

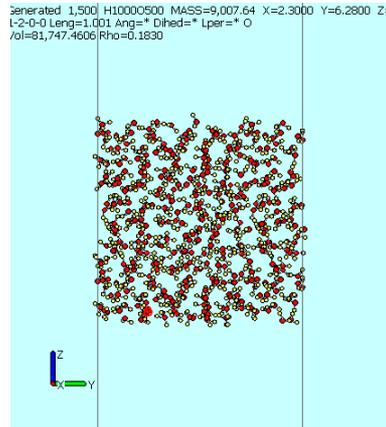
Winmostar チュートリアル
Gromacs
蒸気圧・表面張力
V8.000

株式会社クロスアビリティ
question@winmostar.com

2017/10/01

概要

- 水気液平衡系を計算し、蒸気圧と表面張力を算出します。



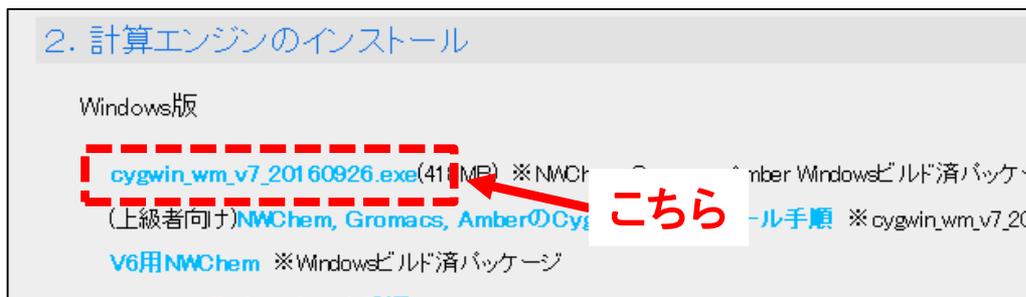
注意点:

- 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本例と異なる場合があります。
- “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。特に界面張力の算出値の収束は遅いです。
- 相互作用計算方法や力場も計算結果に大きく影響します。
- 必要に応じて真空層挿入前の液相の状態での平衡化計算を実施する。

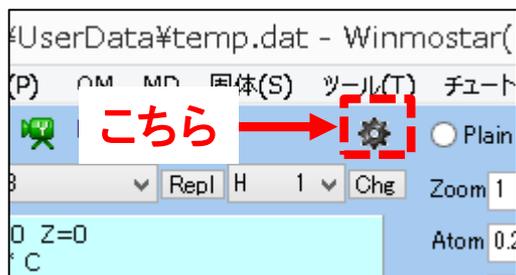
動作環境設定

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。



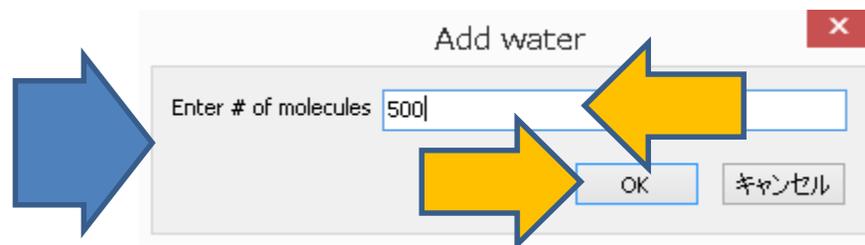
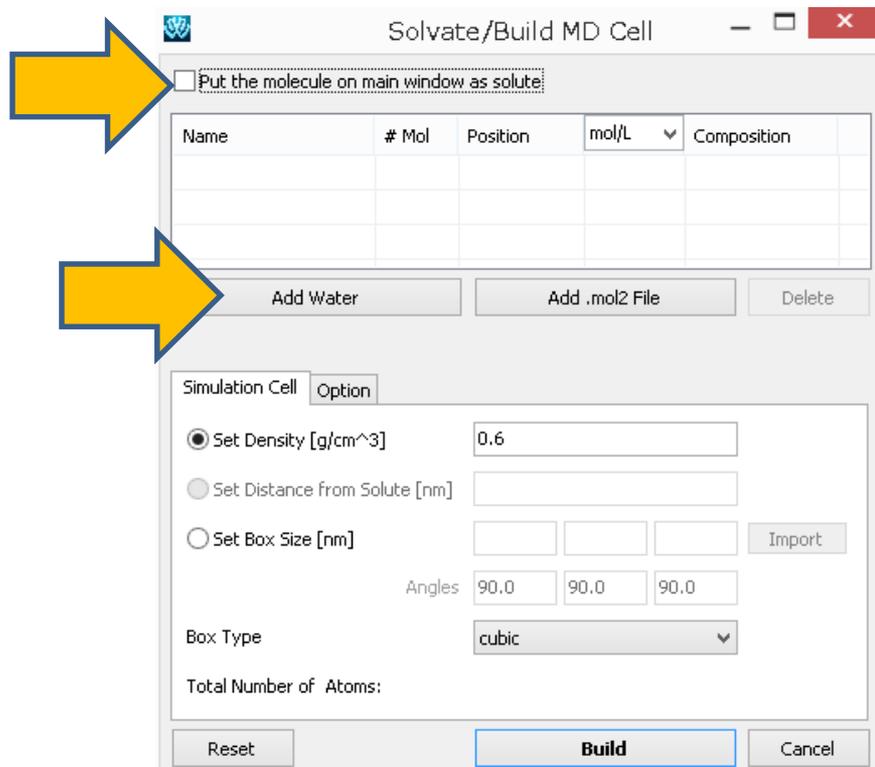
- デフォルトではC:¥直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」>「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



I. 系の作成

本チュートリアルでは水の気液平衡系の計算から蒸気圧と表面張力を計算する。
まず[MD]>[溶媒を配置/セルを作成]をクリックする。

[Put the molecule on main window as solute]のチェックを外し、[Add water]ボタンをクリックする。
[Enter # of molecules]に「500」と入力し[OK]をクリックする。



I. 系の作成

「Set Density」に「0.9」と入力し、「Build」をクリックすると左図のような系が作成される。

The image shows the 'Solvate/Build MD Cell' dialog box on the left and the resulting molecular simulation cell on the right. A blue arrow points from the dialog box to the simulation cell, and yellow arrows point to the 'Set Density' input field and the 'Build' button in the dialog box.

Solvate/Build MD Cell Dialog Box:

Name	# Mol	Position	mol/L	Composition
WATER	500	Random	49.955	H2O

Simulation Cell Option:

- Set Density [g/cm³]: 0.9
- Set Distance from Solute [nm]:
- Set Box Size [nm]: 2.552, 2.552, 2.552
- Angles: 90.0, 90.0, 90.0
- Box Type: cubic
- Total Number of Atoms: 1500

Simulation Cell:

Generated 1-2-0-0 Length=1000 Ang=* Dihed=* Lp=* O
Vol=16.620,4206 Rho=0.9999

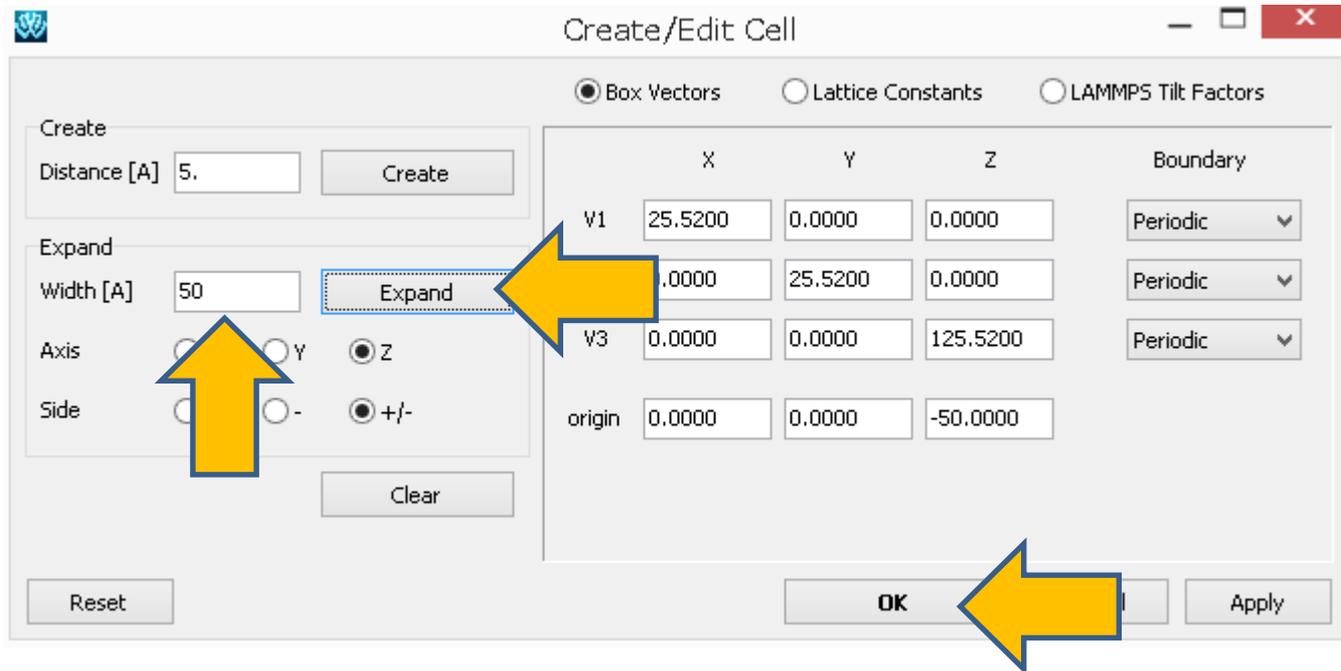
Mass=9.007,64 X=2.800 Y=2.800 Z=2.800

Atom list (partial):

1	C
2	F
3	F
4	C
5	F
6	F
7	C
8	F
9	F
10	C
11	F
12	F
13	C
14	F
15	F
16	C
17	F

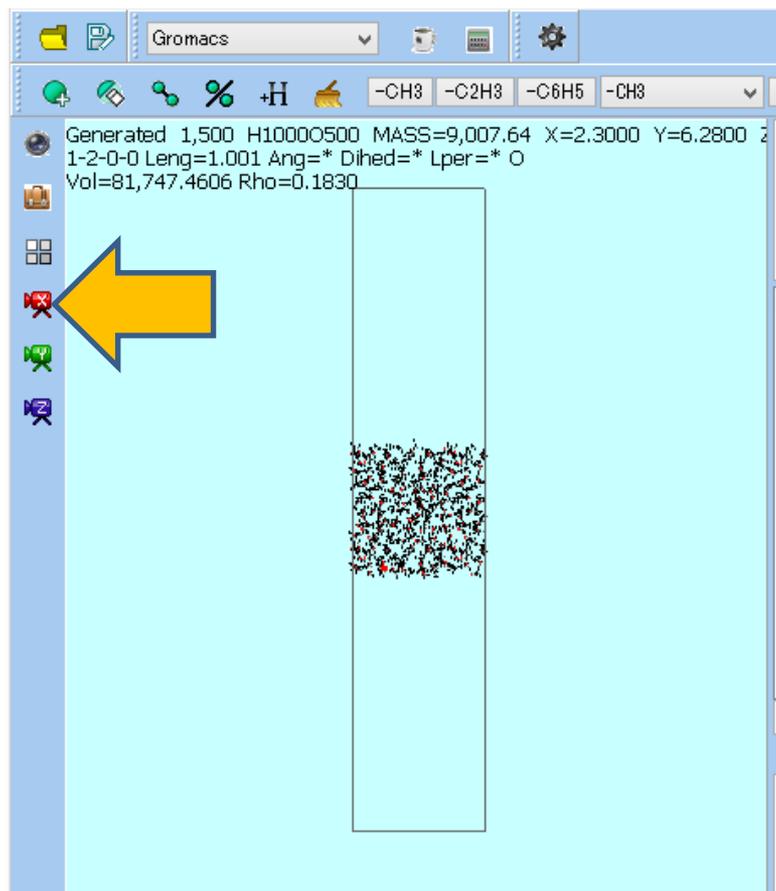
I. 系の作成

[編集]>[セルを作成/編集]をクリックし、[Expand]の[Width]に「50」と入力し、[Expand]ボタンをクリックし、[OK]をクリックする。



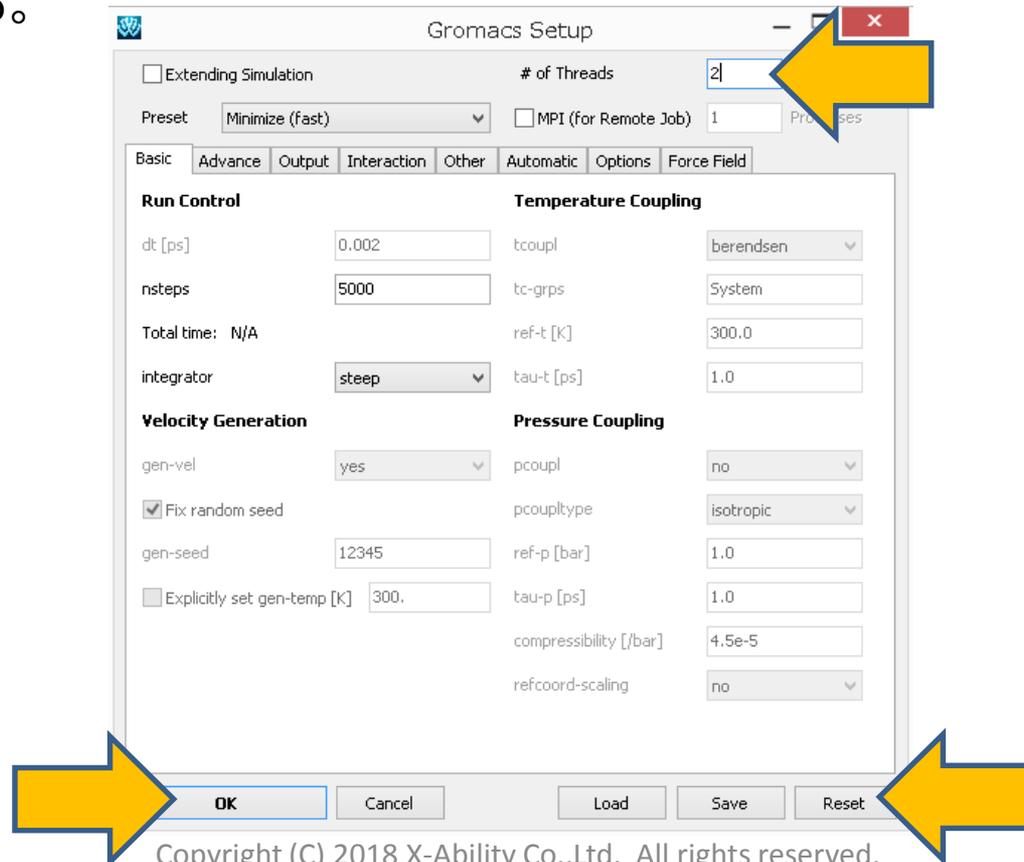
I. 系の作成

赤いXのカメラのボタンを押し、カメラを遠ざけると、気液平衡系が作成された様子分かる。



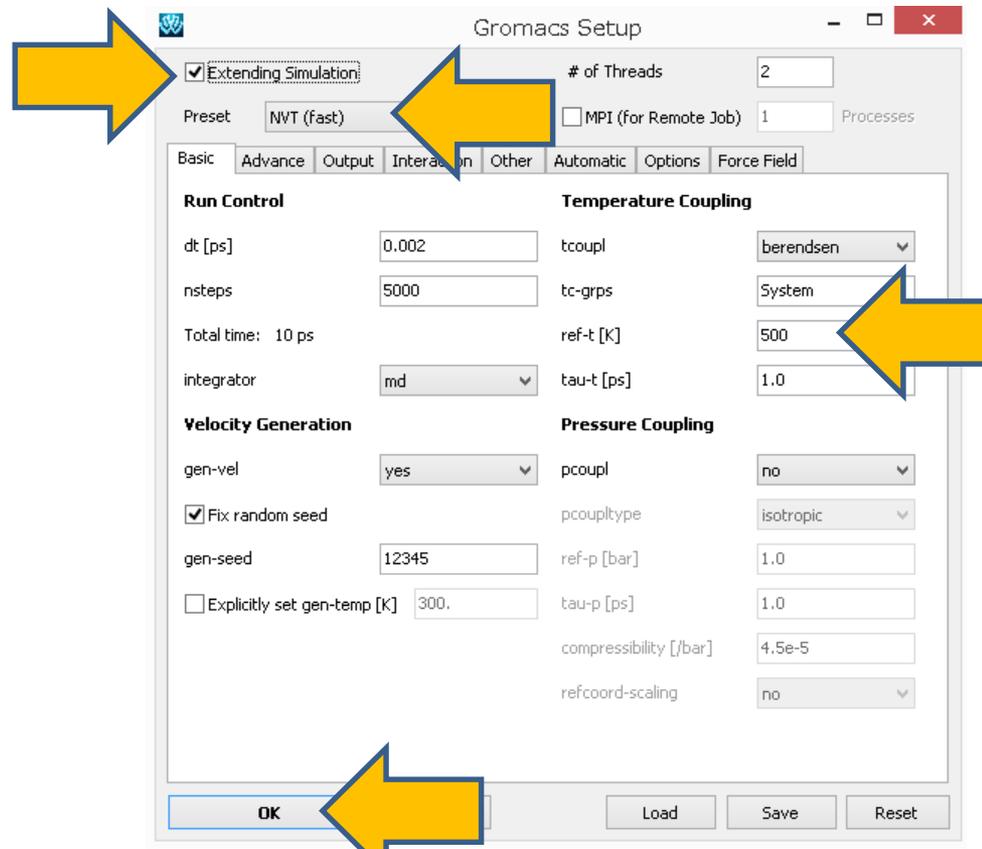
II. 平衡化計算

[MD]>[Gromacs]>[キーワード設定]をクリックし、[Reset]ボタンを押し、[# of Threads]に並列数を入力し[OK]する。[MD]>[Gromacs]>[Gromacs実行]をクリックし、座標・トポロジファイルをそれぞれ「spce500k.gro」、「spce500k.top」として保存する。



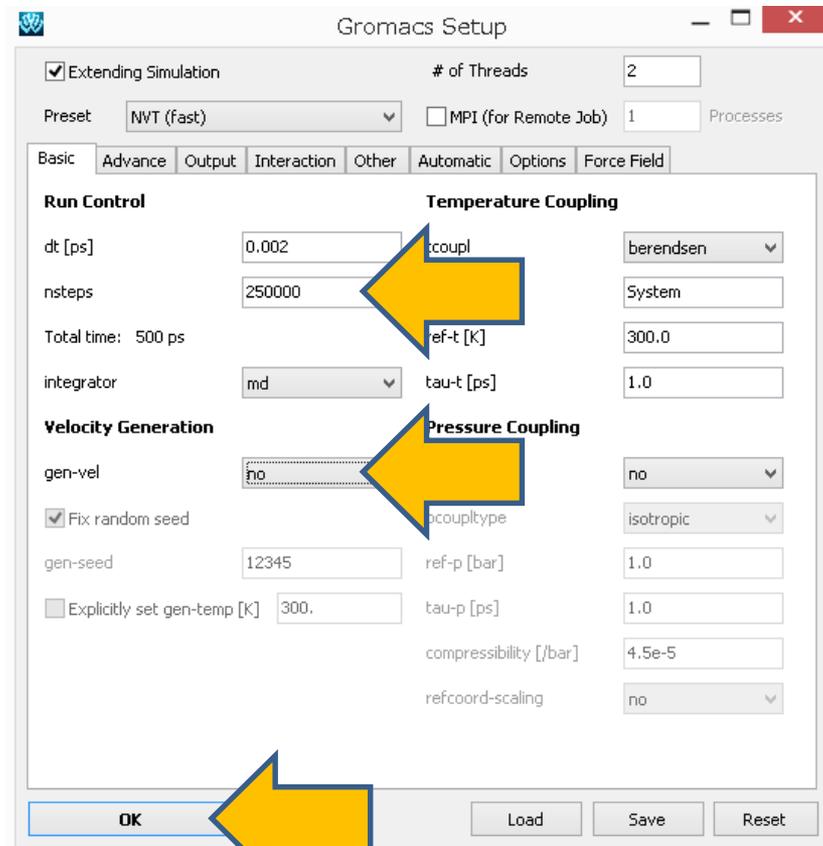
II. 平衡化計算

計算終了後、再び[キーワード設定]をクリックし、[Extending Simulation]にチェックを入れ[Preset]に[NVT (fast)]を選択し、[ref-t [K]]に「500」を入力し[OK]をクリックする。そして再度[Gromacs実行]をクリックする。



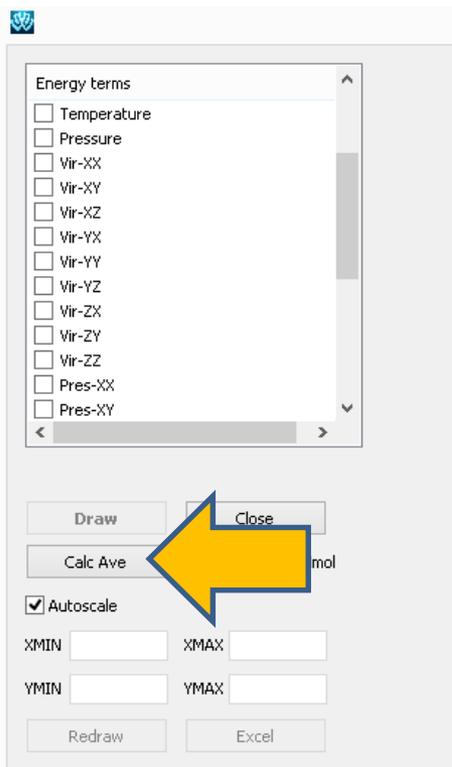
III. 本計算

計算終了後、再び[キーワード設定]をクリックし、[nsteps]に「250000」と入力し [gen-vel]に[no]を選択し、[OK]をクリックする。そして再度[Gromacs実行]をクリックする。



IV. 物性算出

[MD]>[Gromacs]>[エネルギー変化]を選択し、デフォルトで選ばれるedrファイルを開く。[Calc Ave]ボタンをクリックし、デフォルトで選ばれるgroファイルを開く。[Pres-ZZ]に蒸気圧(気液平衡圧力、単位はbar)、[#Surf*SurfTen]に界面数(2)と表面張力の積(単位はbar*nm)が書かれる。



energy_ave.log.dos - メモ帳

ファイル(F) 編集(E) 書式(O) 表示(V) ヘルプ(H)

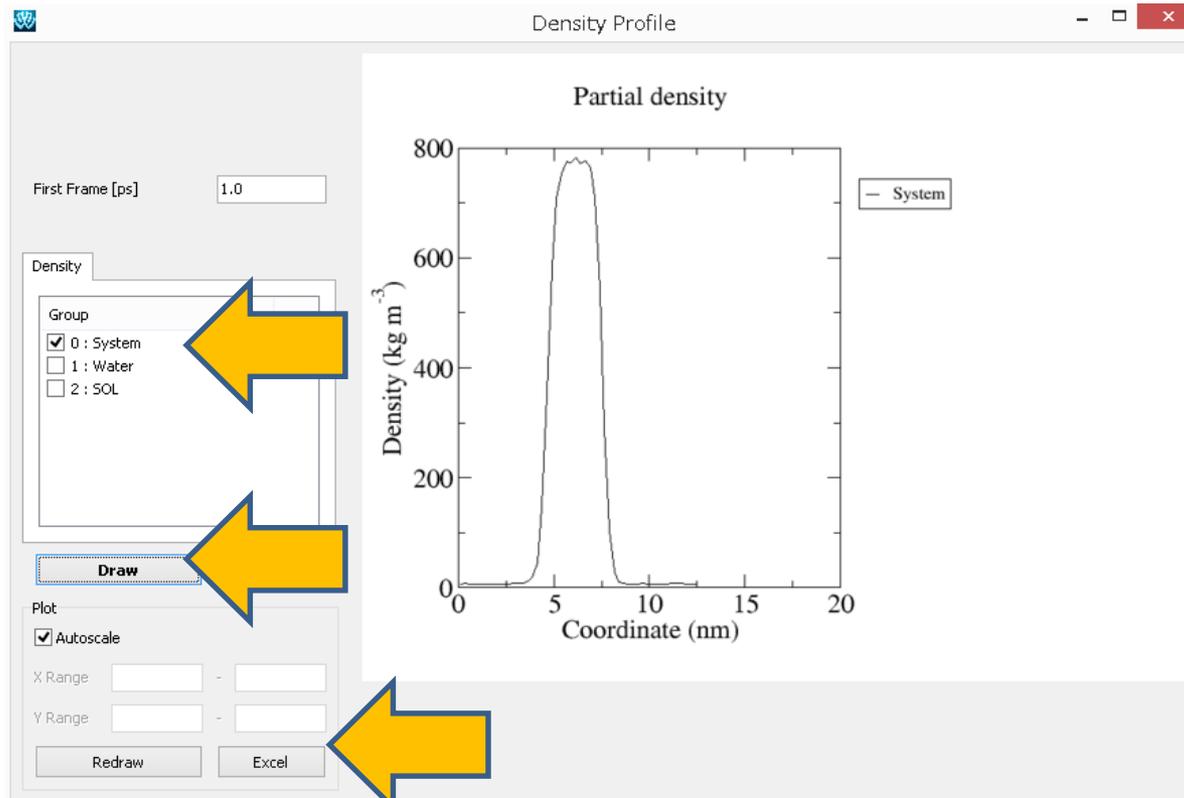
Statistics over 250001 steps [10.0000 through 510.0000 ps], 29 data sets
All statistics are over 25001 points

Energy	Average	Err.Est.	RMSD	Tot-Drift	
LJ (SR)	5.00378	0.019	0.329461	-0.0674196	(kJ/mol)
Coulomb (SR)	-37.0888	0.12	0.686914	0.436155	(kJ/mol)
Coul. recip.	0.860051	0.0097	0.0611801	0.0346324	(kJ/mol)
Potential	-31.225	0.11	0.542095	0.403368	(kJ/mol)
Kinetic En.	12.4552	0.0047	0.264021	0.0233712	(kJ/mol)
Total Energy	-18.7698	0.12	0.485174	0.426739	(kJ/mol)
Temperature	499.834	0.19	10.5954	0.937904	(K)
Pressure	-7.26674	1.1	111.463	1.4721	(bar)
Vir-XX	2119.8	5	391.806	2.08302	(kJ/mol)
Vir-XY	-1.1742	1.5	239.042	-0.371305	(kJ/mol)
Vir-XZ	-0.0899893	1.4	238.313	-3.9262	(kJ/mol)
Vir-YX	-1.17412	1.5	239.044	-0.344622	(kJ/mol)
Vir-YY	2116.89	1.8	392.389	4.88406	(kJ/mol)
Vir-YZ	0.417414	0.98	237.707	0.442537	(kJ/mol)
Vir-ZX	-0.0957495	1.4	238.309	-3.83956	(kJ/mol)
Vir-ZY	0.408187	0.98	237.719	0.406208	(kJ/mol)
Vir-ZZ	2044.55	1.4	383.712	-6.15202	(kJ/mol)
Pres-XX	-19.4762	2.4	162.568	-1.54788	(bar)
Pres-XY	-0.00619535	0.42	100.88	1.14384	(bar)
Pres-XZ	-0.512764	0.44	100.693	1.70305	(bar)
Pres-YX	-0.00622886	0.42	100.88	1.133	(bar)
Pres-YY	-18.6126	0.95	162.054	2.12677	(bar)
Pres-YZ	0.0266161	0.66	100.604	-3.91869	(bar)
Pres-ZX	-0.510424	0.44	100.692	1.66785	(bar)
Pres-ZY	0.0303644	0.65	100.609	-3.90393	(bar)
Pres-ZZ	16.2886	0.71	159.4	3.8374	(bar)
#Surf*SurfTen	443.5	16	2173.7	44.534	(bar nm)
T-System	499.834	0.19	10.5954	0.937904	(K)
Lamb-System	1	0	0	0	()

参考文献: R. Sakamaki *et al.*, J. Chem. Phys., 134, 124708 (2011).

IV. 物性算出

[MD]>[Gromacs]>[密度分布]を選択し、デフォルトで選ばれる3つのファイルを開く。[Group]で[0: System]にチェックを入れ[Draw]ボタンをクリックすると、z軸方向の密度分布が表示される。液相、気相それぞれの密度を取得する際は、[Excel]ボタンを押しcsvファイルを生成し、各種のグラフソフトでフィッティングを行う。



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!