

Winmostar チュートリアル

Gromacs

溶解度/ χ /DPDパラメータの算出

V7.016

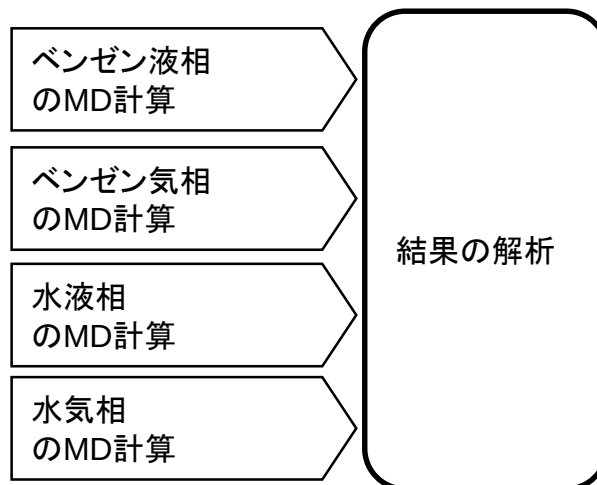
株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2017/03/30

概要

- 本チュートリアルでは、水・ベンゼンそれぞれのHildebrand溶解度パラメータおよび、水・ベンゼン間の χ パラメータ、DPDの a_{ij} パラメータを算出します。



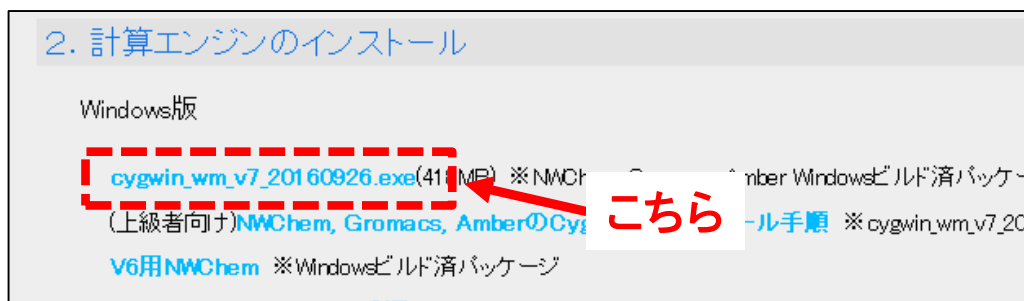
注意点:

- 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。
- 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。
- 剛体モデルの水を用いるため本来なら水の気相の計算は不要だが、現在のWinmostar™の仕様上エネルギーファイルが必要なため計算を実施する。

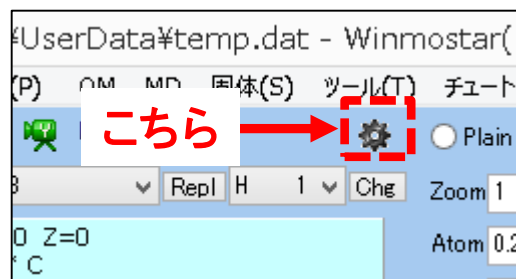
動作環境設定

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。



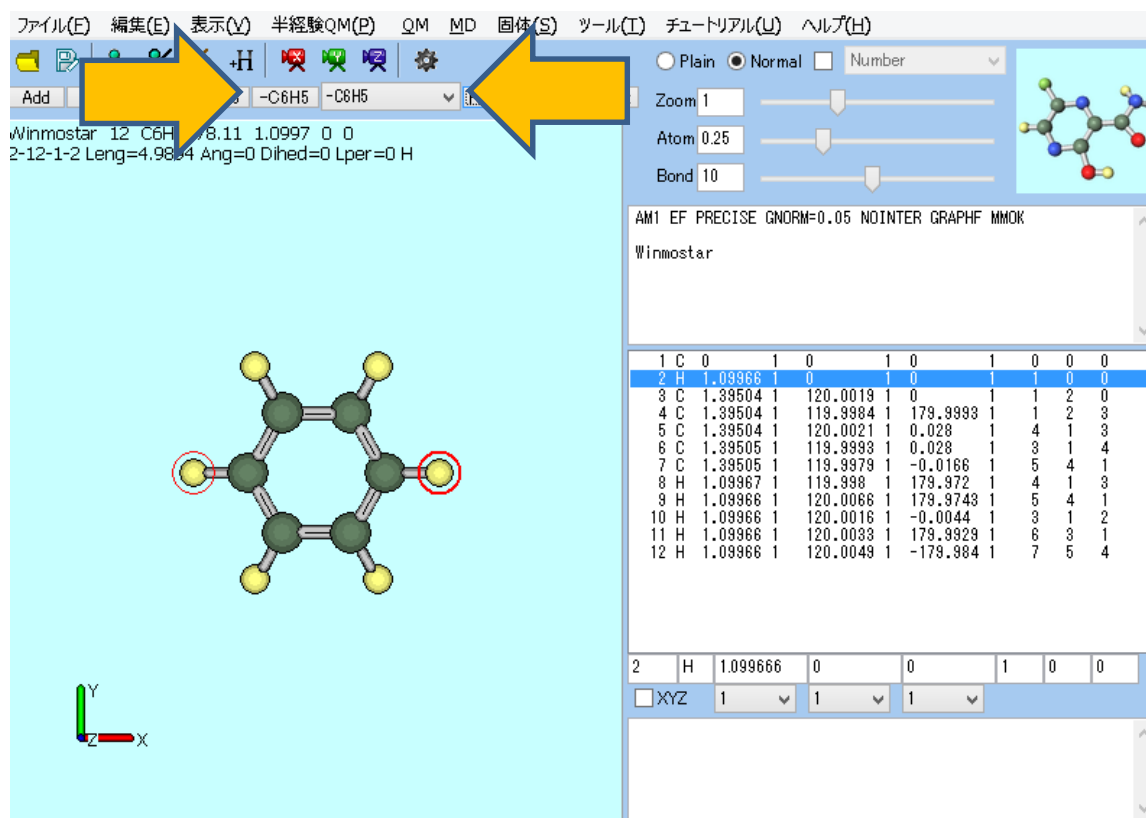
- デフォルトではC:¥直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」>「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



I. 成分1の液相のMD計算(モデリング)

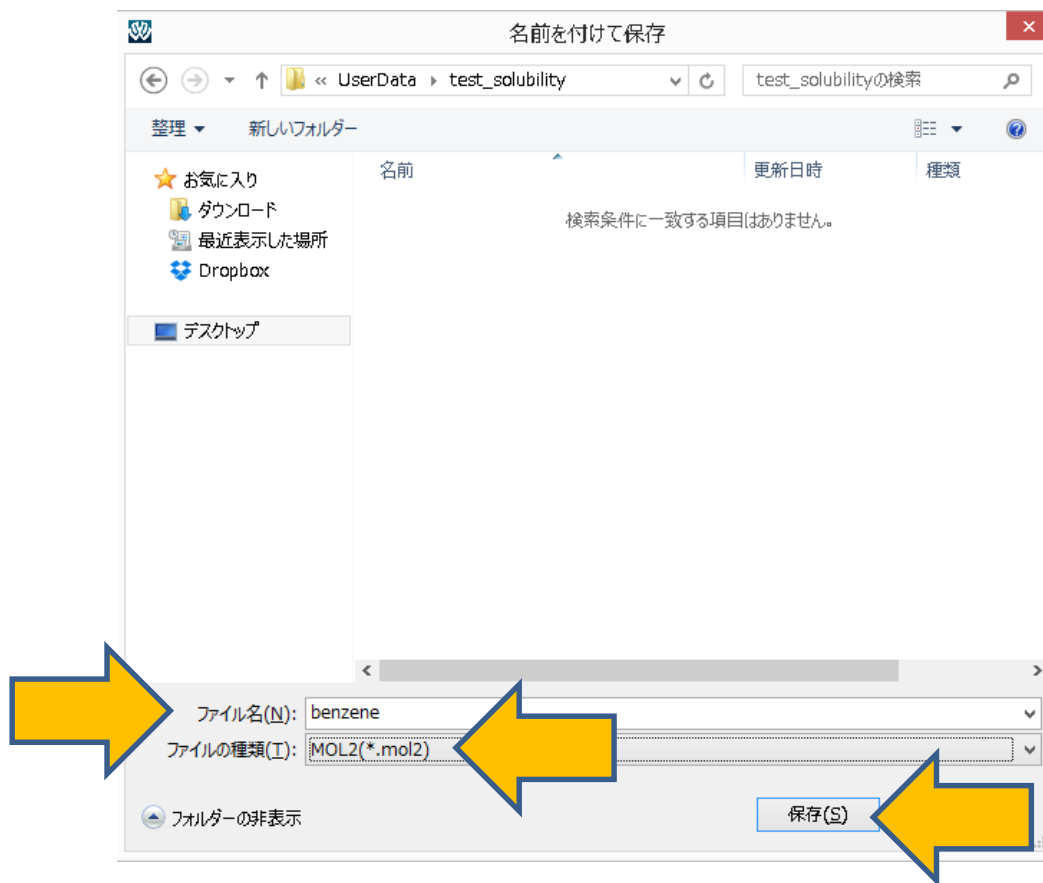
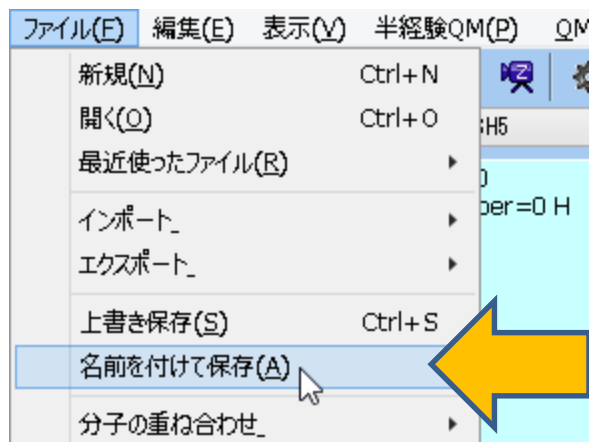
ここでは成分1をベンゼンとする。

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。



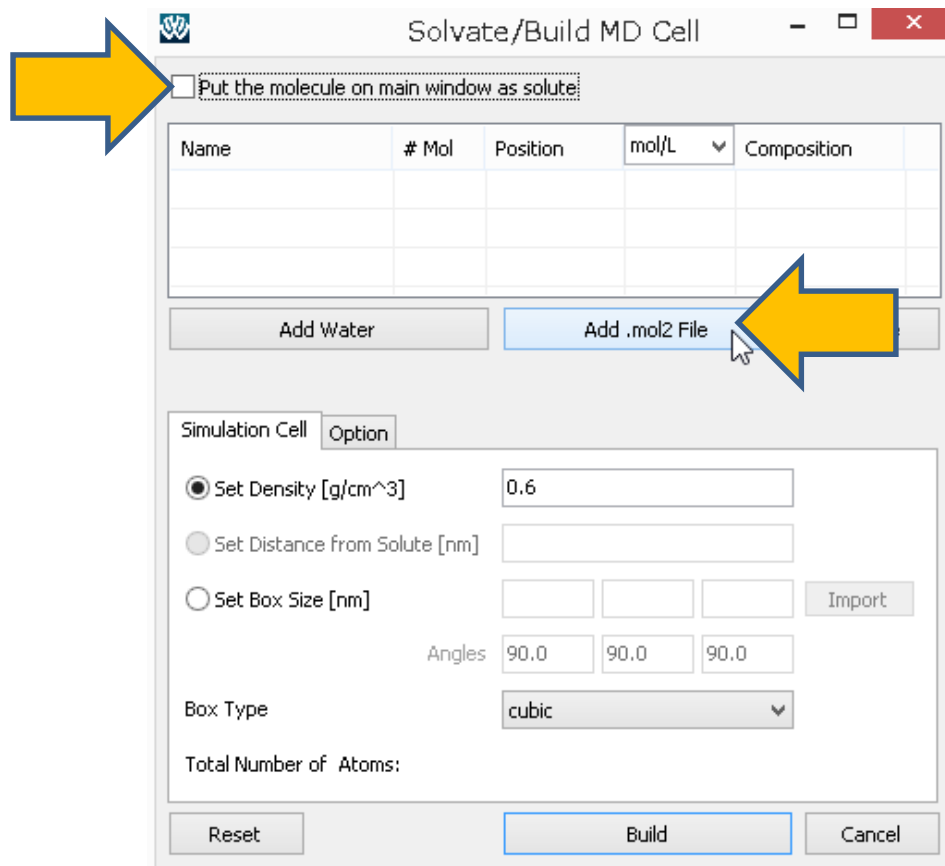
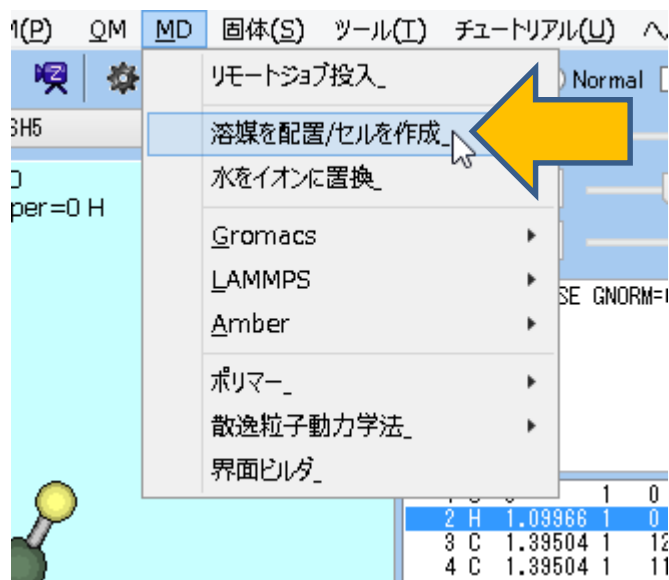
I. 成分1の液相のMD計算(モデリング)

「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。



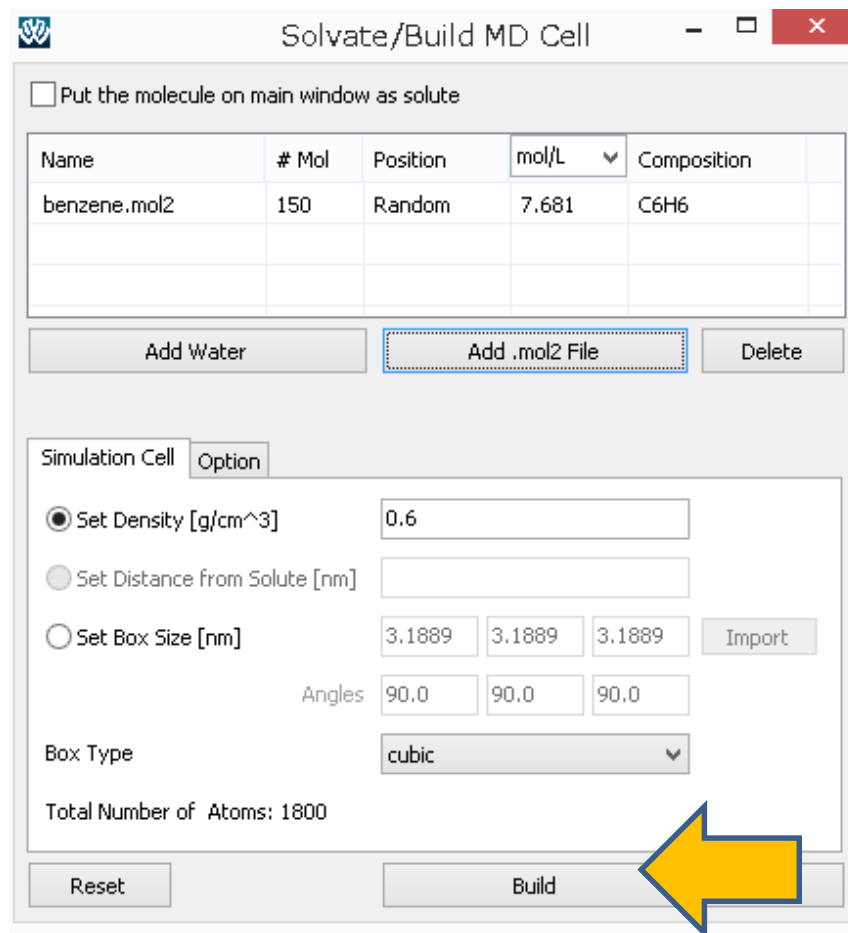
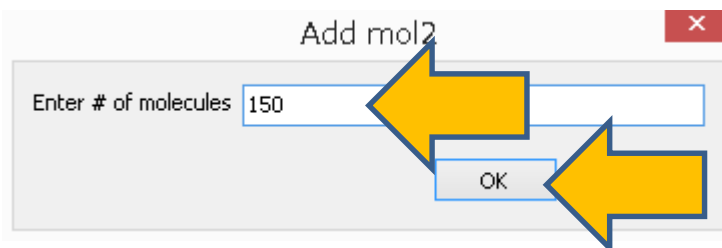
I. 成分1の液相のMD計算(系の作成)

「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。



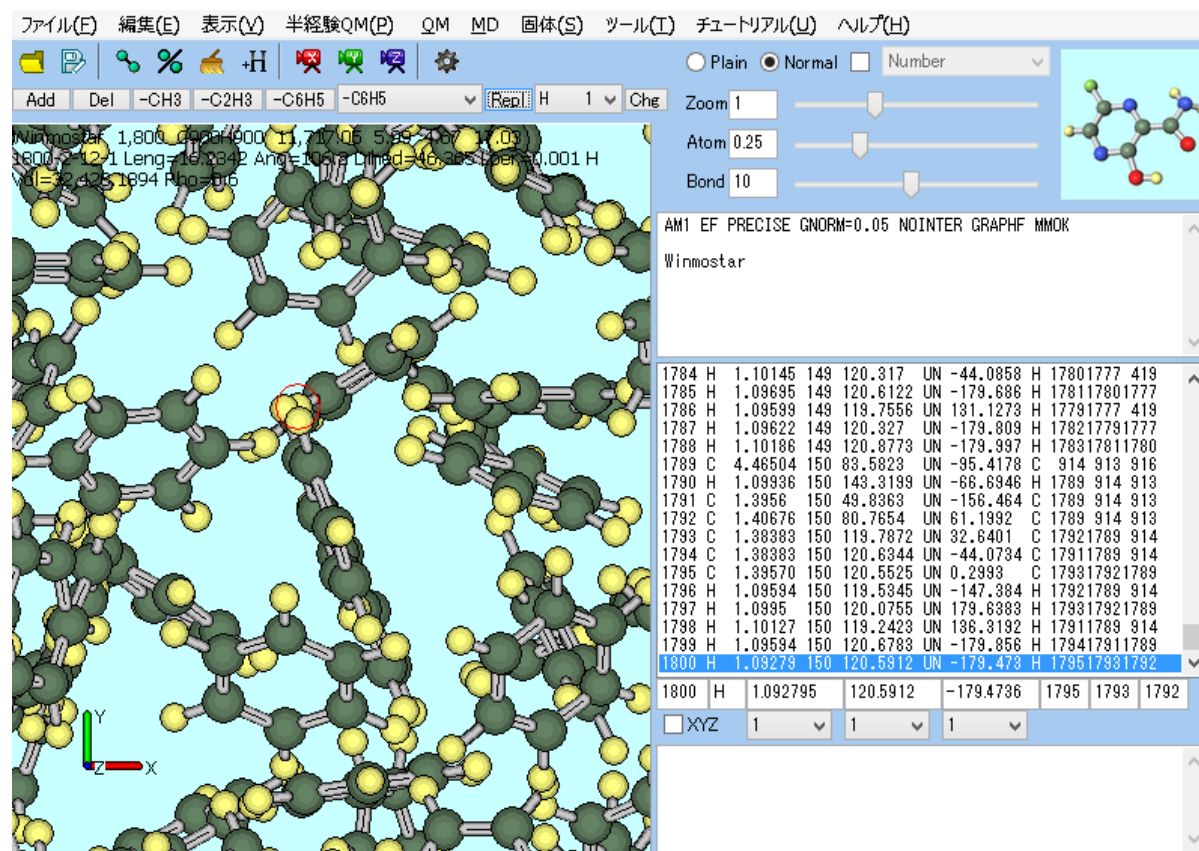
I. 成分1の液相のMD計算(系の作成)

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。



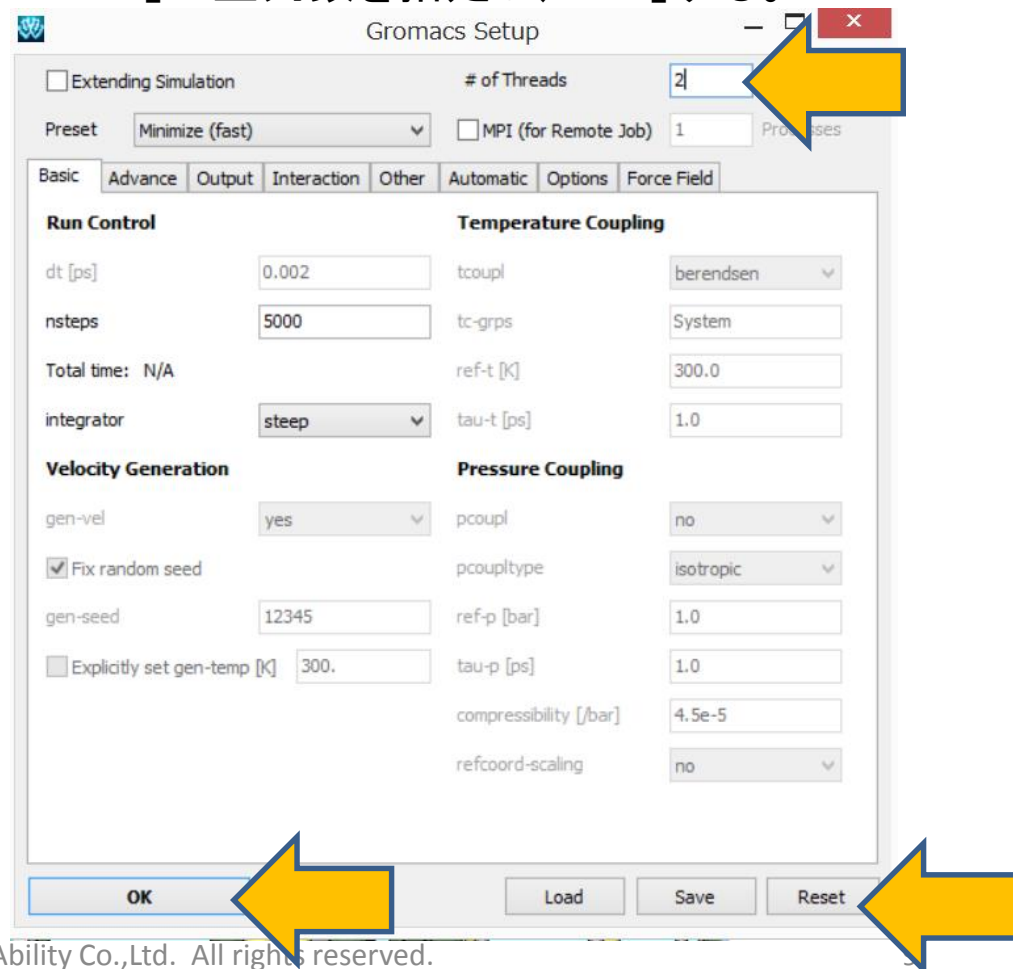
I. 成分1の液相のMD計算(系の作成)

以下のように、メイン画面に作成された系が表示される。



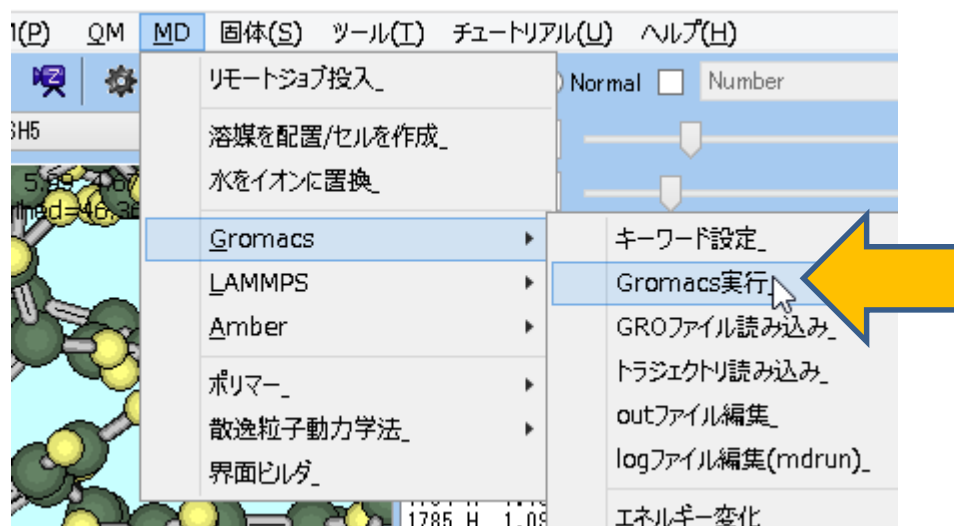
I. 成分1の液相のMD計算(平衡化1)

「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。



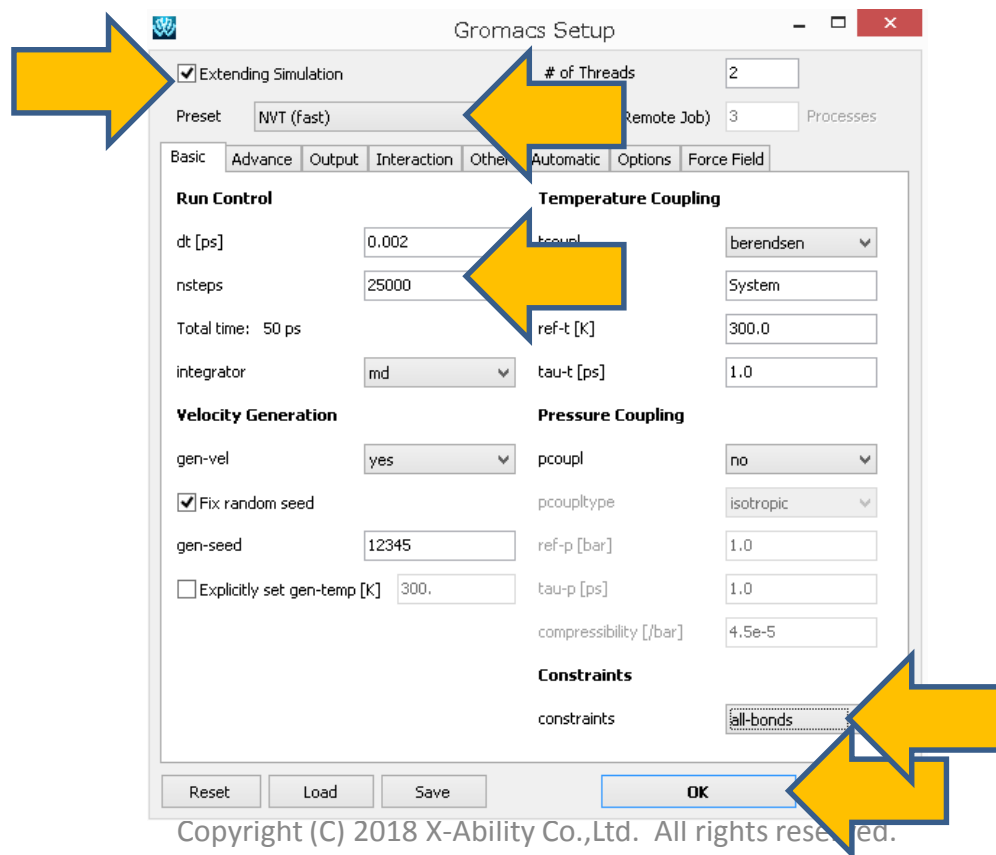
I. 成分1の液相のMD計算(平衡化1)

「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「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。



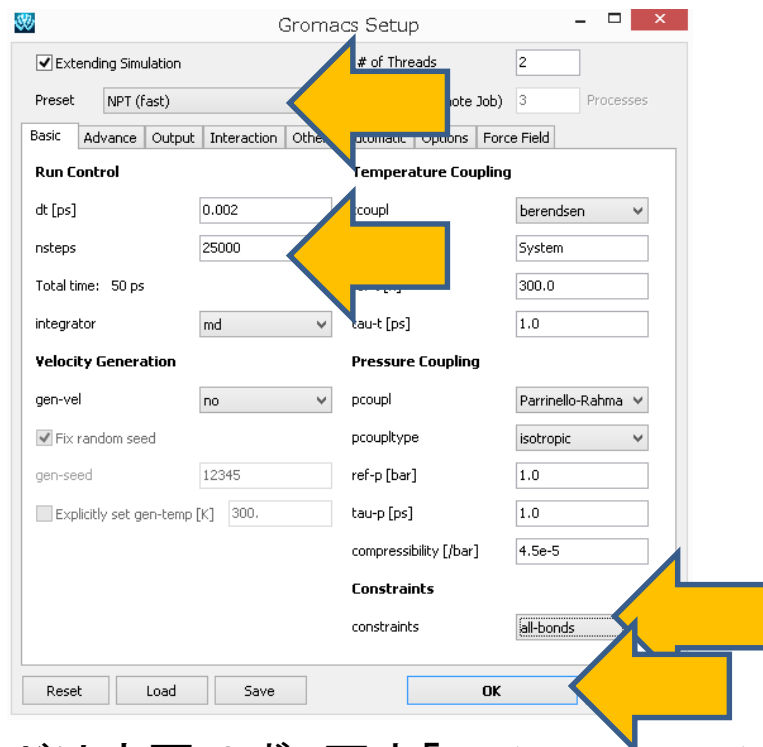
I. 成分1の液相のMD計算(平衡化2)

計算終了後、「MD>Gromacs>キーワード設定」にて、「Extending Simulation」にチェックを入れ、「Preset」に「NVT (fast)」を指定する。次に、「nsteps」に「25000」、「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)

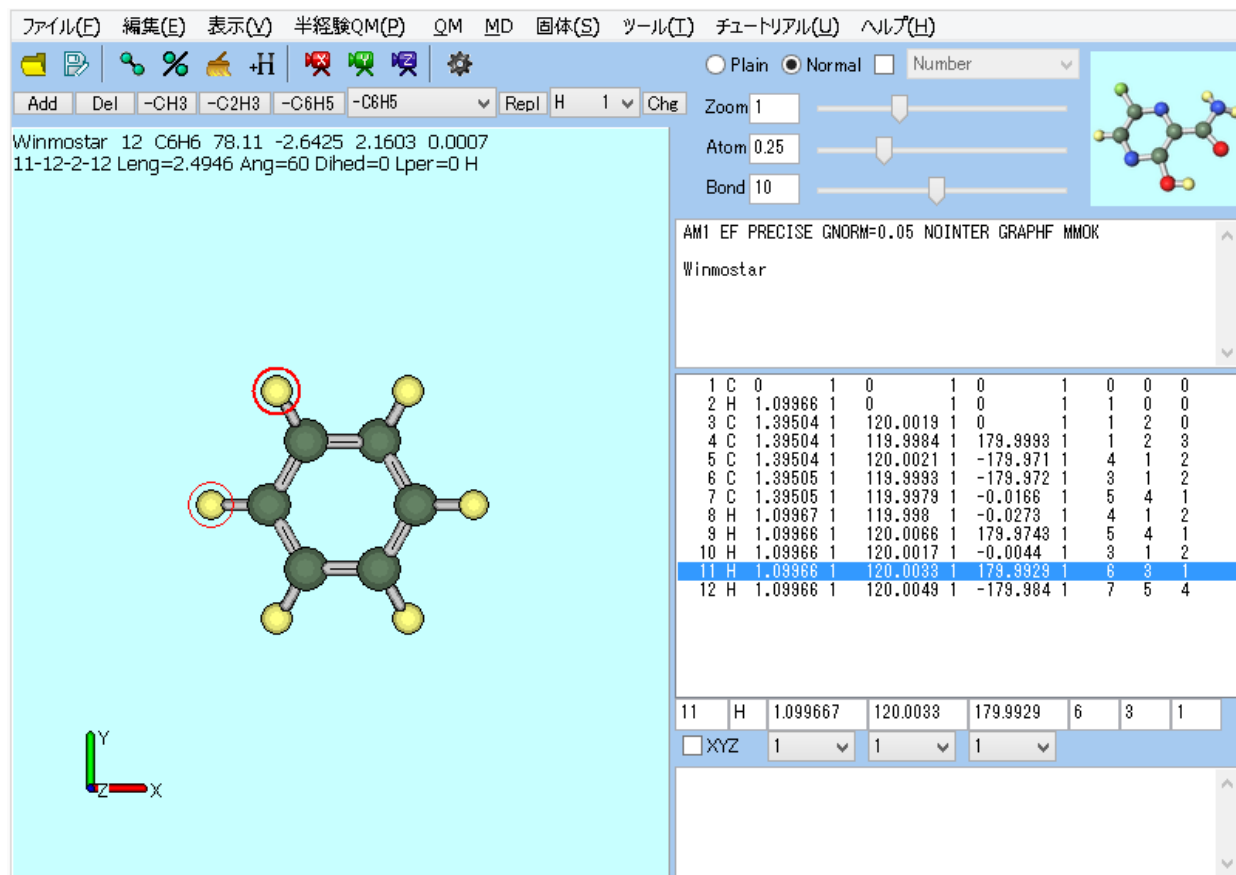
計算終了後、「MD>Gromacs>キーワード設定」にて、「Preset」に「NPT (fast)」を指定する。次に、「nsteps」に「25000」、「constraints」に「all-bonds」を指定し「OK」する。そして「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。



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。

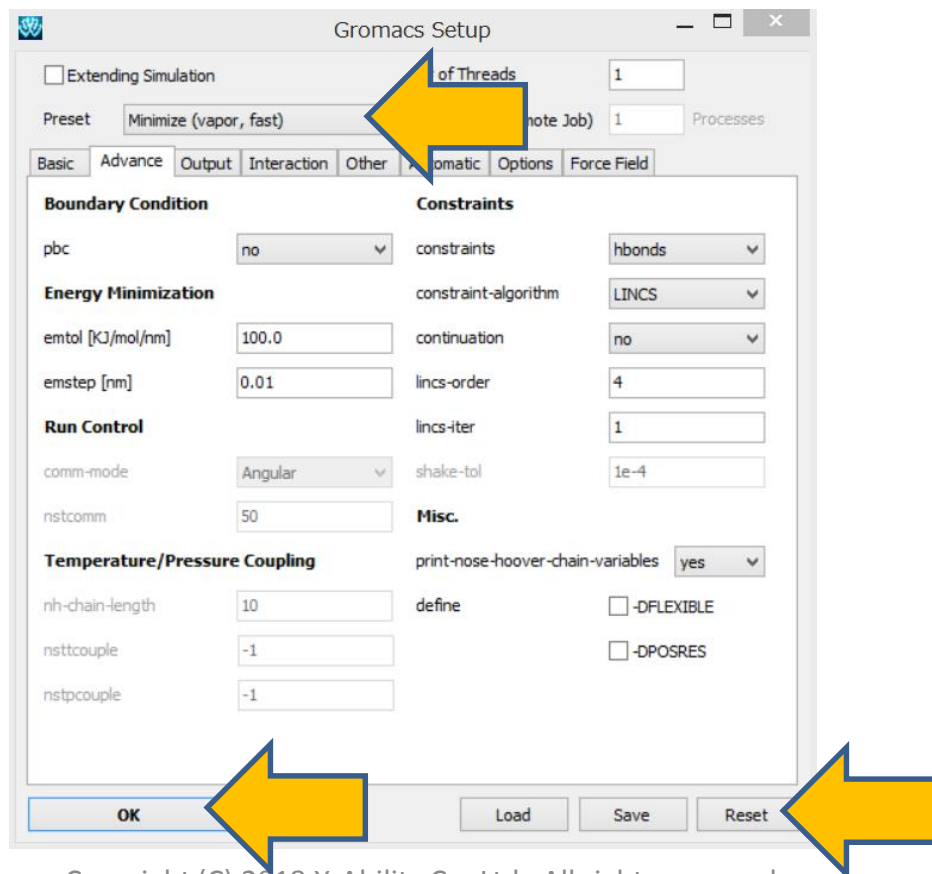
II. 成分1の気相のMD計算(系の作成)

「ファイル＞開く」から先ほどの「benzene.mol2」を開く。



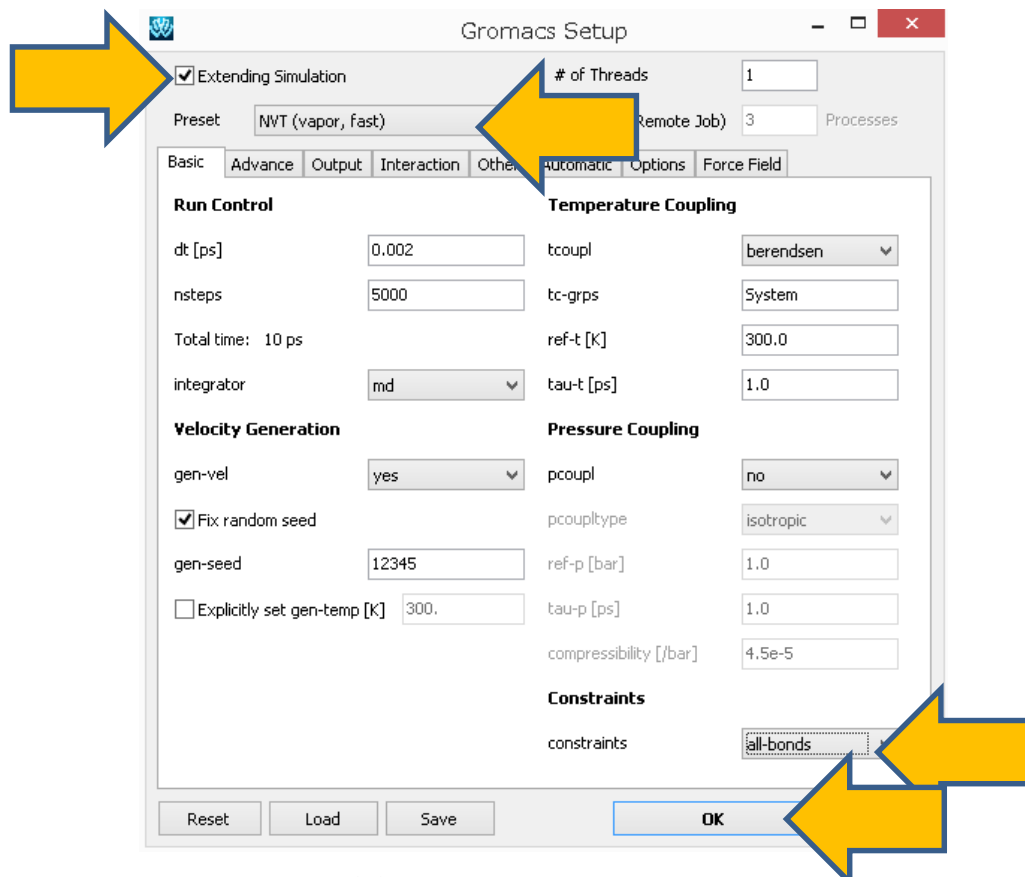
II. 成分1の気相のMD計算(平衡化1)

「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。



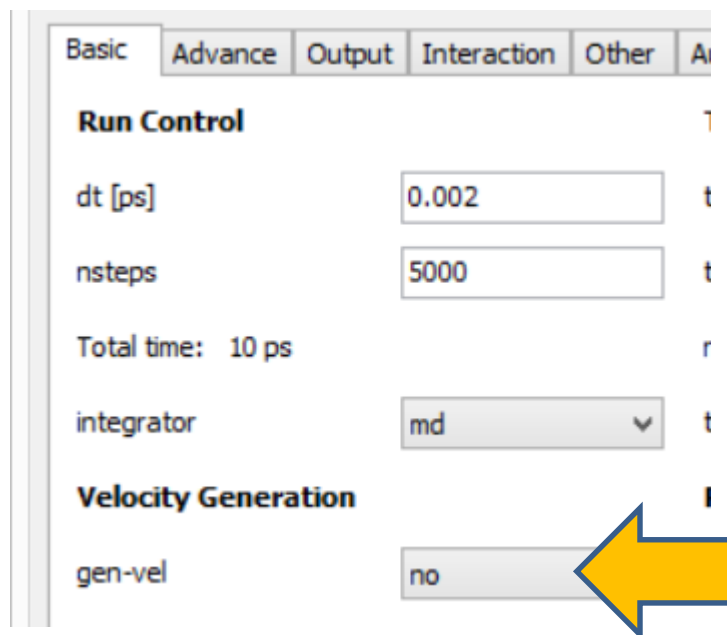
II. 成分1の気相のMD計算(平衡化2)

計算終了後、「MD>Gromacs>キーワード設定」にて「Extending Simulation」にチェックを入れ、「Preset」に「NVT (vapor, fast)」を指定し、「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 screenshot shows the 'Basic' tab of the Gromacs keyword settings window. The 'Run Control' section includes fields for 'dt [ps]' (0.002), 'nsteps' (5000), and 'Total time: 10 ps'. The 'integrator' is set to 'md'. The 'Velocity Generation' section shows 'gen-vel' set to 'no', which is highlighted by a large yellow arrow. The tabs at the top are 'Basic', 'Advance', 'Output', 'Interaction', 'Other', and 'Advanced'.

Tab	Field	Value
Basic	dt [ps]	0.002
	nsteps	5000
	Total time	10 ps
	integrator	md
	gen-vel	no

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。

The screenshot shows the 'Solvate/Build MD Cell' dialog box. It has a title bar with a logo, a close button, and a maximize button. The main area contains a checkbox labeled 'Put the molecule on main window as solute' which is unchecked. Below this is a table with columns: Name, # Mol, Position, mol/L, and Composition. The table has one row with 'WATER', '900', 'Random', '49.957', and 'H2O'. Below the table are three buttons: 'Add Water', 'Add .mol2 File', and 'Delete'. The 'Add Water' button is highlighted with a yellow arrow. Below these buttons are two tabs: 'Simulation Cell' and 'Option'. The 'Simulation Cell' tab is selected. It contains three radio buttons: 'Set Density [g/cm^3]' (selected), 'Set Distance from Solute [nm]', and 'Set Box Size [nm]'. The 'Set Density' radio button is selected, and its value '0.9' is entered in the adjacent text box, which is also highlighted with a yellow arrow. Below the radio buttons are three input fields for 'Box Size [nm]' (all set to 3.1043) and an 'Import' button. Below these are three input fields for 'Angles' (all set to 90.0). Below the angles are a 'Box Type' dropdown menu (set to 'cubic') and a 'Total Number of Atoms: 2700' label. At the bottom are three buttons: 'Reset', 'Build', and 'Cancel'. The 'Build' button is highlighted with a yellow arrow.

Name	# Mol	Position	mol/L	Composition
WATER	900	Random	49.957	H2O

Simulation Cell Option

☒ Set Density [g/cm³] 0.9

☐ Set Distance from Solute [nm]

☐ Set Box Size [nm] 3.1043 3.1043 3.1043 Import

Angles 90.0 90.0 90.0

Box Type cubic

Total Number of Atoms: 2700

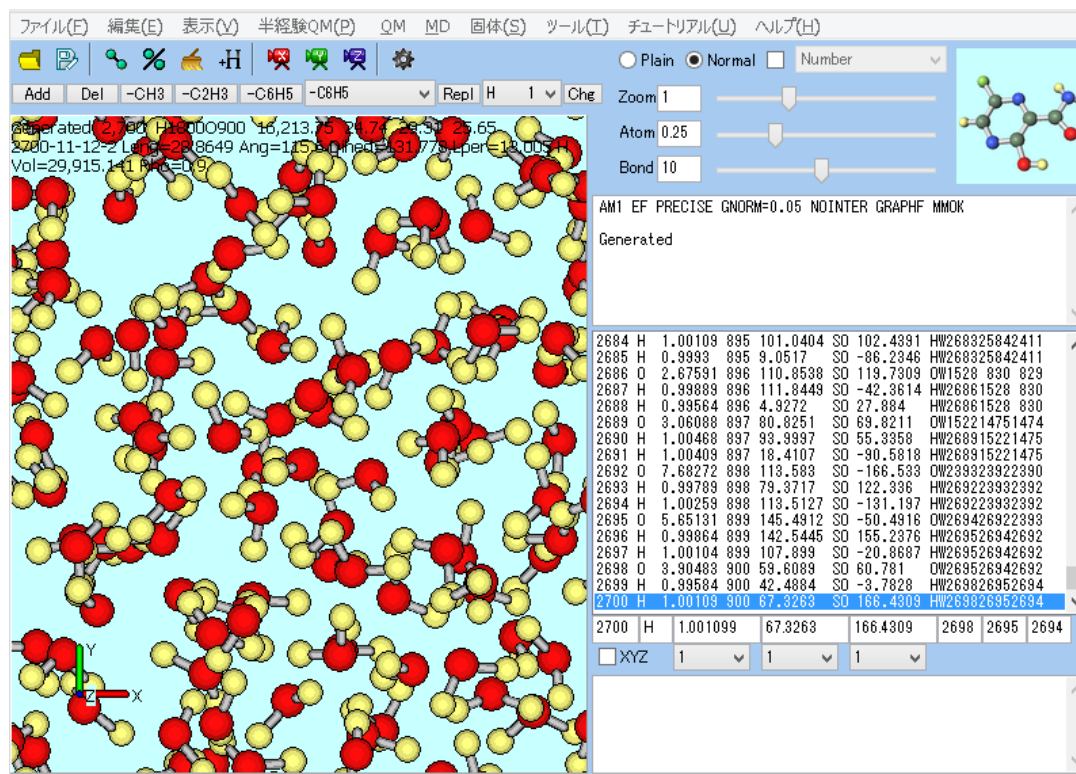
Reset Build Cancel

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。

The screenshot shows the 'Solvate/Build MD Cell' dialog box. It contains a table with the following data:

Name	# Mol	Position	mol/L	Composition
WATER	1	Random	0.056	H2O

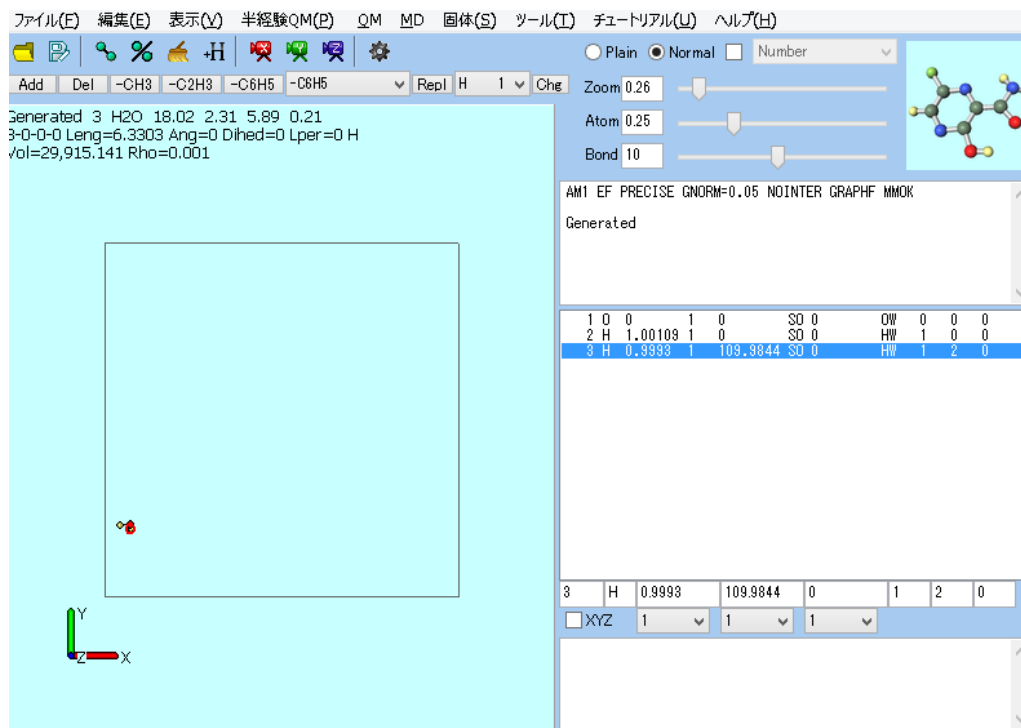
Below the table are buttons for 'Add Water', 'Add .mol2 File', and 'Delete'. The 'Simulation Cell' tab is selected, showing options for 'Set Density [g/cm³]', 'Set Distance from Solute [nm]', and 'Set Box Size [nm]'. The 'Set Density' option is selected with a value of 0.001. The 'Box Type' is set to 'cubic'. The 'Total Number of Atoms' is 3. At the bottom are 'Reset', 'Build', and 'Cancel' buttons. Yellow arrows point to the 'Put the molecule on main window as solute' checkbox, the 'Add Water' button, the 'Set Density' input field, and the 'Build' button.

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。)

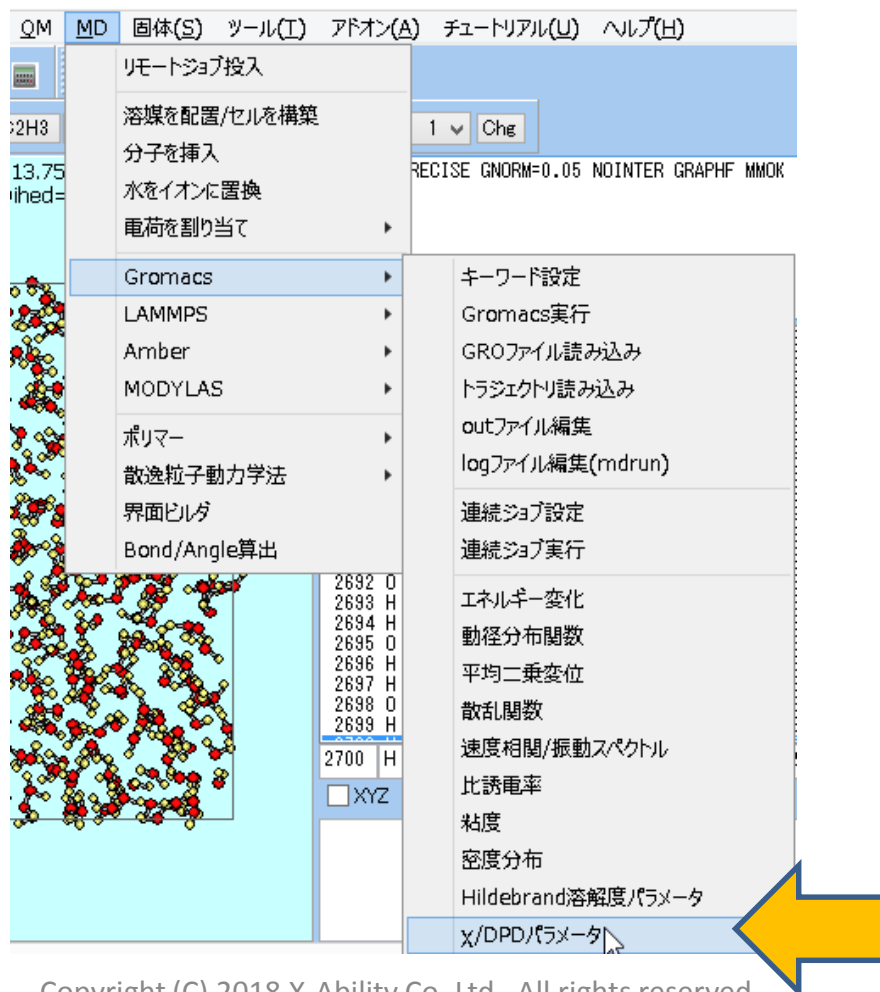
成分1の気相のMD計算(平衡化1～2および本計算)の手順に従い、成分2の気相の計算も実施する。

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。



IV. 結果処理

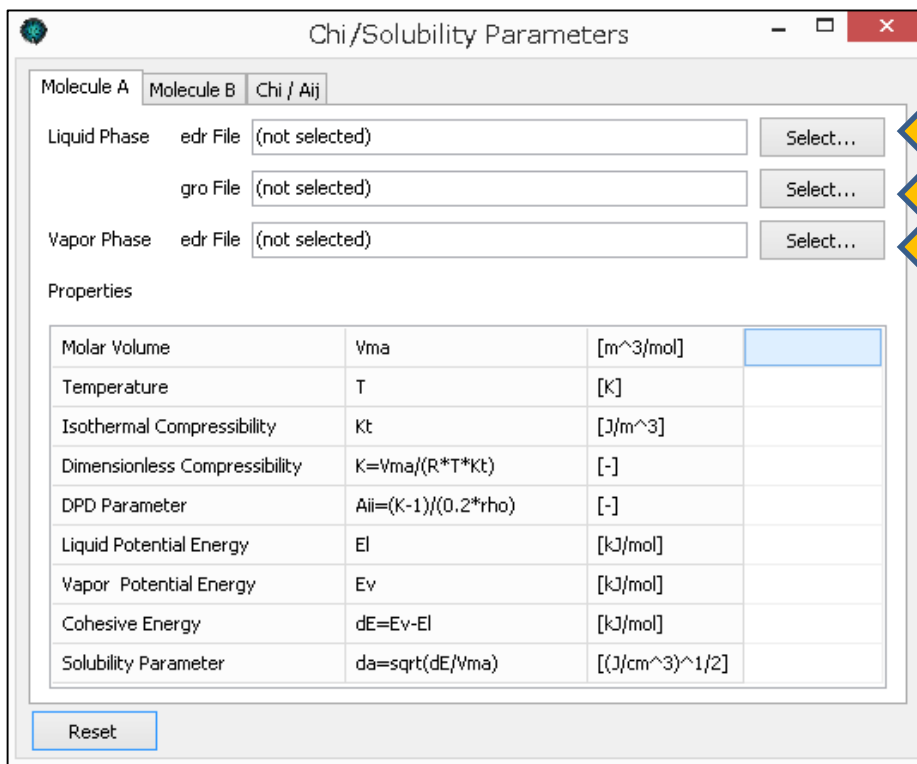
「MD>Gromacs> χ /DPDパラメータ」を選択する。



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」



Chi/Solubility Parameters

Molecule A | Molecule B | Chi / Aij

Liquid Phase | edr File | (not selected) | Select...

gro File | (not selected) | Select...

Vapor Phase | edr File | (not selected) | Select...

Properties

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

Reset

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: Select...

gro File: Select...

Vapor Phase edr File: 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

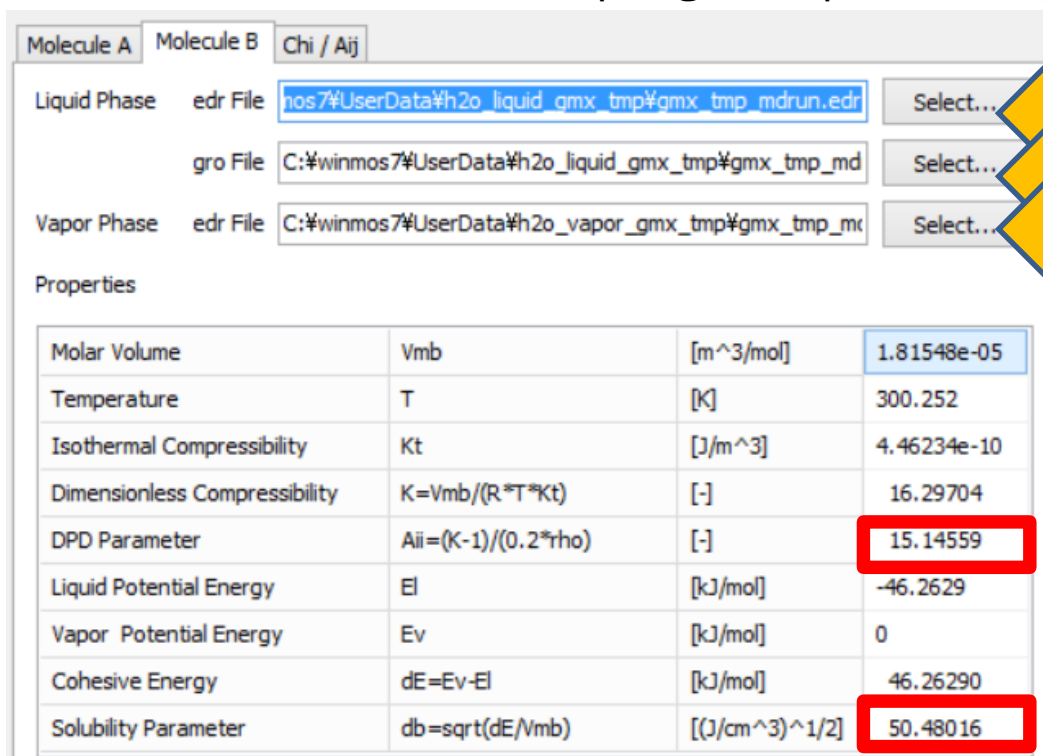
同種粒子間
DPDパラメータ

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」



The screenshot shows the 'Molecule B' tab in the software. It has three 'Select...' buttons for file selection, each indicated by a yellow arrow. Below these is a 'Properties' table with the following data:

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

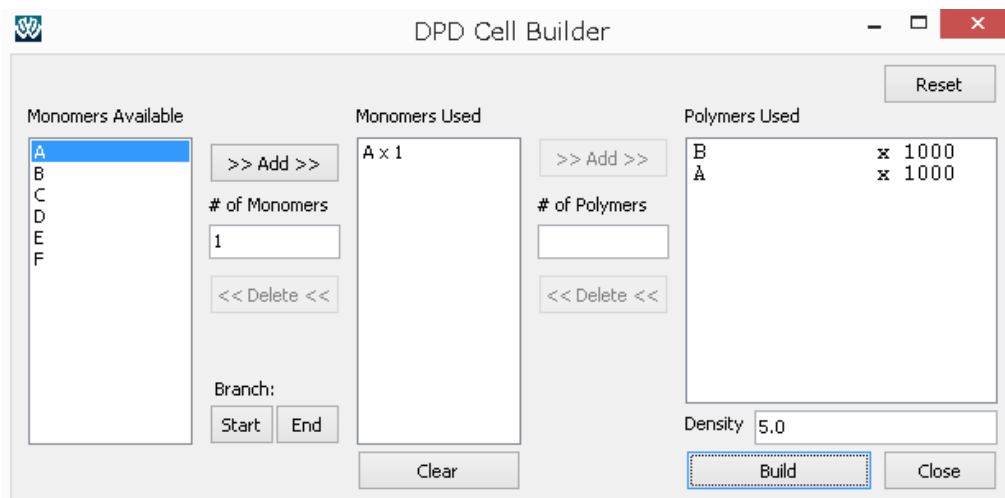
異種粒子間
DPDパラメータ

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。



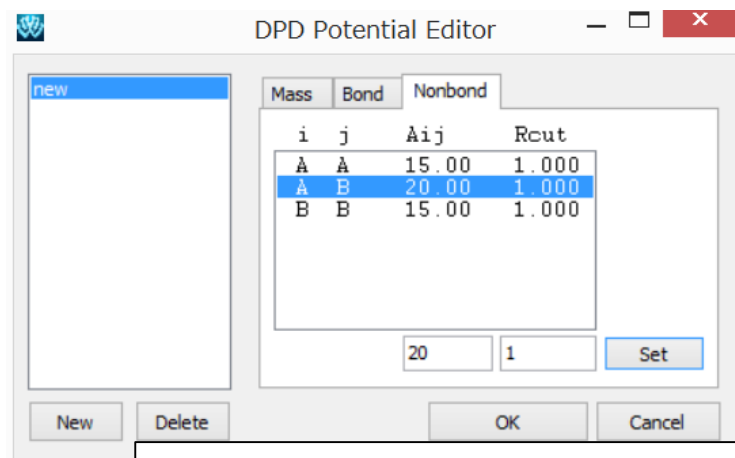
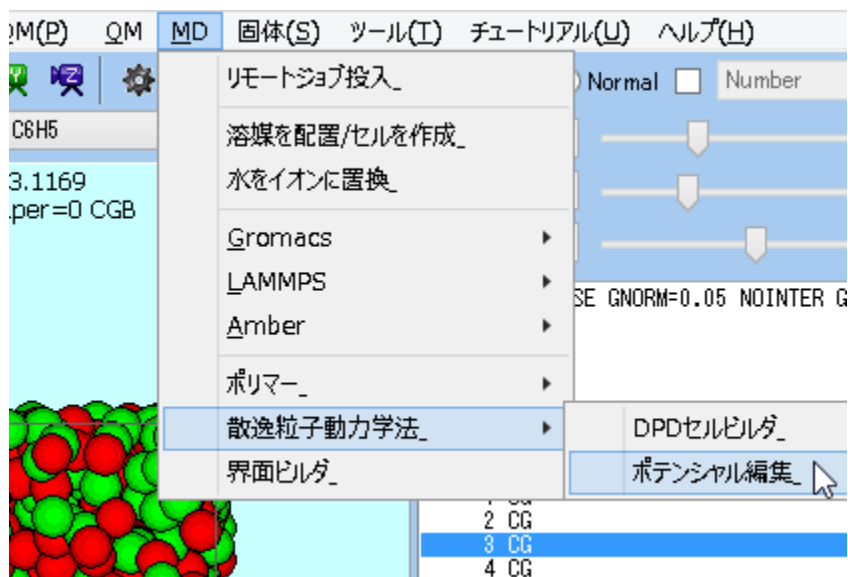
V. DPD計算の設定

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), 2004, 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

デジタル投稿

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