

Winmostar チュートリアル シミュレーションセルの作成

V7.010

株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2017/02/03

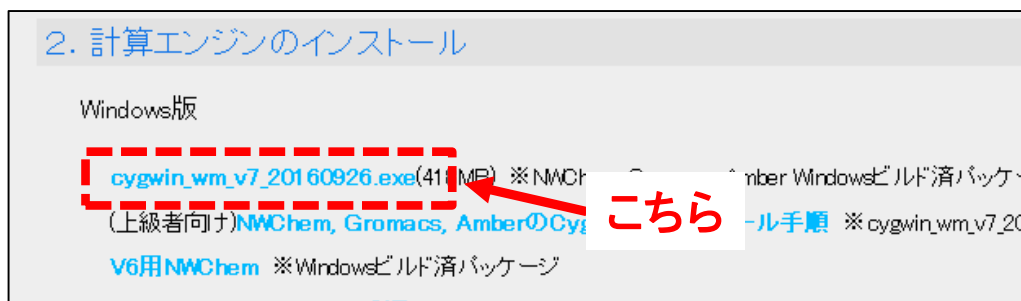
目次

- I. 孤立系(気相)
- II. 単成分液体
- III. 混合液体
 - ① 希薄水溶液
 - ② 任意の濃度の溶液
- IV. タンパク質
 - ① リガンドなし
 - ② リガンドあり
- V. ポリマー
- VI. 固液界面
- 補足 Acptypeによる電荷の割り当て
- 補足 RESP電荷の割り当て

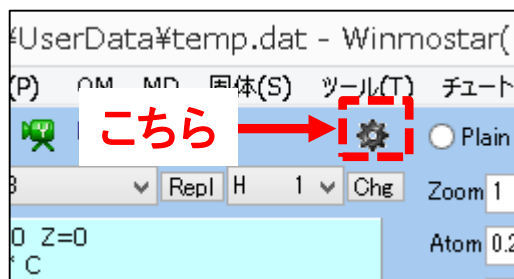
動作環境設定

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。



I. 孤立系(気相)

1. メイン画面で分子をモデリング
2. AM1-BCCまたはGasteiger電荷以外を使いたい場合、あるいは、イオンの場合は以下の手順で電荷を割り当て
 - I. AM1-BCC・Gasteiger電荷を取得
(「補足: Acypylによる電荷の割り当て」を参照)
 - II. RESP電荷を取得
(「補足: RESP電荷の割り当て」を参照)
 - III. その他、QM・バンド計算を実行して点電荷を取得
3. GromacsまたはLAMMPSキーワード設定の「Force Field」タブにて、「Generate Parameters」の「Force Field」の「(General)」にて使いたい力場を選ぶ。2.で電荷を割り当てた場合は、「Charge」の「Use User-defined Charge」を選択。そのほかは従来通り条件指定。
4. GromacsまたはLAMMPSを実行

II. 単成分液体

※ 電荷・力場の設定はP.4「I. 孤立系」を参照

1. メイン画面で分子をモデリングしmol2形式で名前を付けて保存(水の場合は省略)
2. 「MD>溶媒を配置/系を作成」にて「Put the molecule on main window as solute」のチェックを外し、「Add .mol2 File」で1.で保存したファイルを選択(水の場合は「Add Water」をクリック)、分子数を入力し、「Set Density」を適切に入力して「Build」
3. GromacsまたはLAMMPSキーワード設定
4. GromacsまたはLAMMPS実行

III. 混合液体 ①希薄水溶液

※ 電荷・力場の設定はP.4「I. 孤立系」を参照

1. メイン画面で溶質分子をモデリング
2. 「MD>溶媒を配置/系を作成」にて「Add Water」で、投入する水分子の数を
入力し、「Build」
3. GromacsまたはLAMMPSキーワード設定
4. GromacsまたはLAMMPS実行

III. 混合液体 ②任意の濃度の溶液

※ 電荷・力場の設定はP.4「I. 孤立系」を参照

1. 計算したいメイン画面で従来通りモデリングし、mol2形式で名前を付けて保存(水を除く、計算したいすべての分子種に対して実施)
2. 「MD>溶媒を配置/系を作成」にて「Put the molecule on main window as solute」のチェックを外し、「Add Water」または「Add .mol2 File」で1.で作成した分子を選択し、投入したい分子数を入力し、「Set Density」も適切に設定し「Build」
3. GromacsまたはLAMMPSキーワード設定
4. GromacsまたはLAMMPS実行

IV. タンパク質 ①リガンドなし

1. 計算したいタンパク質のpdbを読み込み
2. 「編集>分子種単位で選択」を選択し、タンパク以外を選択し、「編集>部分編集>部分削除」する
3. 「編集>水素付加>pdb2gmxを使用」を選択し「Execute」
4. 「MD>溶媒を配置/系を作成」にて「Add Water」で分子数を入力し、「Set Distance from solute」を選択し、その値を適切に設定し「Build」
5. 「MD>水をイオンに置換」にて、「Execute」
6. GromacsまたはLAMMPSキーワード設定
7. GromacsまたはLAMMPS実行

IV. タンパク質 ②リガンドあり

1. タンパク+リガンド複合体のpdbを読み込む
2. 「編集>分子種単位で選択」を選択し、リガンド以外を選択し、「編集>部分編集>部分削除」する
3. 「編集>水素付加>OpenBabelを使用」にて「Execute」
4. mol2形式で保存する
5. 再度複合体のpdbを読み込む
6. 「編集>分子種単位で選択」を選択し、タンパク以外を選択し、「編集>部分編集>部分削除」する
7. 「編集>水素付加>pdb2gmxを使用」にて「Execute」
8. 「MD>溶媒を配置/系を作成」にて、「Add .mol2 File」でリガンドのmol2ファイルを選択し、分子数に1を指定し、「Insert this molecule randomly?」の問いに「いいえ」とする。次に、「Add Water」で分子数を入力し、「Set Distance from solute」を選択し、その値を適切に設定し「Build」
9. 「MD>水をイオンに置換」にて、「Execute」
10. GromacsまたはLAMMPSキーワード設定
11. GromacsまたはLAMMPS実行

V. ポリマー

1. 「Winmostar LAMMPSチュートリアル ポリマーモデリング」を参考にポリマー系を作成
2. GromacsまたはLAMMPSキーワード設定の「Force Field」タブにおいて「Charge」に「Use User-defined Charge」を指定
3. GromacsまたはLAMMPS実行

VI. 固液界面(1/3)

1. 液体分子をモデリングし、点電荷を設定した上で、mol2形式で保存する(水の場合は不要)。
2. Winmostarの結晶ビルダの「表面切り出し」チュートリアルを参考に固体を作成する。結晶ビルダの[Edit]-[Repeat]を用いて、計算したいサイズのシステムを作成する。作成した固体はcif形式で保存する。
3. 結晶ビルダを終了し、Winmostarメイン画面にて1.で作成したcifファイルを開く。
4. [MD]-[溶媒を配置/セルを作成]を選択し、[Put the molecule on main window as solute]のチェックを外し、[Simulation Cell]タブの[Set Box Size]をチェックし、その右の[Import]ボタンを押す。次に、[Import]ボタンの左の界面垂直方向のシステムサイズを、想定している液相のサイズに設定する。
5. 想定している液相の組成に合うよう、[Add Water]または[Add .mol2 File]ボタンを押し分子を追加し[Build]ボタンを押す。

VI. 固液界面(2/3)

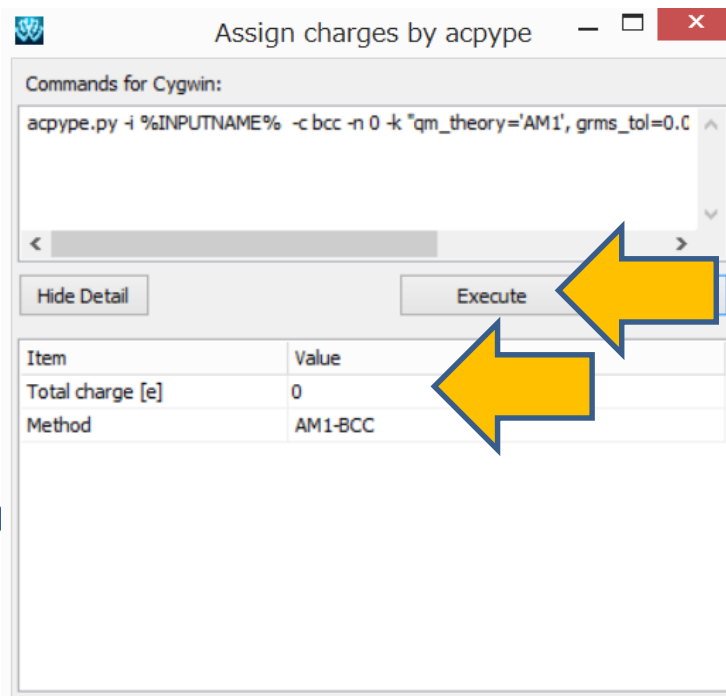
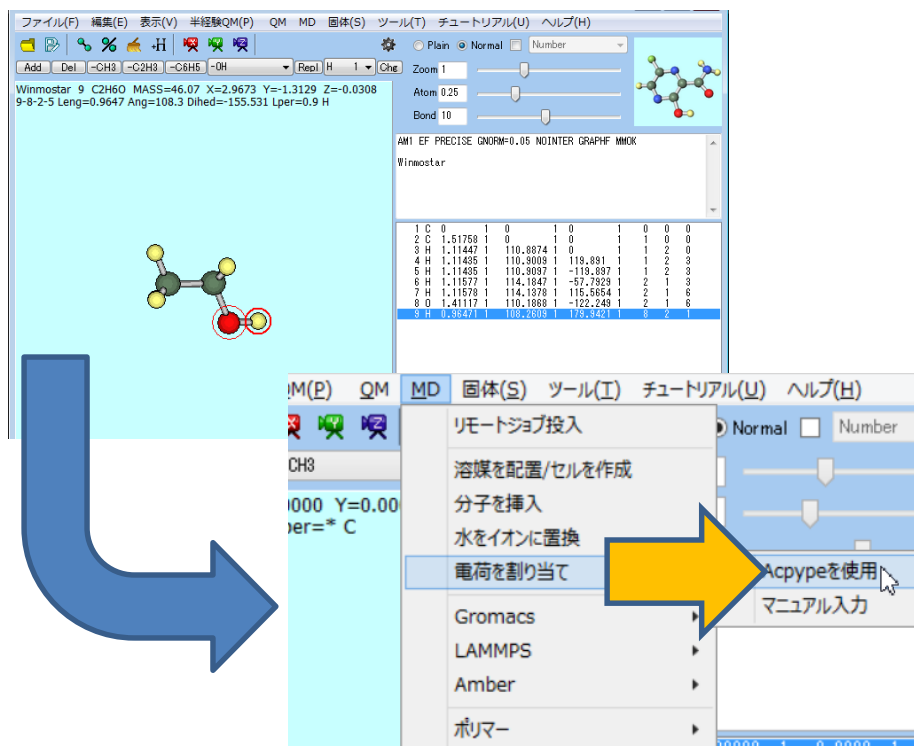
6. 必要に応じて、システムサイズが変化しないよう、GromacsまたはLAMMPSを用いて系を平衡化する。
7. 固体(固相)と貼り合わせたい液相の構造を、mol2形式で保存する。
8. [MD]-[界面ビルダ]の[Cell]タブにて、「Cell 1」および「Cell 2」にそれぞれ液相のmol2ファイルと固相のcifファイルを指定する。必要に応じて、[Direction]および[Repeat]タブで設定し、[Build]する。
 - ※ 固相に電荷を設定したい場合は、固相もmol2ファイルで準備し、そのmol2ファイルを指定する。電荷はQuantum ESPRESSO等で計算するか、文献値をmol2ファイルに与える。
9. GromacsまたはLAMMPSキーワード設定の[Force Field]タブにおいて、「Add [Position_restraints] section for selected atoms」をチェックする。開いた[Restraint]ウインドウにて、固相の項目にチェックを入れ[Set]する。
 - ※ 現状では、Gromacsの場合は原子がharmonicポテンシャルで拘束され、LAMMPSの場合は原子が完全に静止される形で拘束される。

VI. 固液界面(3/3)

10. [Force Field]-[General]の右の[Exception]ボタンをクリックする。次に、右のリスト内の固相の項目にチェックを入れ、その項目名をクリックし選択された状態にすると、左のリストに固相を構成する原子のLJパラメータのリストが表示される。そこでパラメータを入力し[Set]する。(デフォルト値は原子種に依らず一定値なので、そのまま使用しないこと)
11. [Force Field]-[Charge]-[Use user-defined charges]にチェックを入れる。
12. Gromacsの場合は続けて[Parameters (2)]タブの[Misc.]-[define]-[DPOSRES]にチェックを入れる。
13. その他の分子の力場の設定やシミュレーション条件を設定したらキーワード設定画面を閉じ、GromacsまたはLAMMPSを実行する。

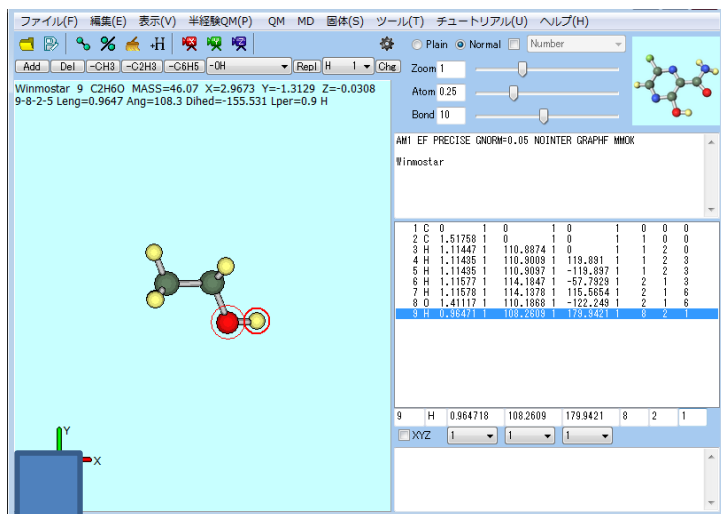
補足 Acptypeによる電荷の割り当て

ここでは、エタノール分子の電荷割り付けを例に操作方法を示す。
メイン画面でエタノールをモデリングし、「MD」>「電荷を割り当て」>「Acptypeを使用」画面を開く。イオンの場合は「Total charge」欄に電荷を入力する。その後、「Execute」をクリックする。



補足 RESP電荷の割り当て (1/4)

ここでは、エタノール分子のRESP電荷割り付けを例に操作方法を示す。
メイン画面でエタノールをモデリングし、「QM」>「GAMESS」>「GAMESSキーワード設定」画面を開き「EasySetup」を選択する。

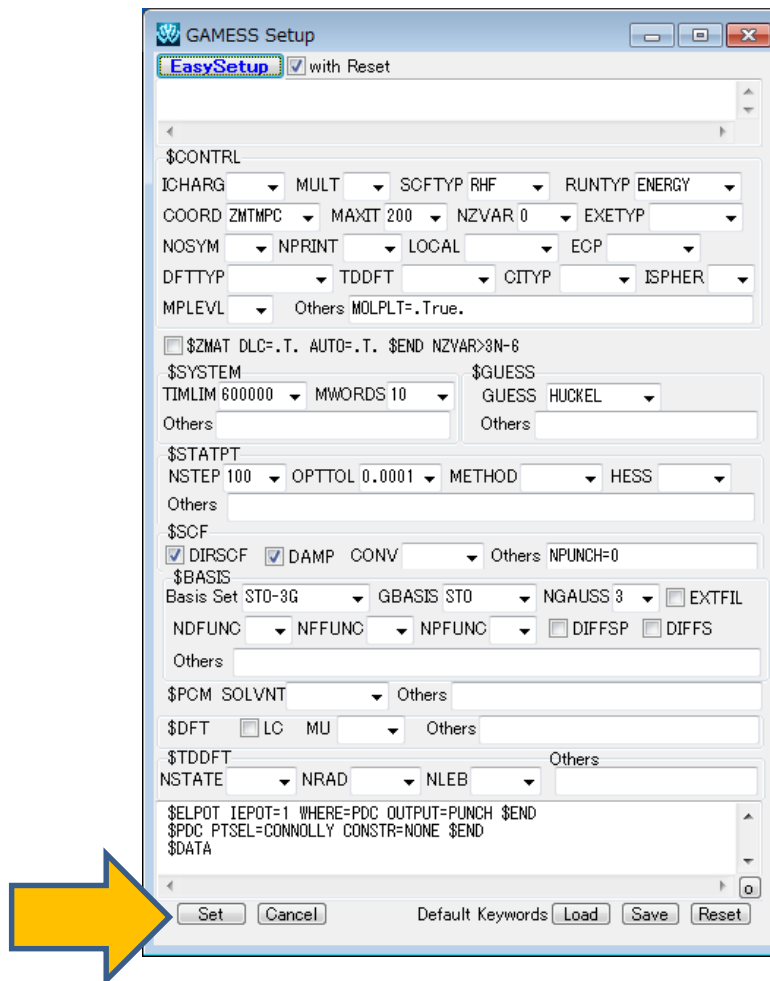
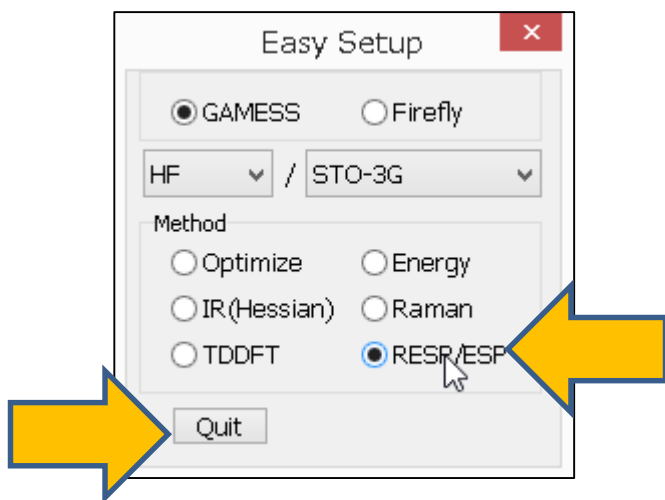


This screenshot shows the 'GAMESS Setup' dialog box. The 'EasySetup' tab is selected, as indicated by a yellow arrow. The dialog contains various configuration options for the GAMESS calculation, such as ICHARG, COORD, NOSYM, DFTTYP, and \$SYSTEM. A blue arrow points from the 'GAMESS' option in the previous screenshot to this dialog box.

This is a detailed view of the 'GAMESS Setup' dialog box. The 'EasySetup' tab is highlighted with a yellow arrow. The dialog is filled with various configuration options for the GAMESS calculation, including ICHARG, COORD, NOSYM, DFTTYP, and \$SYSTEM. A blue arrow points from the 'GAMESS' option in the previous screenshot to this dialog box.

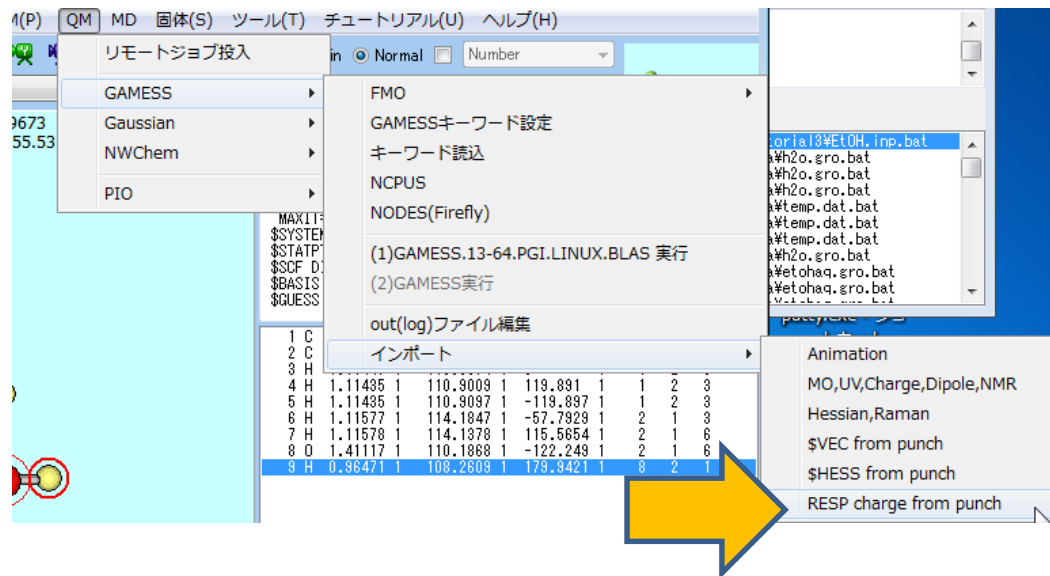
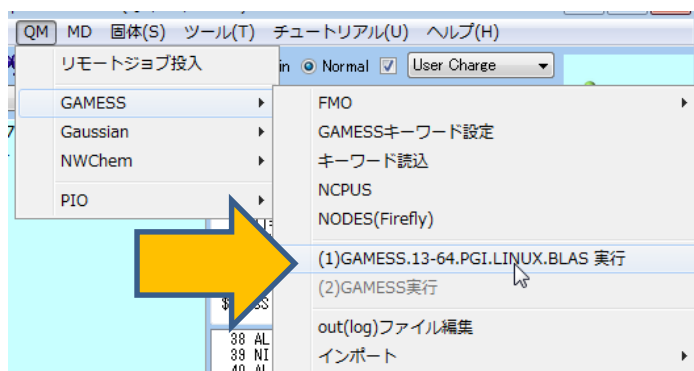
補足 RESP電荷の割り当て(2/4)

「Easy Setup」において「RESP/ESP」にチェックを入れ「Quit」し、「GAMESS Setup」において「Set」する。



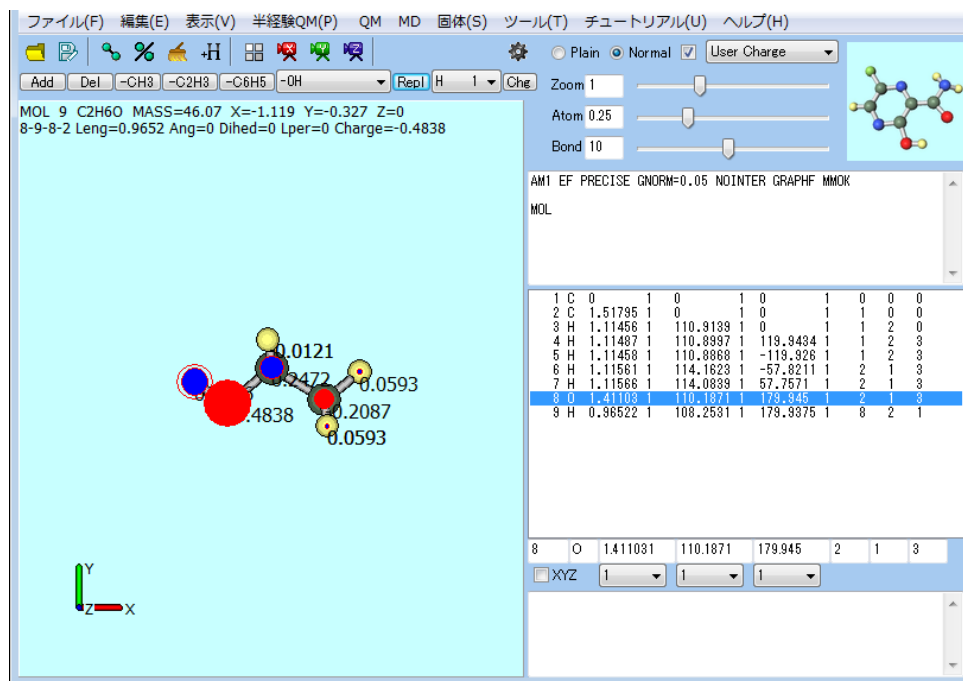
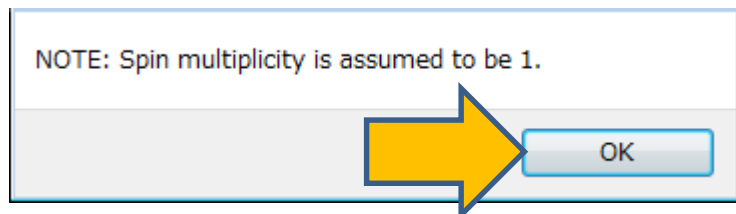
補足 RESP電荷の割り当て(3/4)

「QM1」>「GAMESS実行」を選択し、ジョブ終了後、「QM」>「GAMESS」>「インポート」>「RESP Charge from punch」を選択する。デフォルトで直前に得られたpunchファイルが選択されるため、そのまま開く。



補足 RESP電荷の割り当て(4/4)

左図のようにスピン多重度を1としてRESP電荷が計算されることが確認される。「OK」として処理を進めると、メイン画面上にRESP電荷が表示される。この状態で、「ファイル>名前を付けて保存」から、mol2形式で保存する。保存したmol2ファイルを、「MD>溶媒を追加/セルを作成」の「Add .mol2 File」ボタンで追加することでRESP電荷を保持したままセルを作成できる。



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!