

Winmostar チュートリアル

Gromacs 界面張力 V7.016

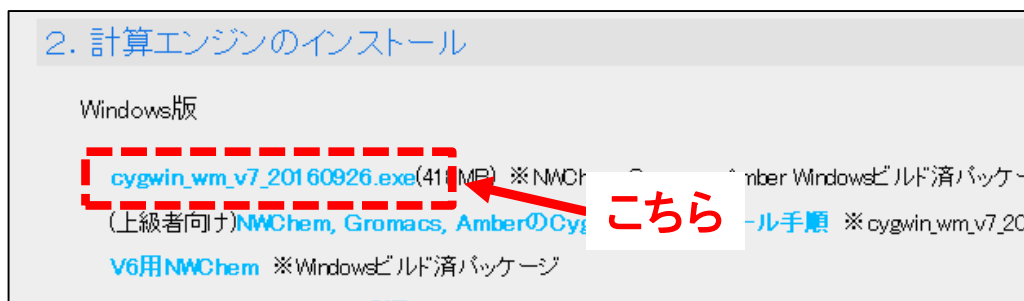
株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2017/5/1

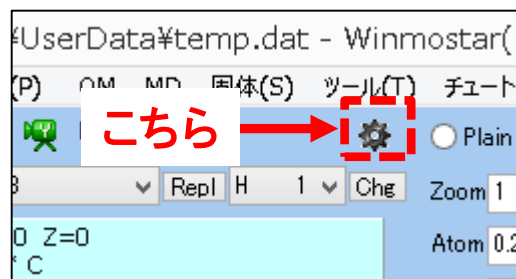
動作環境設定

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。



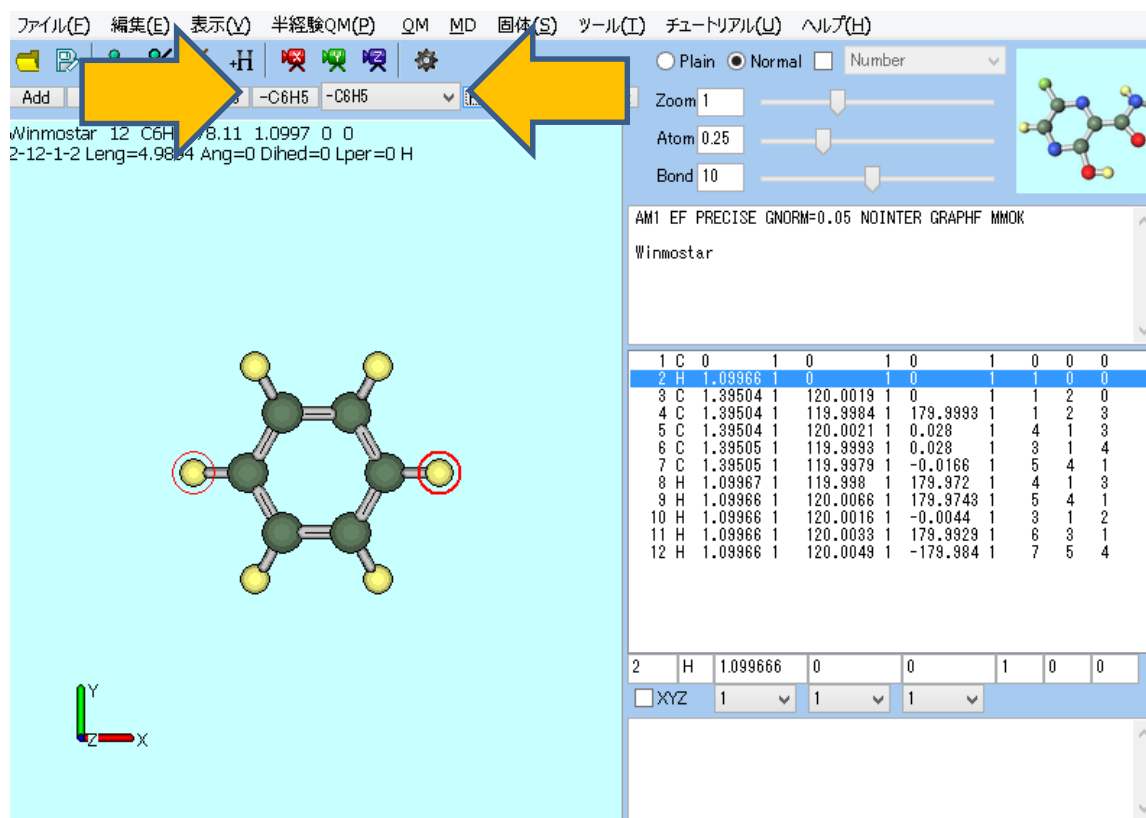
注意点

- 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、系のサイズなどが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)

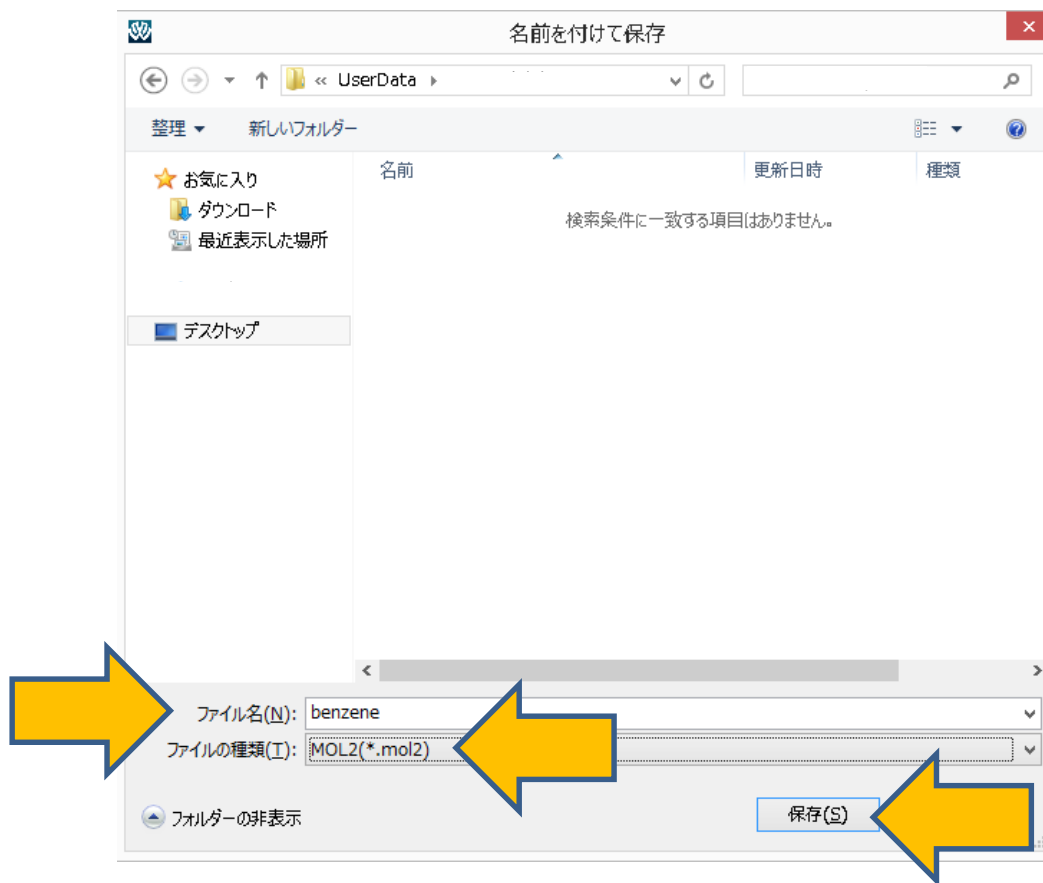
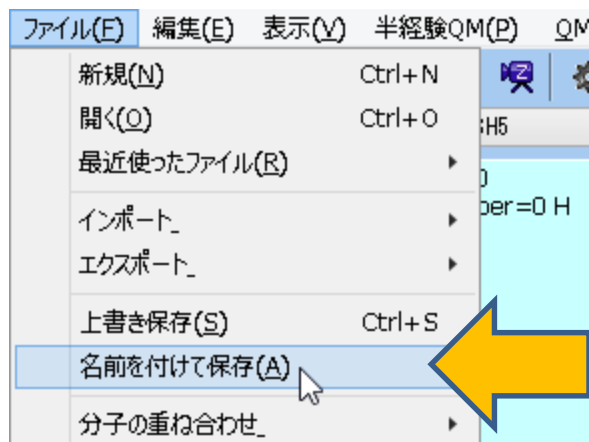
ここでは成分1をベンゼンとする。

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。



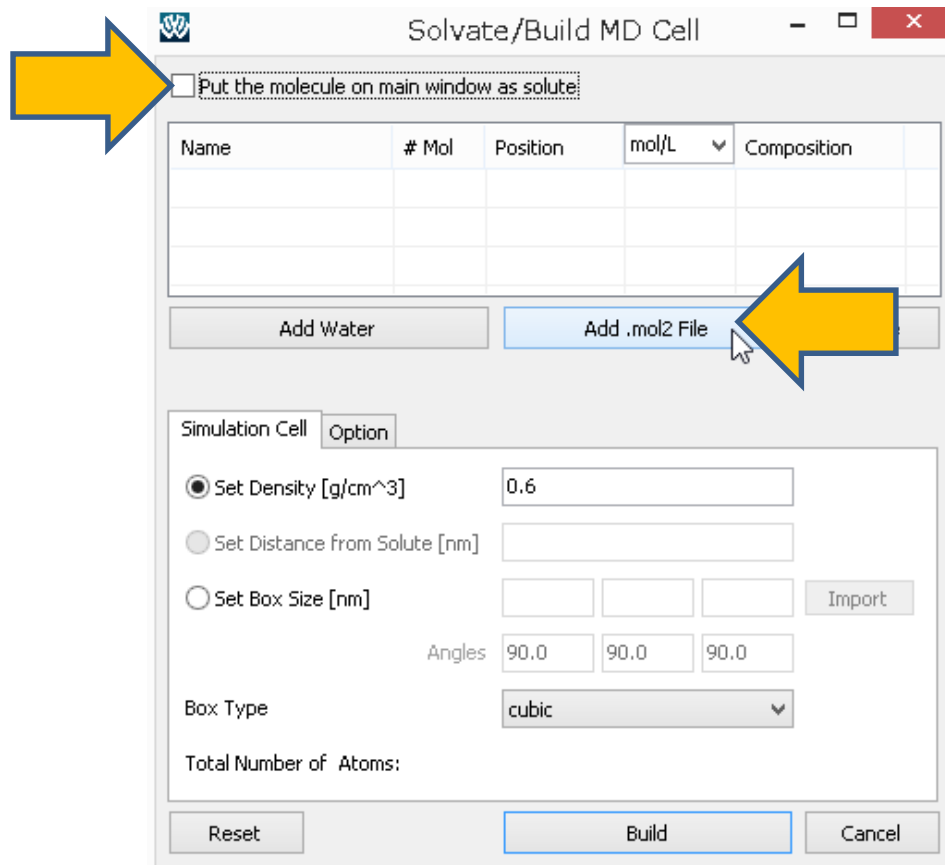
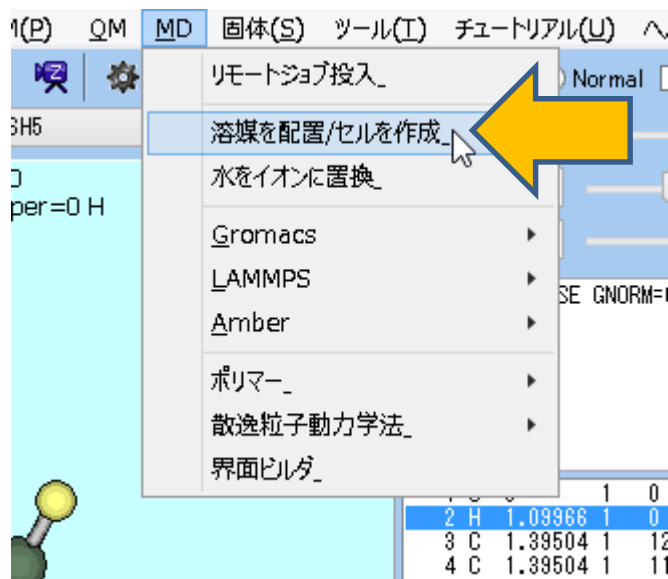
I. 成分1の液相のMD計算(モデリング)

「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。



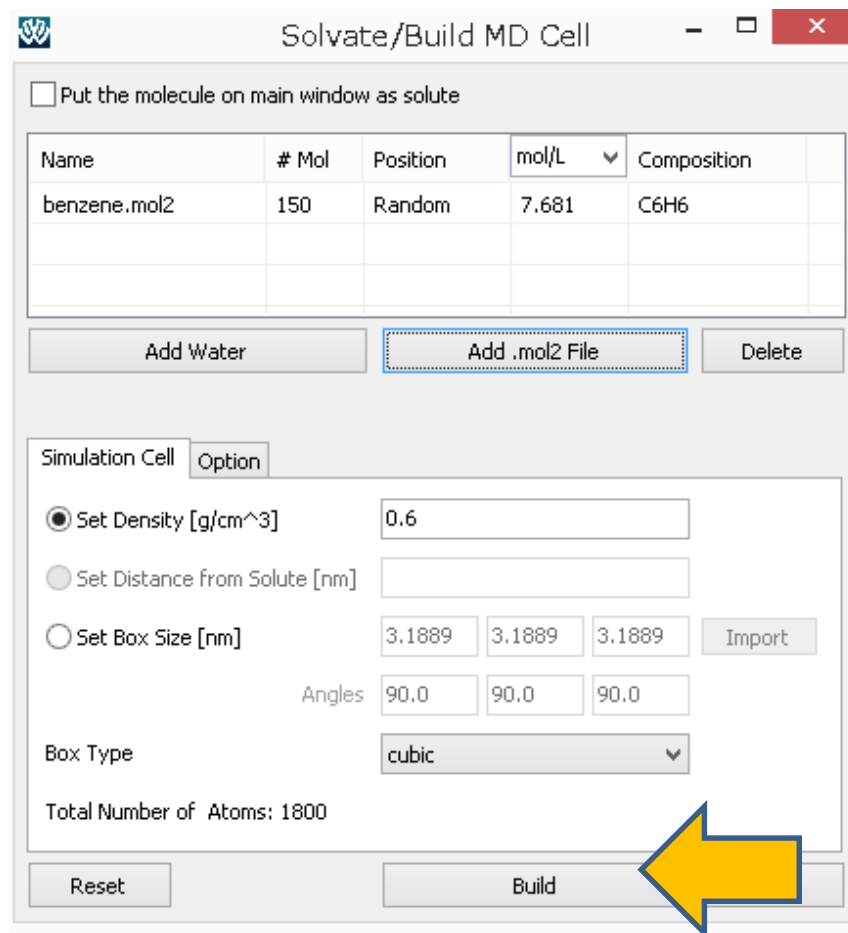
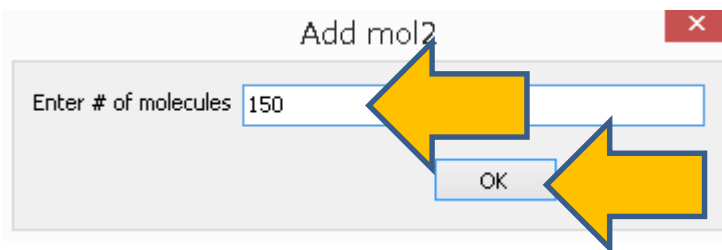
I. 成分1の液相のMD計算(系の作成)

「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。



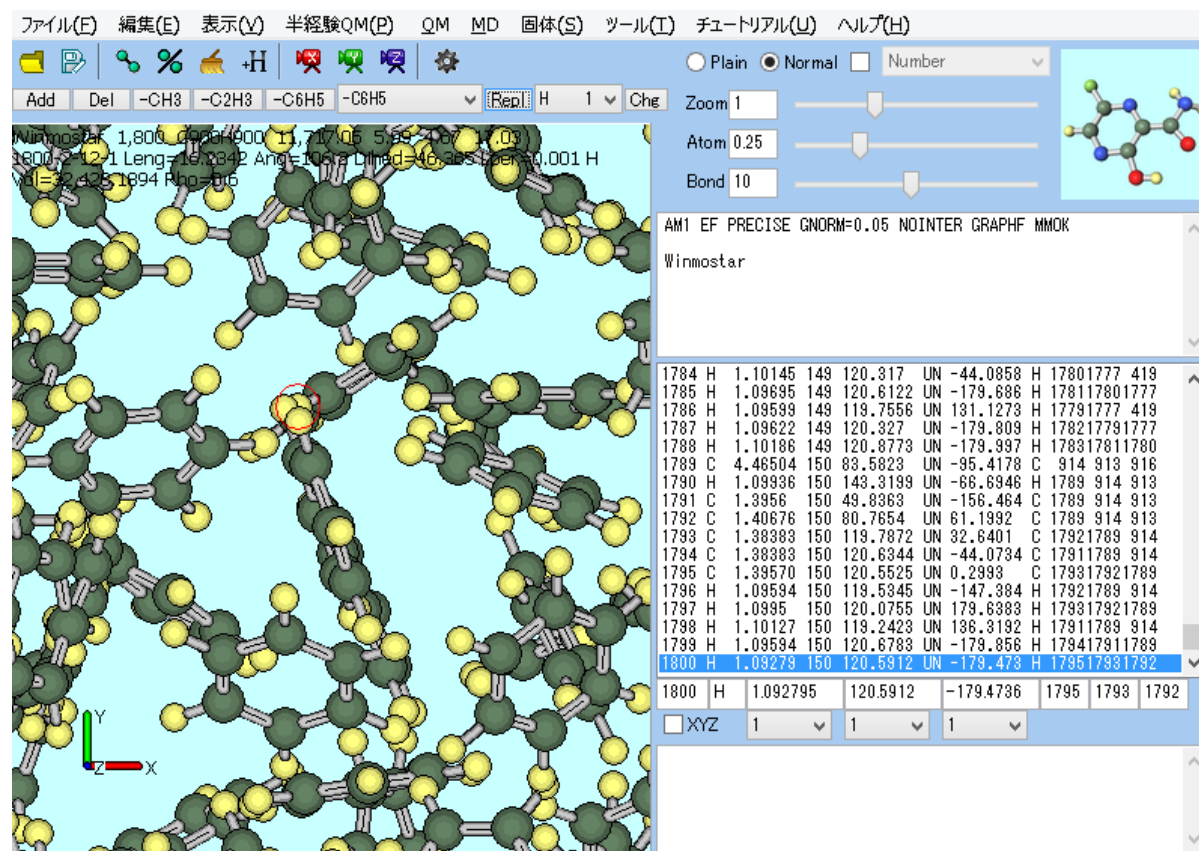
I. 成分1の液相のMD計算(系の作成)

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。



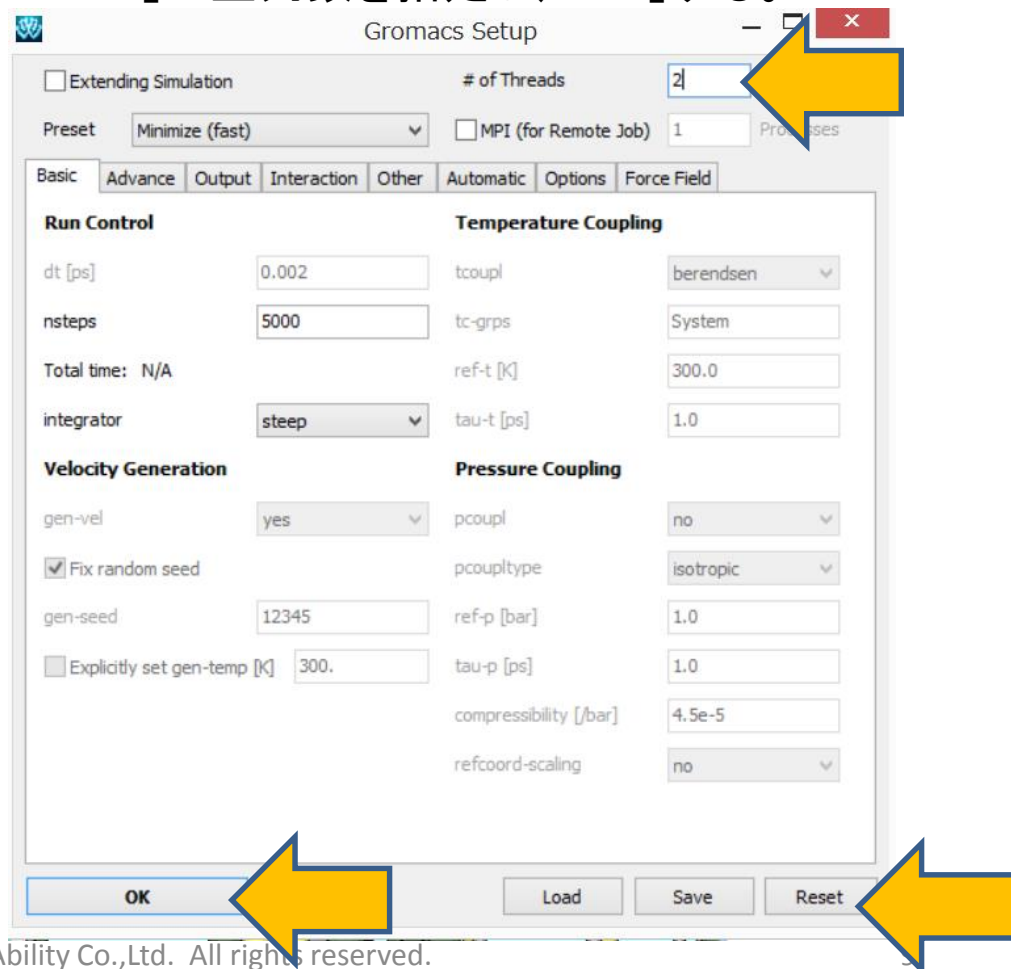
I. 成分1の液相のMD計算(系の作成)

以下のように、メイン画面に作成された系が表示される。



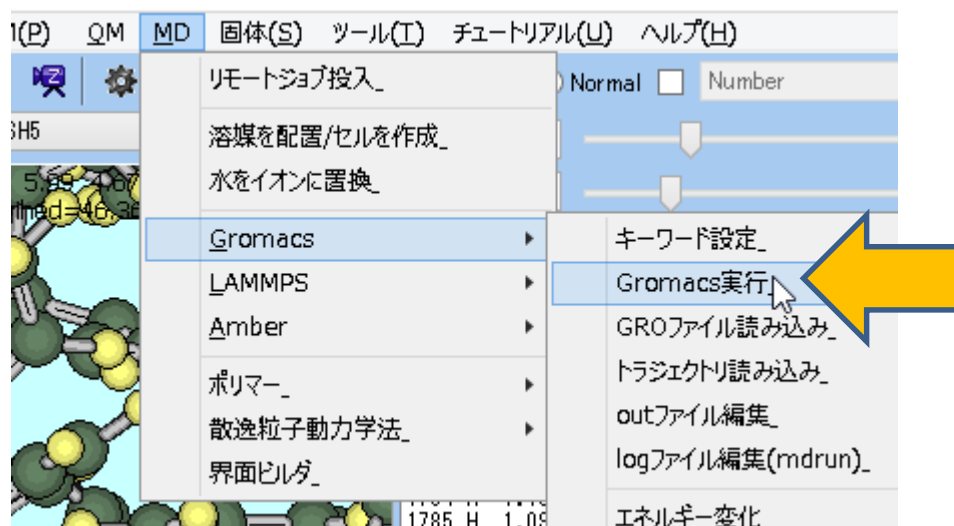
I. 成分1の液相のMD計算(平衡化1)

「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。



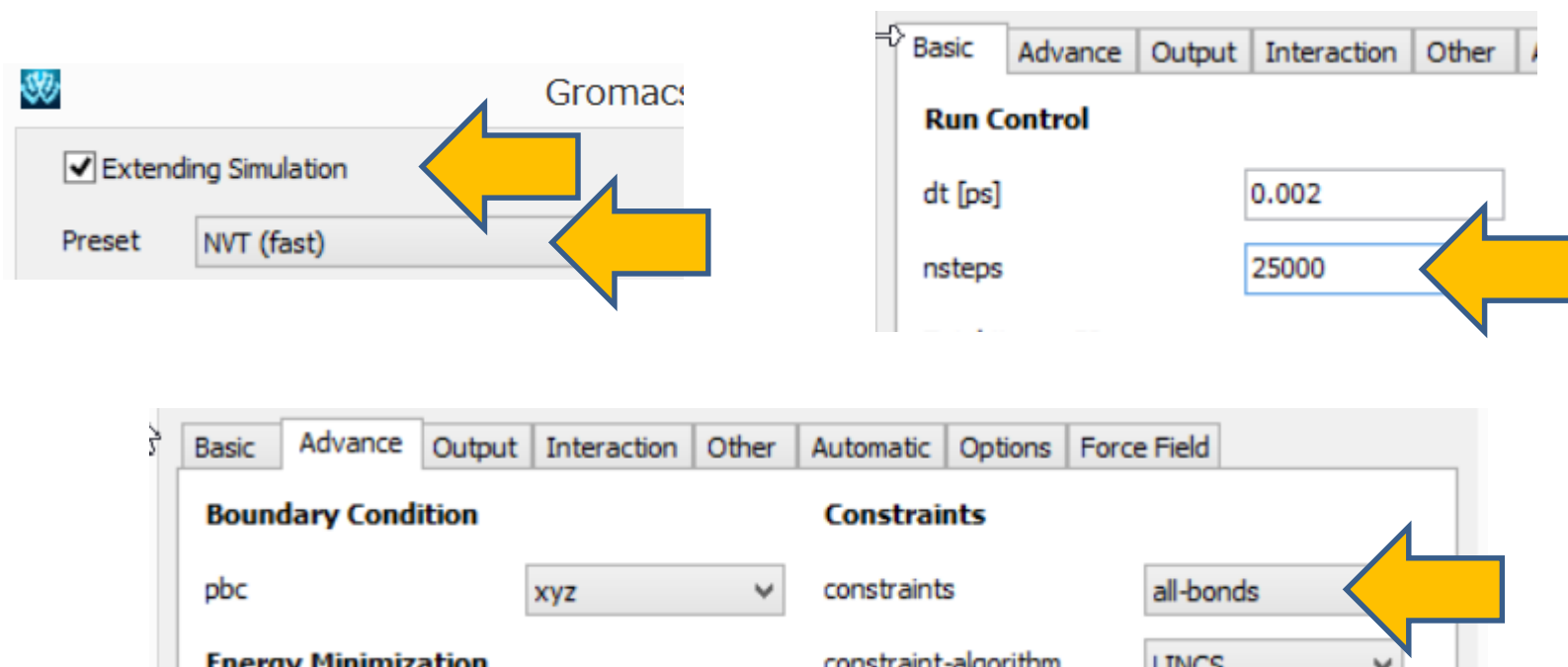
I. 成分1の液相のMD計算(平衡化1)

「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「benzene.gro」、次に聞かれるトポロジファイルの名前は「benzene.top」とする。
その後、cygwinが立ち上がりGromacsの処理が開始される。



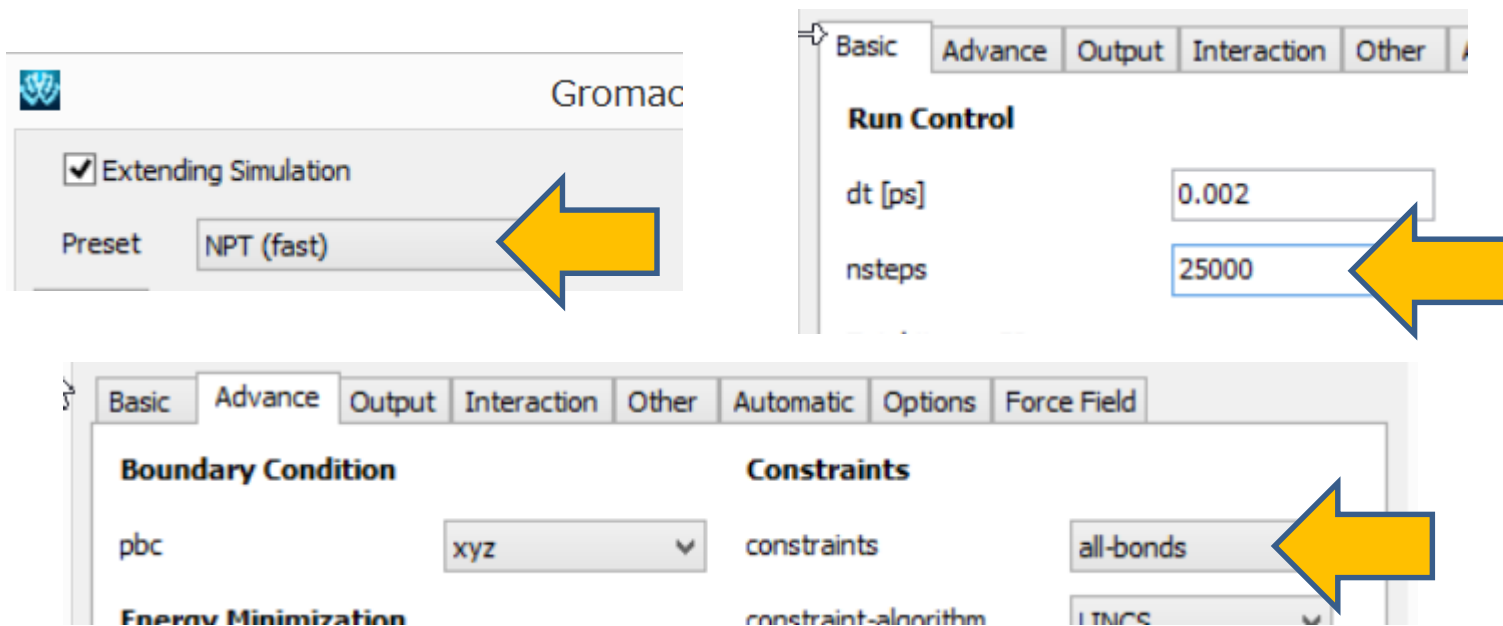
I. 成分1の液相のMD計算(平衡化2)

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。



I. 成分1の液相のMD計算(平衡化3・本計算)

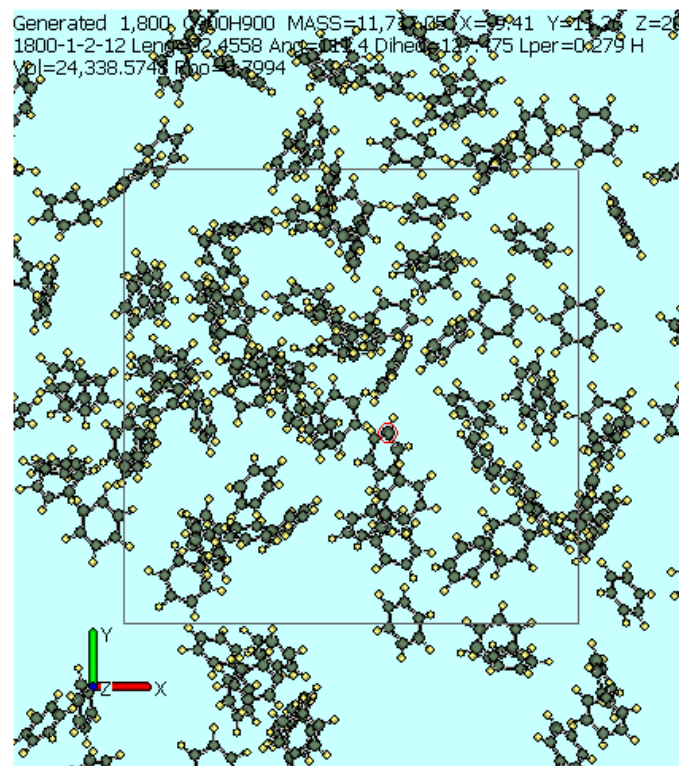
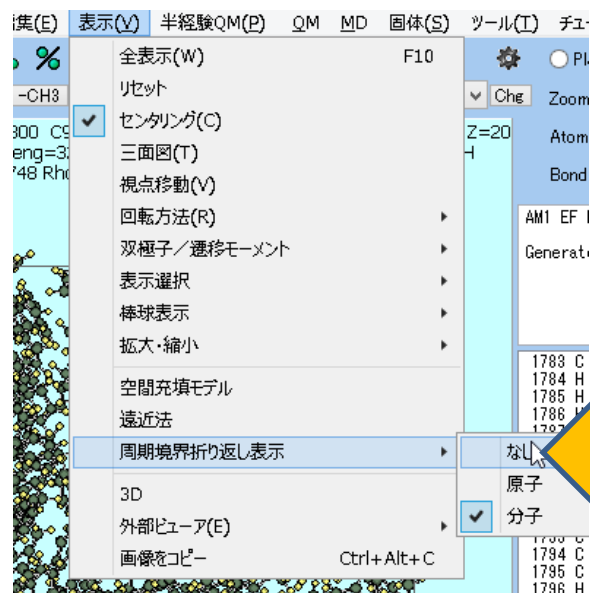
同様に、「MD>Gromacs>キーワード設定」にて、まず「Preset」に「NPT (fast)」を指定する。次に、「Basic」タブの「nsteps」に「25000」、「Advance」タブの「constraints」に「all-bonds」を指定し「OK」する。そして「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。



I. 成分1の液相のMD計算(座標の編集)

「MD>Gromacs>Groファイル読み込み」をクリックし、デフォルトで選択されるファイルを選択し、最終ステップの構造を表示する。

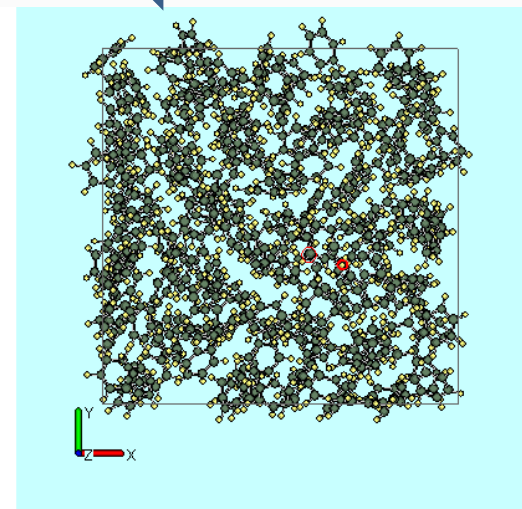
次に、「表示>周期境界折り返し表示>なし」を選択する。



I. 成分1の液相のMD計算(座標の編集)

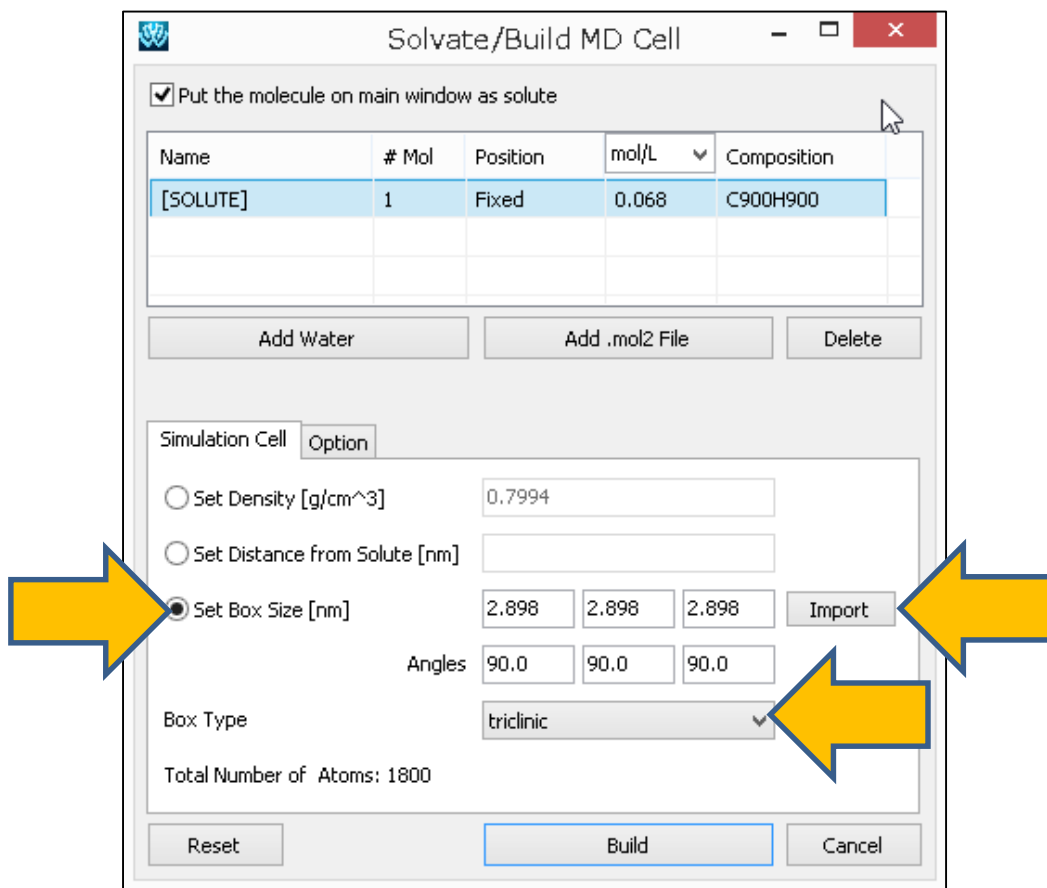
「編集＞周期境界折り返し」を選択し、「結合を保持しますか？」に対し「はい」と答え、全ての分子が周期境界セル内に収まることを確認する。

この状態で「ファイル」＞「別名で保存」から、「benzene_eq.mol2」として保存する。



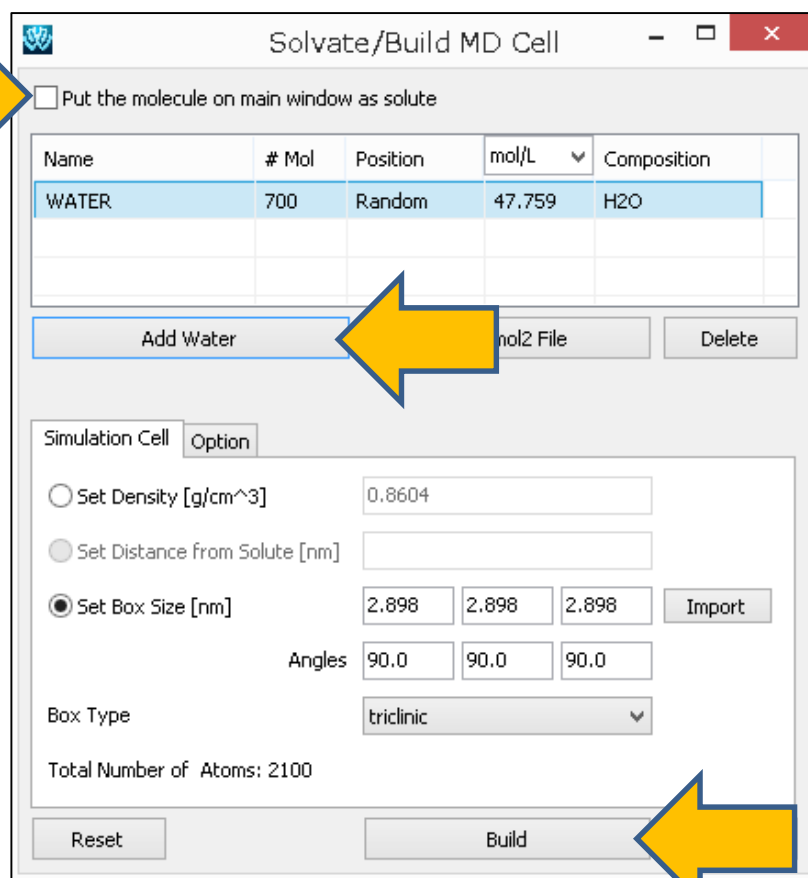
II. 成分2の液相のMD計算(系の作成)

続けて「MD＞溶媒を配置/セルを作成」を選択する。「Set Box Size」を選択し、「Import」ボタンを押し、「Box Type」に「Triclinic」を選択する。



II. 成分2の液相のMD計算(系の作成)

「Put the molecule on main window as solute」のチェックを外し、「Add Water」ボタンを押して「700」と入力し「OK」する。最後に「Build」ボタンを押す。



Solvate/Build MD Cell

☐ Put the molecule on main window as solute

Name	# Mol	Position	mol/L	Composition
WATER	700	Random	47.759	H2O

Add Water mol2 File Delete

Simulation Cell Option

☐ Set Density [g/cm³] 0.8604

☐ Set Distance from Solute [nm]

☒ Set Box Size [nm] 2.898 2.898 2.898 Import

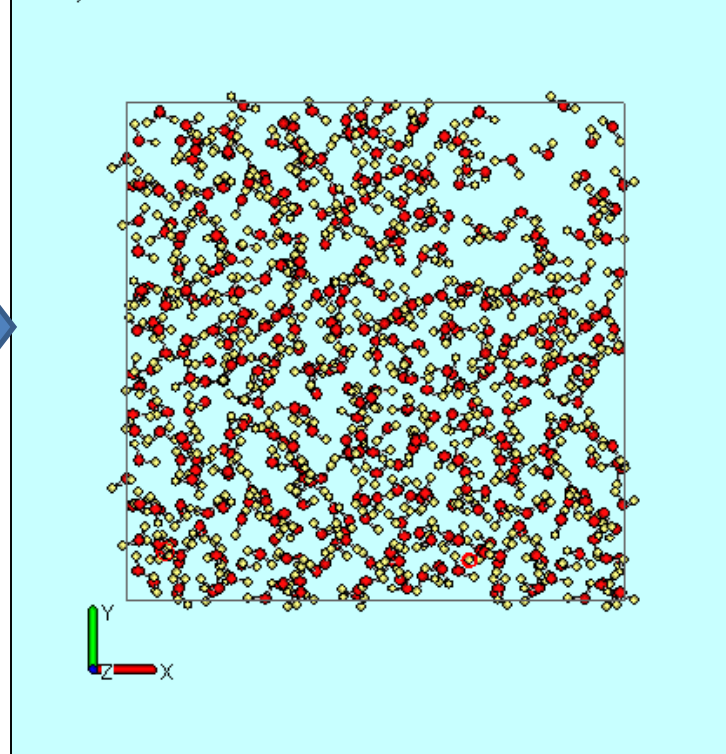
Angles 90.0 90.0 90.0

Box Type triclinic

Total Number of Atoms: 2100

Reset Build

```
Generated 2,100 H14000700 MASS=12,610.7 X=19.99 Y=2.3 Z=28.7
1800-1-2-12 Leng=25.6351 Ang=24.5 Dihed=-5.809 Lper=1.556 H
Vol=24,338.5748 Rho=0.8604
```



II. 成分2の液相のMD計算(平衡化1&2)

「MD＞Gromacs＞キーワード設定」にて「Extending Simulation」のチェックを外し、「Preset」に「Minimize (fast)」を指定する。

そして「OK」をクリックし、「MD＞Gromacs＞Gromacs実行」とする。
ファイル名は「water.gro」および「water.top」とする。

計算終了後、「MD＞Gromacs＞キーワード設定」にて、まず「Extending Simulation」をチェックし、「Preset」に「NVT (fast)」を指定し「OK」し、「MD＞Gromacs＞Gromacs実行」とする。

II. 成分2の液相のMD計算(平衡化3)

次に、「MD>Gromacs>キーワード設定」にて、「Preset」に「NPT (fast)」を指定する。
次に、以下の様に設定し「OK」とし、「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。

- 「pcoupltype」に「semiisotropic」
- 「ref-p」に「1.0 1.0」
- 「tau-p」に「1.0 1.0」
- 「compressibility」に「0 4.5e-5」

Basic Advance Interaction Automatic Other Options Force Field

Run Control

dt [ps] 0.002

nsteps 5000

integrator md

Velocity Generation

gen-vel no

☒ Fix random seed

gen-seed 1234

Temperature Coupling

tcoupl berendsen

tc-grps System

ref-t [K] 300.0

tau-t [ps] 1.0

Pressure Coupling

pcoupl parrinello-Rahma

pcoupltype semiisotropic

ref-p [bar] 1.0 1.0

tau-p [ps] 1.0 1.0

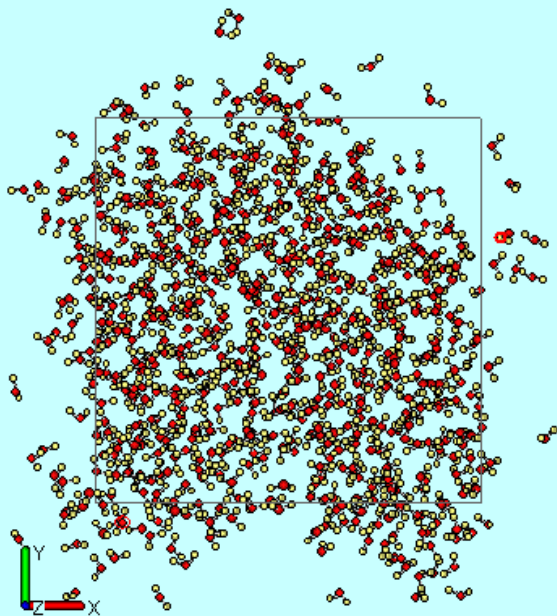
compressibility [/bar] 0 4.5e-5

refcoord-scaling no

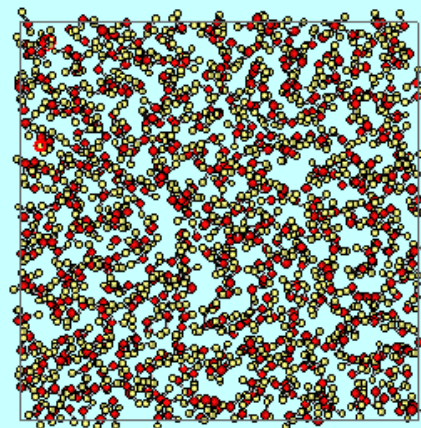
II. 成分2の液相のMD計算(座標の編集)

成分1と同様に、「MD>Gromacs>Groファイル読み込み」をクリックし、デフォルトで選択されるファイルを選択し、最終ステップの構造を表示する。次に、「編集>周期境界折り返し」を選択し、「結合を保持しますか？」に「はい」とする。この状態で「ファイル」>「別名で保存」から、「water_eq.mol2」として保存する。

Generated 2,100 H14000700 MASS=12,610.7 X=30.66 Y=20.02 Z=-4
2100-1-1800-1 Leng=37.4897 Ang=97.3 Dihed=0 Lper=0 H
Vol=21,127.6202 Rho=0.9911

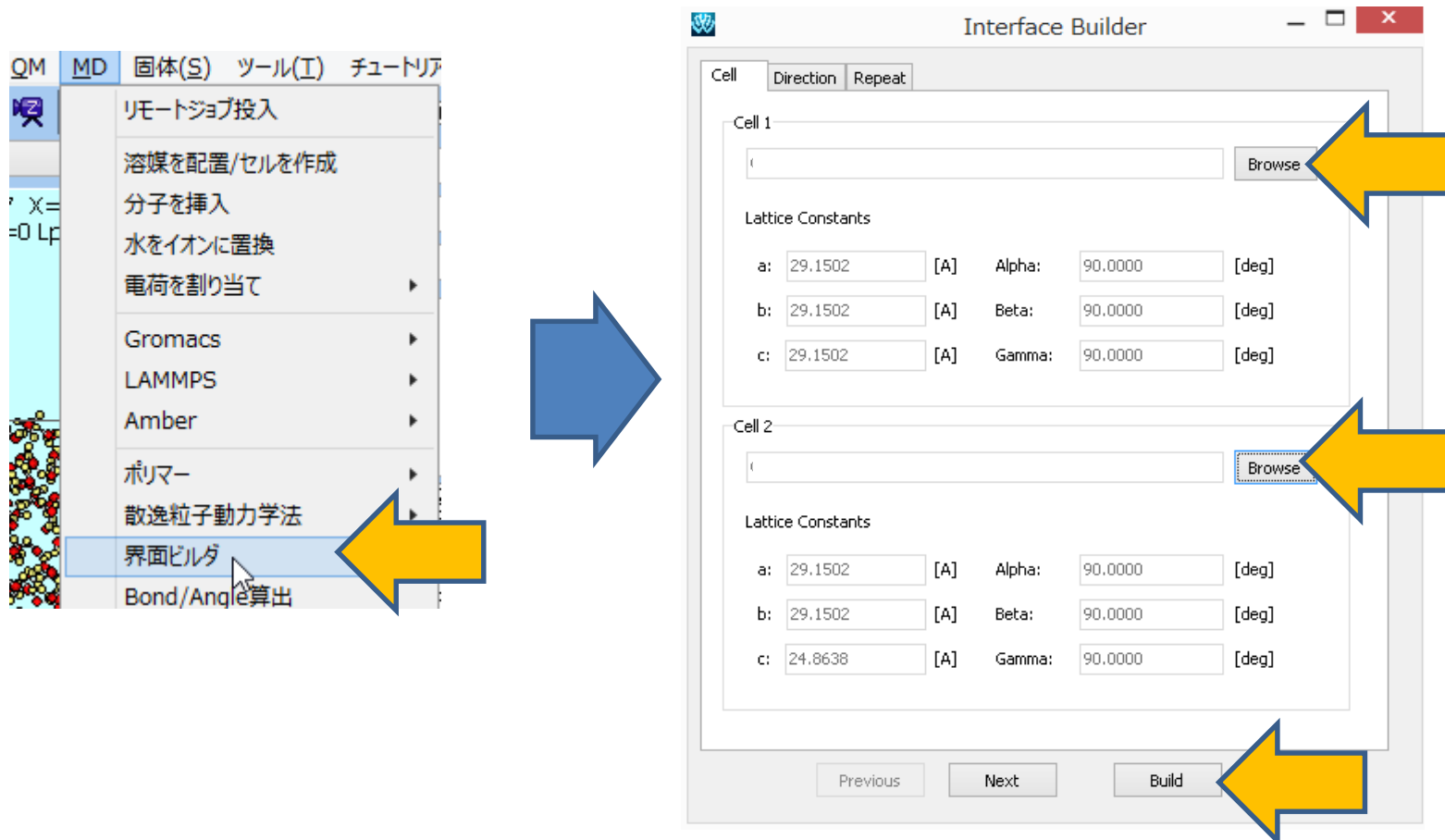


Generated 2,100 H14000700 MASS=12,610.7 X=1.5098 Y=20.02 Z
2100-1-1800-1 Leng=15.7528 Ang=69.5 Dihed=0 Lper=0 H
Vol=21,127.6202 Rho=0.9911



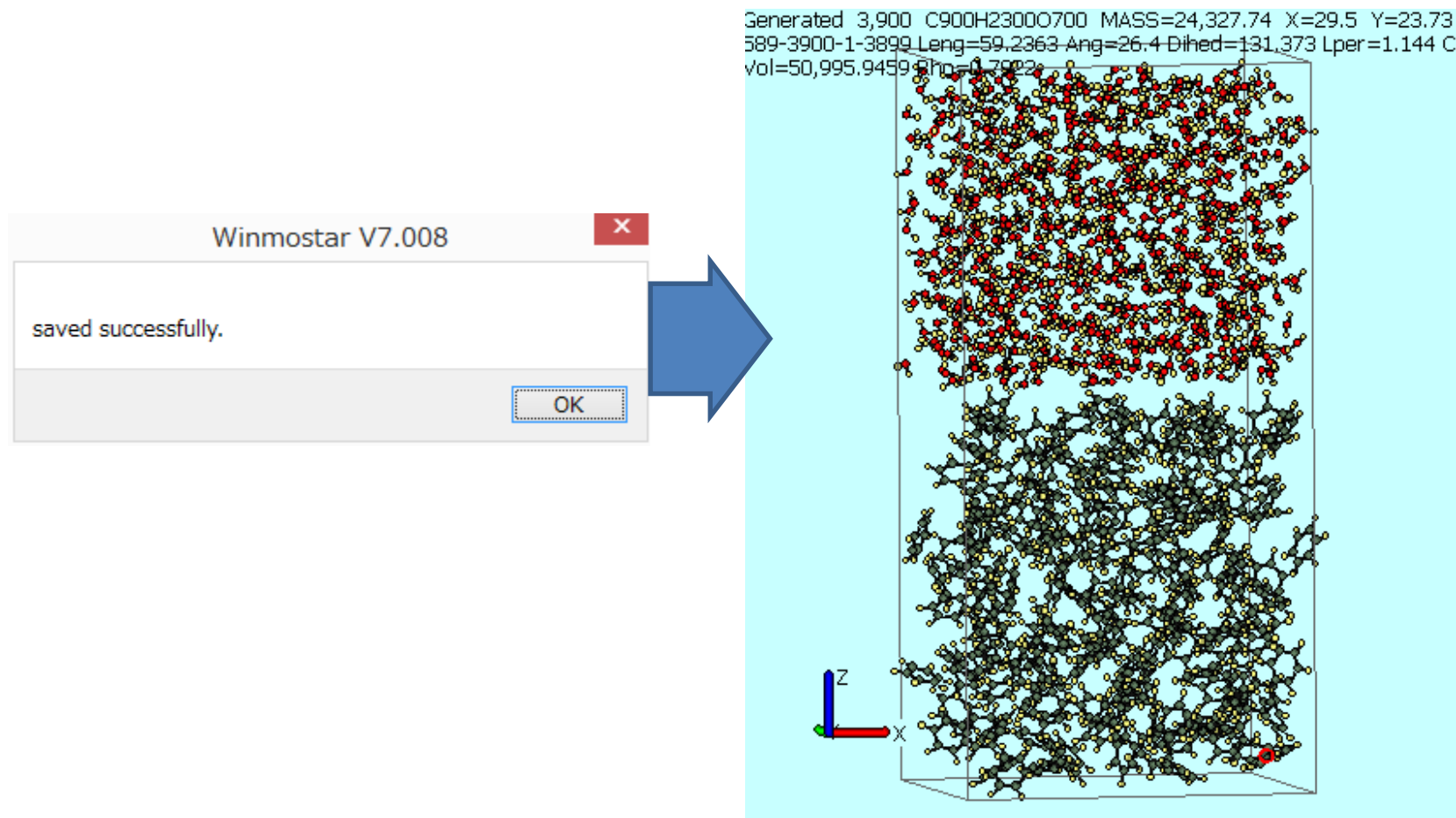
III. 界面系のMD計算(系の作成)

「MD＞界面ビルダ」を選択する。「Cell 1」に「benzene_eq.mol2」を、「Cell 2」に「water_eq.mol2」を指定し、「Build」を押す。



III. 界面系のMD計算(系の作成)

保存するファイル名を聞かれるので、仮に「interface.mol2」とし、正常に保存されたことを知らせるダイアログが表示された後界面ビルダをCloseする。



III. 界面系のMD計算(平衡化1～3)

「MD>Gromacs>キーワード設定」にて「Extending Simulation」のチェックを外し、「Preset」に「Minimize (fast)」を指定する。

そして「OK」をクリックし、「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。
ファイル名は「interface.gro」および「interface.top」とする。

計算終了後、「MD>Gromacs>キーワード設定」にて、まず「Extending Simulation」をチェックし、「Preset」に「NVT (fast)」を指定する。次に以下のように指定する。

- 「Advance」タブの「constraints」に「all-bonds」

そして「OK」をクリックし、「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。

計算終了後、「MD>Gromacs>キーワード設定」にて、「Preset」に「NPT」を指定する。次に、以下のように指定する。

- 「Basic」タブの「pcoupltype」に「semiisotropic」
- 「ref-p」に「1.0 1.0」
- 「tau-p」に「1.0 1.0」
- 「compressibility」に「0 4.5e-5」
- 「Advance」タブの「constraints」に「all-bonds」

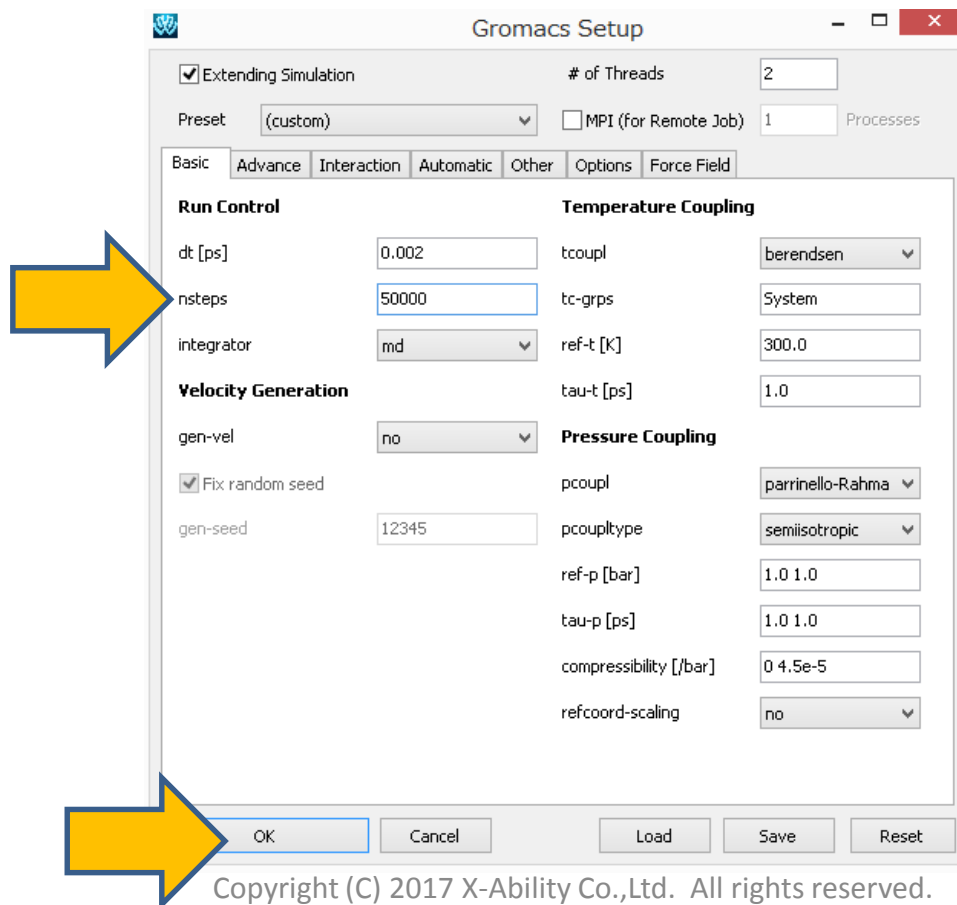
そして「OK」をクリックし、「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。

III. 界面系のMD計算(本計算)

計算終了後、「MD>Gromacs>キーワード設定」にて、以下のように指定する。

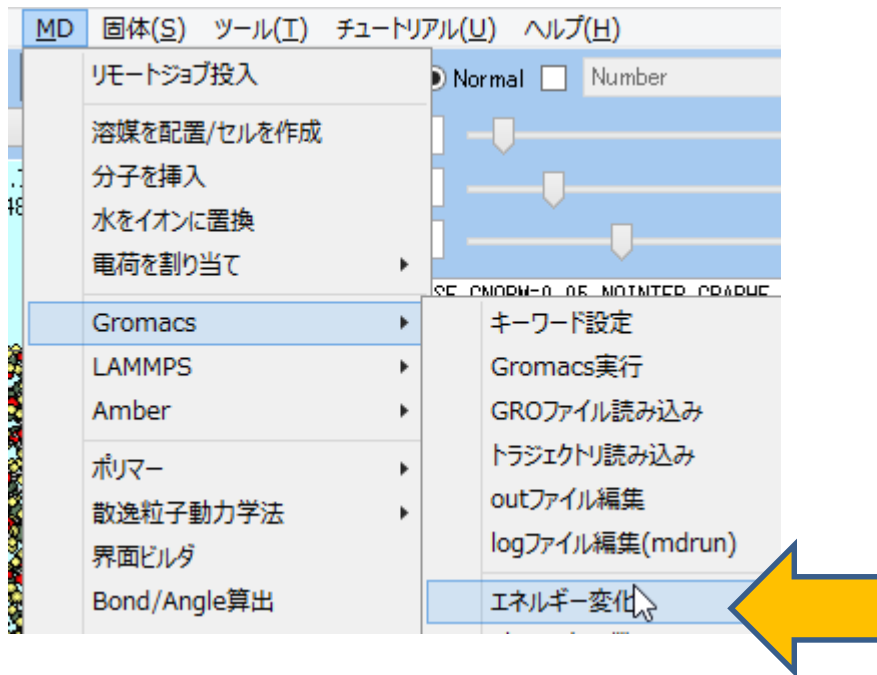
- 「Basic」タブの「nsteps」に「50000」

そして「OK」をクリックし、「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。



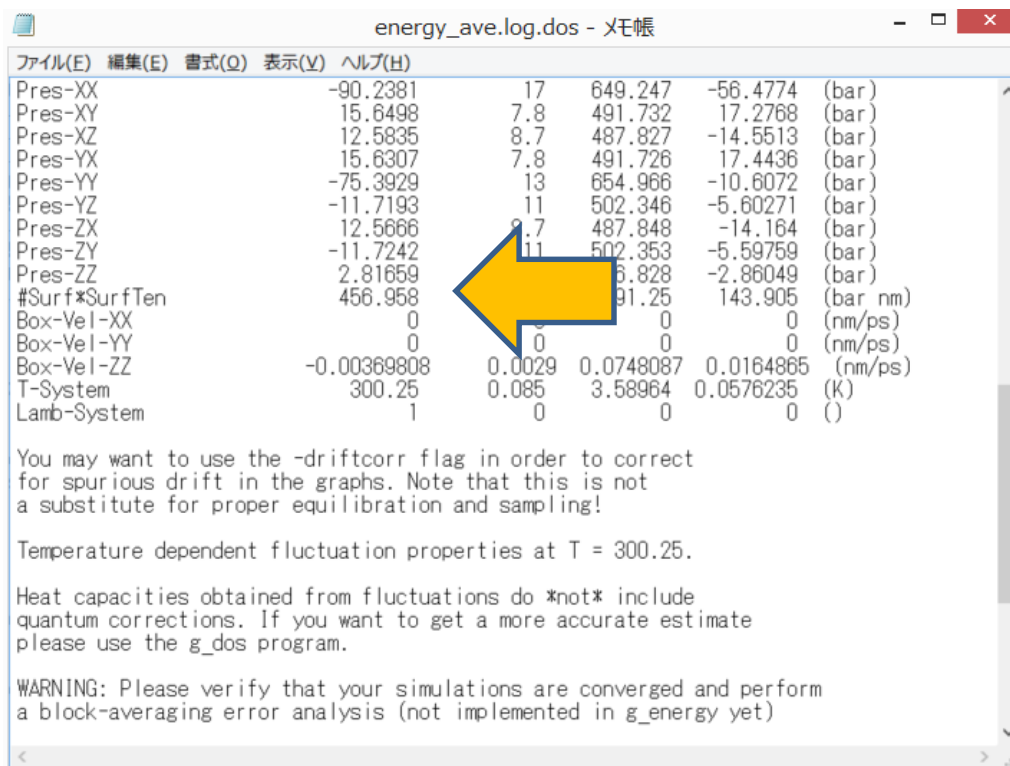
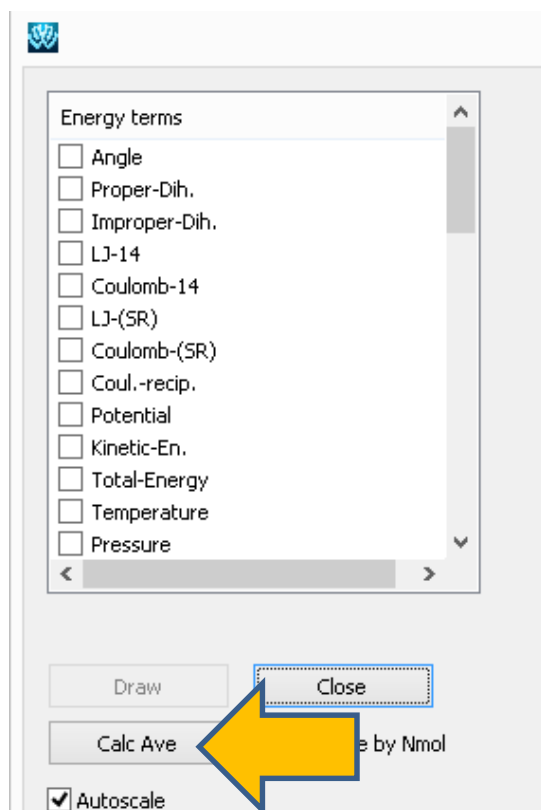
IV. 結果処理

「MD＞Gromacs＞エネルギー変化」を選択する。デフォルトで選択されるファイルを開く。



IV. 結果処理

「Calc Ave」ボタンを押し、デフォルトで選ばれる座標ファイルを開く。
表示されたテキストファイルの「」の欄に、界面張力と系内の界面数(ここでは2)
の積が表示される。単位は1 bar nm=0.1 mN/m



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

いいね！

いいね！ 38件

情報

http://x-ability.jp/

写真

デジタル投稿

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