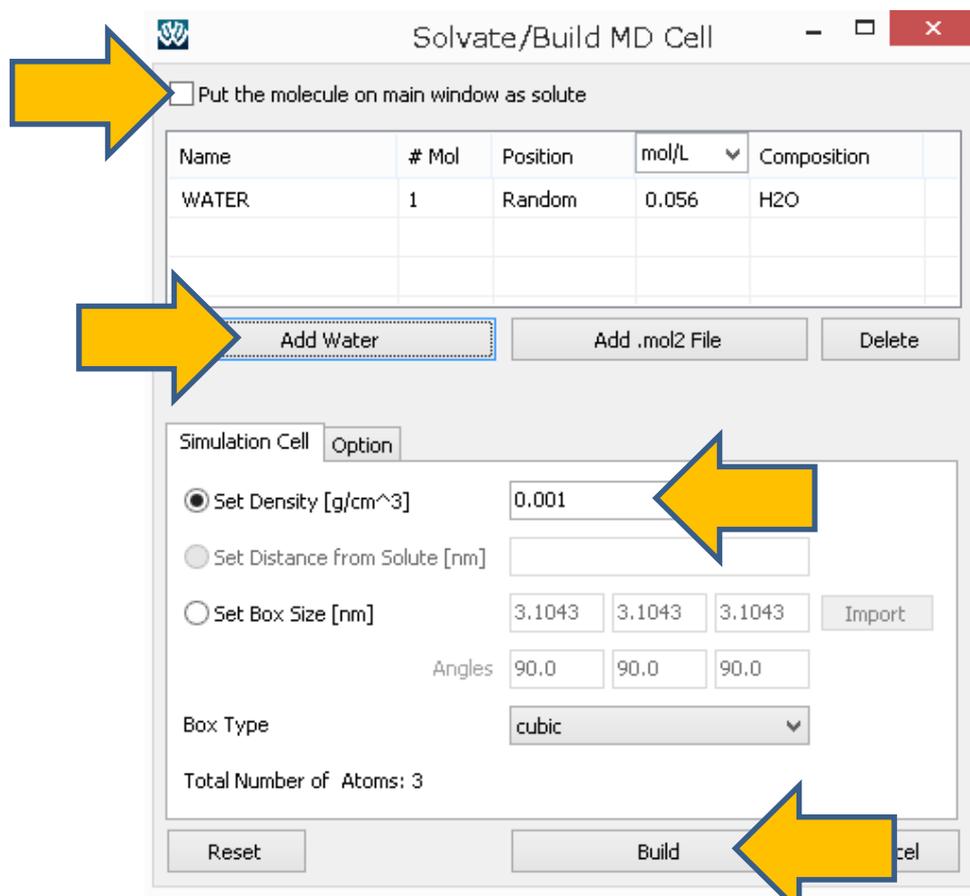
成分1の液相のMD計算(平衡化1~3および本計算)の手順に従い、成分2の液相の計算も実施する。

保存する座標ファイルの名前は「h2o_liquid.gro」、トポロジファイルの名前は「h2o_liquid.top」とする。



III. 成分2の気相のMD計算(系の作成)

「MD>溶媒を配置/系を作成」において「Put the molecule on main window as solute」のチェックを外し、「Add Water」ボタンで「1」個の水分子を追加し、「Set Density」の値を「0.001」に変更し「Build」する。



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。(分子が表示領域外に出ている場合もあるので、その場合はズームアウトすると分子を確認できる。)

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の名前は「h2o_vapor.gro」、トポロジファイルの名前は「h2o_vapor.top」とする。

ファイル(E) 編集(E) 表示(V) 半経験QM(P) QM MD 固体(S) ツール(T) チュートリアル(L) ヘルプ(H)

Zoom 0.26
Atom 0.25
Bond 10

AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF MMOK
Generated

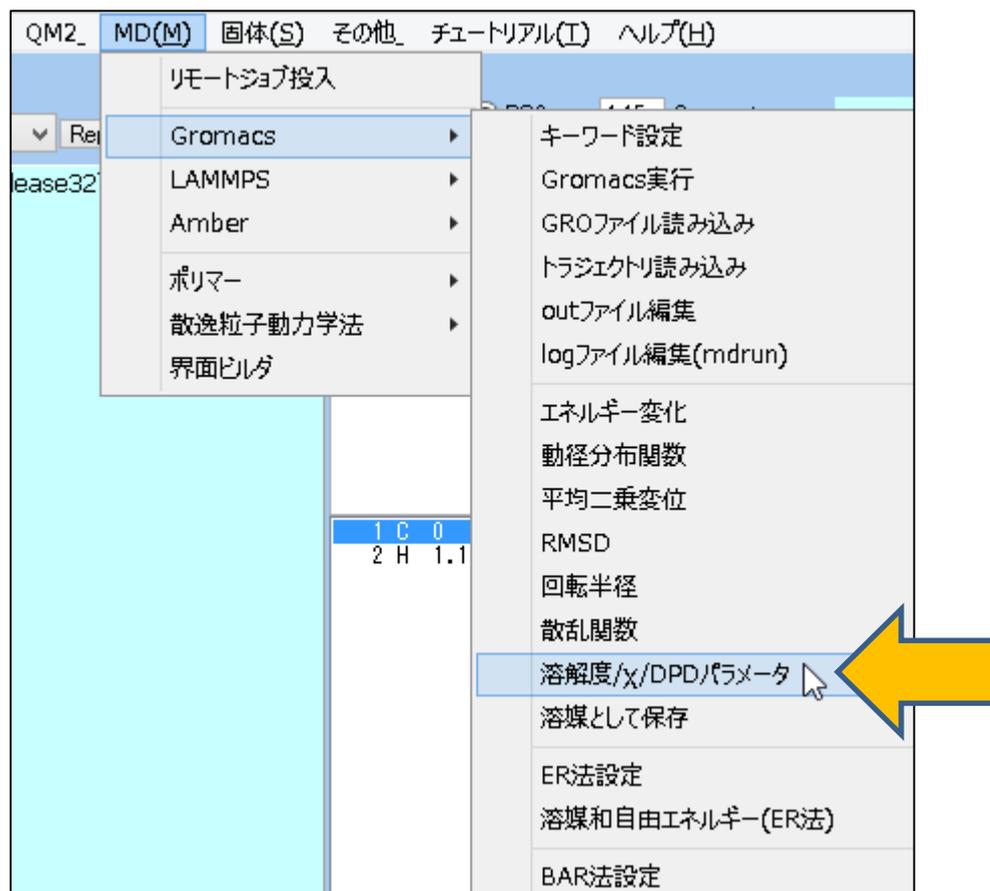
1	O	0	1	0	SO	0	OW	0	0	0
2	H	1.00109	1	0	SO	0	HW	1	0	0
3	H	0.99993	1	109.9844	SO	0	HW	1	2	0

3 H 0.99993 109.9844 0 1 2 0

XYZ 1 1 1

IV. 結果処理

「MD > Gromacs > 溶解度/ χ /DPDパラメータ」を選択する。



IV. 結果処理

「Molecule A」タブにて「Select..」を押し、それぞれ以下のように選択する。

- 「Liquid Phase」の「edr File」には「c6h6_liquid_gmx_tmp」配下の「gmx_tmp_mdrun.edr」
- 「Liquid Phase」の「gro File」には「c6h6_liquid_gmx_tmp」配下の「gmx_tmp_mdrun.gro」
- 「Vapor Phase」の「edr File」には「c6h6_vapor_gmx_tmp」配下の「gmx_tmp_mdrun.edr」

Molecule A	Molecule B	Chi / Aij
Liquid Phase	edr File	(not selected) <input type="button" value="Select..."/>
	gro File	(not selected) <input type="button" value="Select..."/>
Vapor Phase	edr File	(not selected) <input type="button" value="Select..."/>

Properties			
Molar Volume	Vma	[m ³ /mol]	<input type="text"/>
Temperature	T	[K]	<input type="text"/>
Isothermal Compressibility	Kt	[J/m ³]	<input type="text"/>
Dimensionless Compressibility	$K=Vma/(R*T*kt)$	[-]	<input type="text"/>
DPD Parameter	$Aii=(K-1)/(0.2*rho)$	[-]	<input type="text"/>
Liquid Potential Energy	Ei	[kJ/mol]	<input type="text"/>
Vapor Potential Energy	Ev	[kJ/mol]	<input type="text"/>
Cohesive Energy	$dE=Ev-Ei$	[kJ/mol]	<input type="text"/>
Solubility Parameter	$da=sqrt(dE/Vma)$	[(J/cm ³) ^{1/2}]	<input type="text"/>

IV. 結果処理

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_{ii} 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。

Chi/Solubility Parameters

Molecule A | Molecule B | Chi / Aij

Liquid Phase edr File: ps7\UserData%c6h6_liquid_gmx_tmp%gmx_tmp_mdrun.edr [Select...]
 gro File: C:\winmos7\UserData%c6h6_liquid_gmx_tmp%gmx_tmp_m [Select...]
 Vapor Phase edr File: C:\winmos7\UserData%c6h6_vapor_gmx_tmp%gmx_tmp_r [Select...]

Properties

Molar Volume	Vma	[m ³ /mol]	9.46654e-05
Temperature	T	[K]	302.725
Isothermal Compressibility	Kt	[J/m ³]	1.61667e-09
Dimensionless Compressibility	K=Vma/(R*T*Kt)	[-]	23.26417
DPD Parameter	Aii=(K-1)/(0.2*rho)	[-]	22.04373
Liquid Potential Energy	Ei	[kJ/mol]	24.1244
Vapor Potential Energy	Ev	[kJ/mol]	55.5702
Cohesive Energy	dE=Ev-Ei	[kJ/mol]	31.44580
Solubility Parameter	da=sqrt(dE/Vma)	[(J/cm ³) ^{1/2}]	18.22576

Reset

同種粒子間
DPDパラメータ

溶解度パラメータ

IV. 結果処理

χ およびDPDパラメータ A_{ij} を求める場合は、同様に「Molecule B」タブにて「Select..」を押し、それぞれ以下のように選択する。

- 「Liquid Phase」の「edr File」には「h2o_liquid_gmx_tmp」配下の「gmx_tmp_mdrun.edr」
- 「Liquid Phase」の「gro File」には「h2o_liquid_gmx_tmp」配下の「gmx_tmp_mdrun.gro」
- 「Vapor Phase」の「edr File」には「h2o_vapor_gmx_tmp」配下の「gmx_tmp_mdrun.edr」

Molecule A Molecule B Chi / Aij

Liquid Phase edr File Select...

gro File Select...

Vapor Phase edr File Select...

Properties

Molar Volume	Vmb	[m ³ /mol]	1.81548e-05
Temperature	T	[K]	300.252
Isothermal Compressibility	Kt	[J/m ³]	4.46234e-10
Dimensionless Compressibility	K=Vmb/(R*T*Kt)	[-]	16.29704
DPD Parameter	Aii=(K-1)/(0.2*rho)	[-]	15.14559
Liquid Potential Energy	EI	[kJ/mol]	-46.2629
Vapor Potential Energy	Ev	[kJ/mol]	0
Cohesive Energy	dE=Ev-EI	[kJ/mol]	46.26290
Solubility Parameter	db=sqrt(dE/Vmb)	[(J/cm ³) ^{1/2}]	50.48016

同種粒子間
DPDパラメータ

溶解度パラメータ

IV. 結果処理

「Chi/Aij」タブに、以下のように 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]	1.8155E-005
Chi Parameter	Chi=Vb*(da-db)/RT	[-]	3.76734
DPD Parameter	Aij-Aii	[-]	5.46264

Citation

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

Reset

χ パラメータ

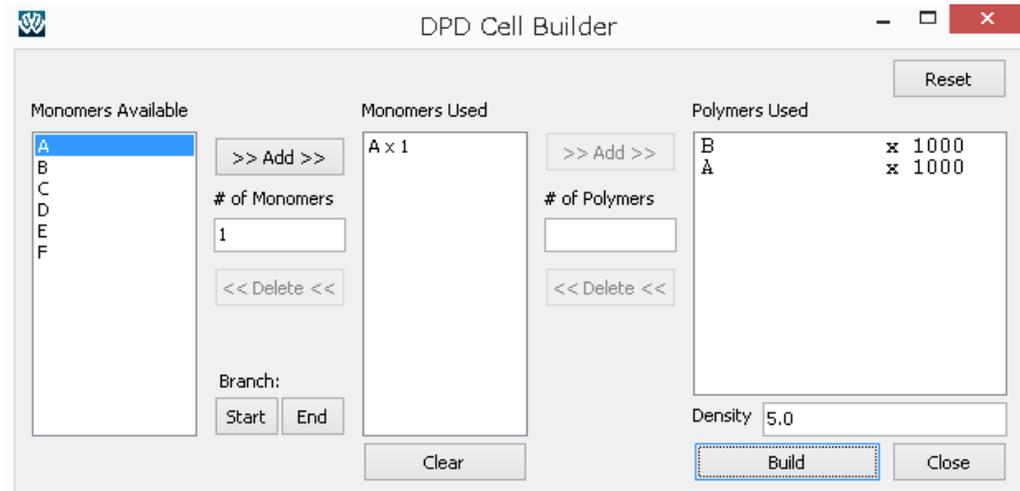
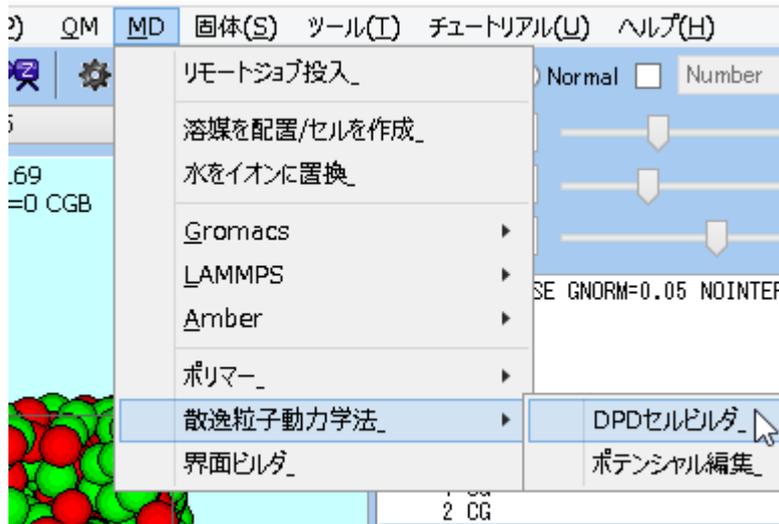
異種粒子間
DPDパラメータ

V. DPD計算の設定

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。

「MD>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P.28の「Density for DPD」の値を入力する。



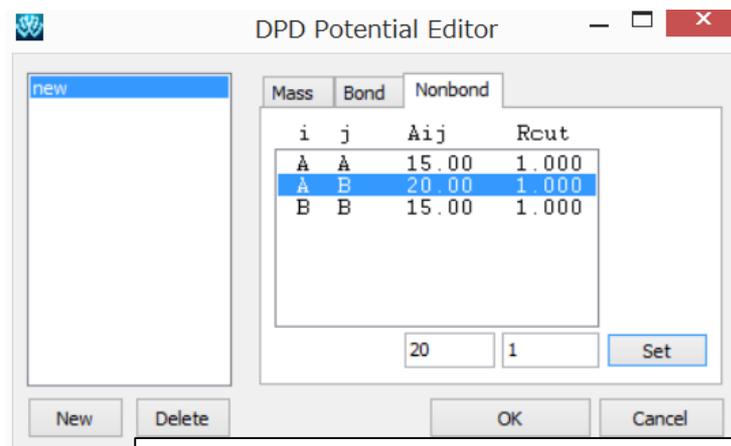
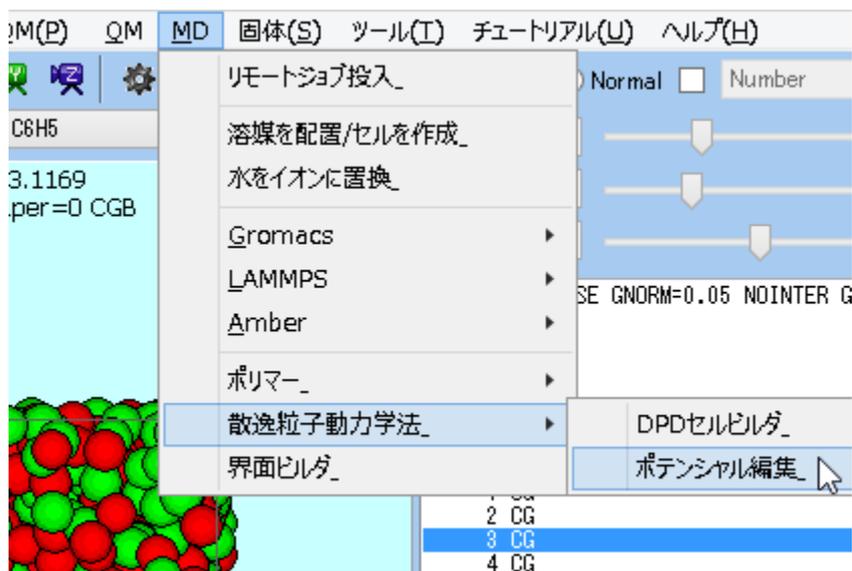
V. DPD計算の設定

次に、「MD>散逸粒子動力学>ポテンシャル編集」の「Nonbond」タブにおいては、A-A間やB-B間の A_{ij} については、P.26で取得した同種粒子間DPDパラメータ A_{ii} 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パラメータにP.28で取得した異種粒子間DPDパラメータ($A_{ij}-A_{ii}$)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), 2014, 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

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!