

Winmostar チュートリアル

Gromacs

界面張力

V8.000

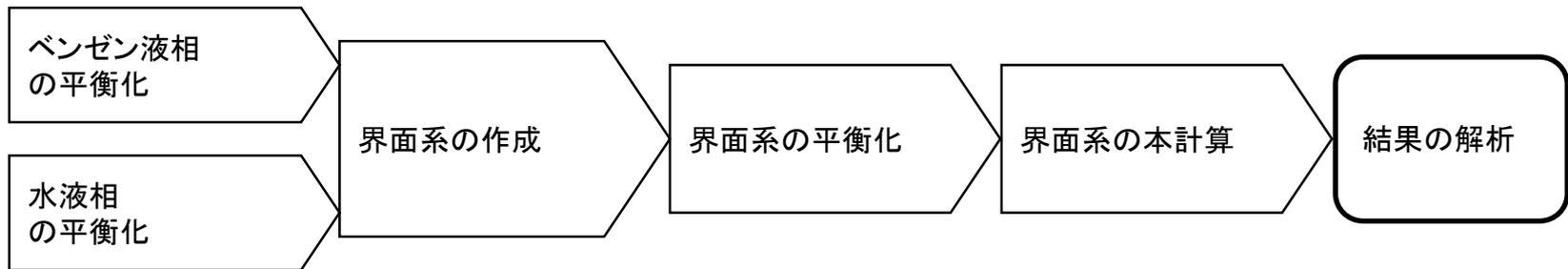
株式会社クロスアビリティ

question@winmostar.com

2017/10/01

概要

- 水-ベンゼンの液-液界面間の密度分布と界面張力を計算します。



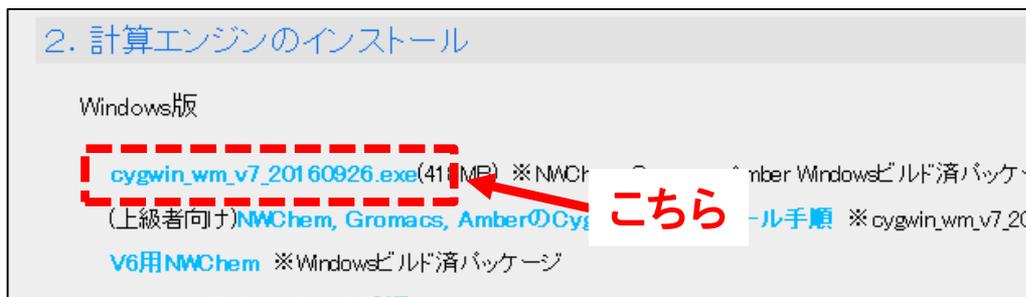
注意点：

- 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。

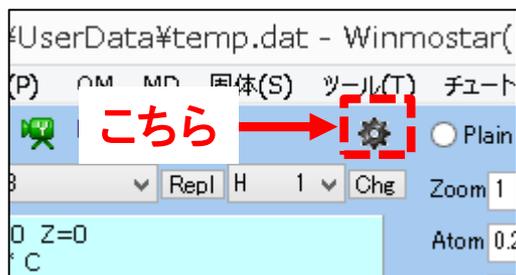
動作環境設定

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)

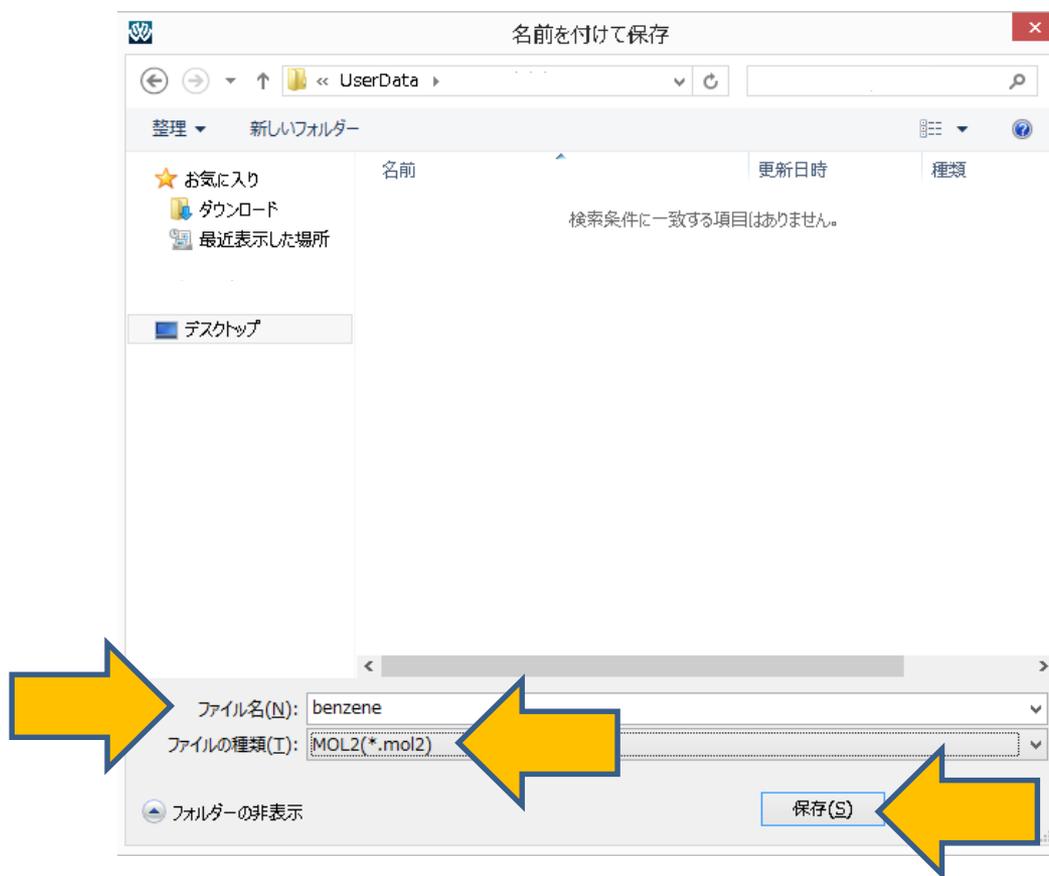
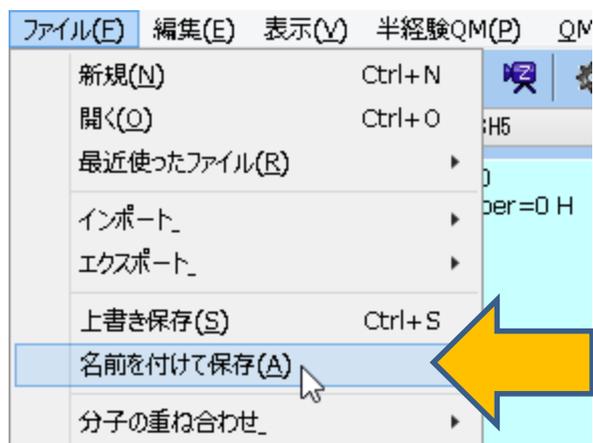
ここでは成分1をベンゼンとする。

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。

Atom	Type	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	0.028	12.011
6	C	1.39505	1	119.9993	1	0.028	12.011
7	C	1.39505	1	119.9979	1	-0.0166	12.011
8	H	1.09867	1	119.998	1	179.872	1.008
9	H	1.09866	1	120.0066	1	179.8743	1.008
10	H	1.09866	1	120.0016	1	-0.0044	1.008
11	H	1.09866	1	120.0033	1	179.9929	1.008
12	H	1.09866	1	120.0049	1	-179.984	1.008

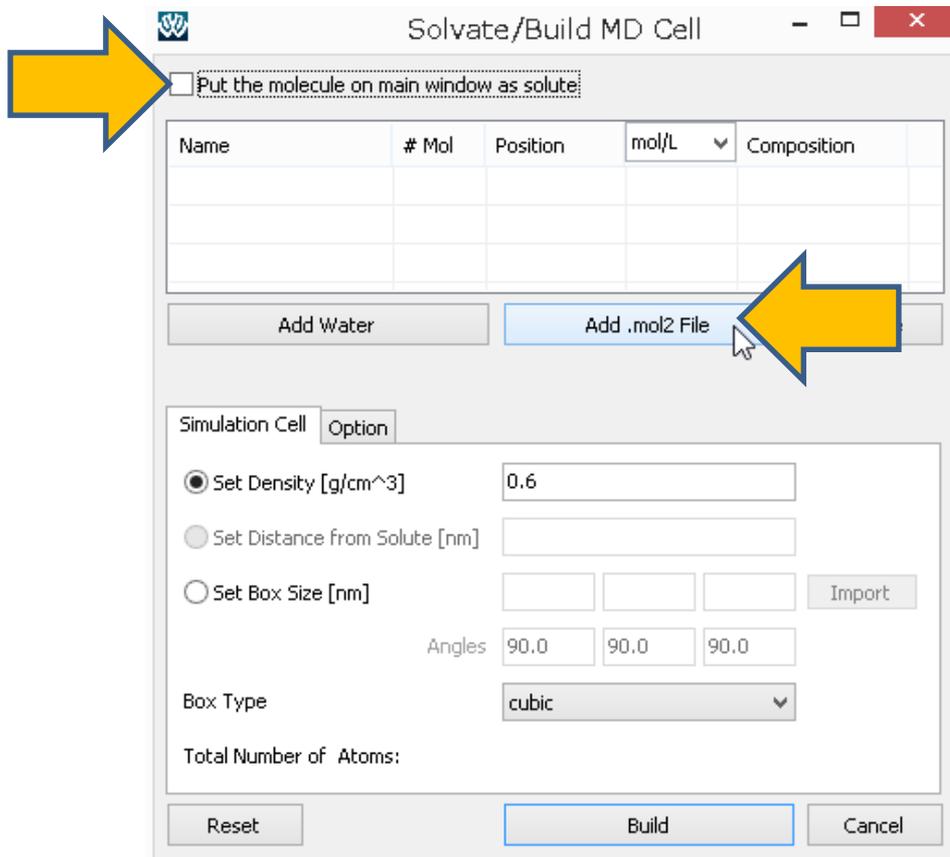
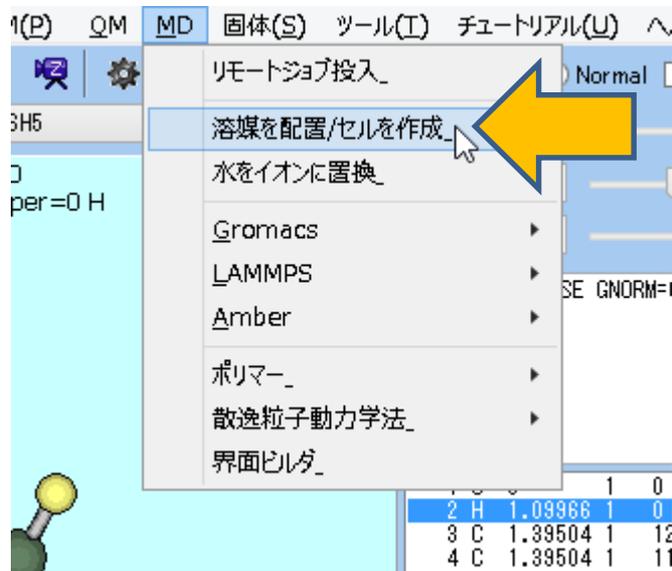
I. 成分1の液相のMD計算(モデリング)

「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。



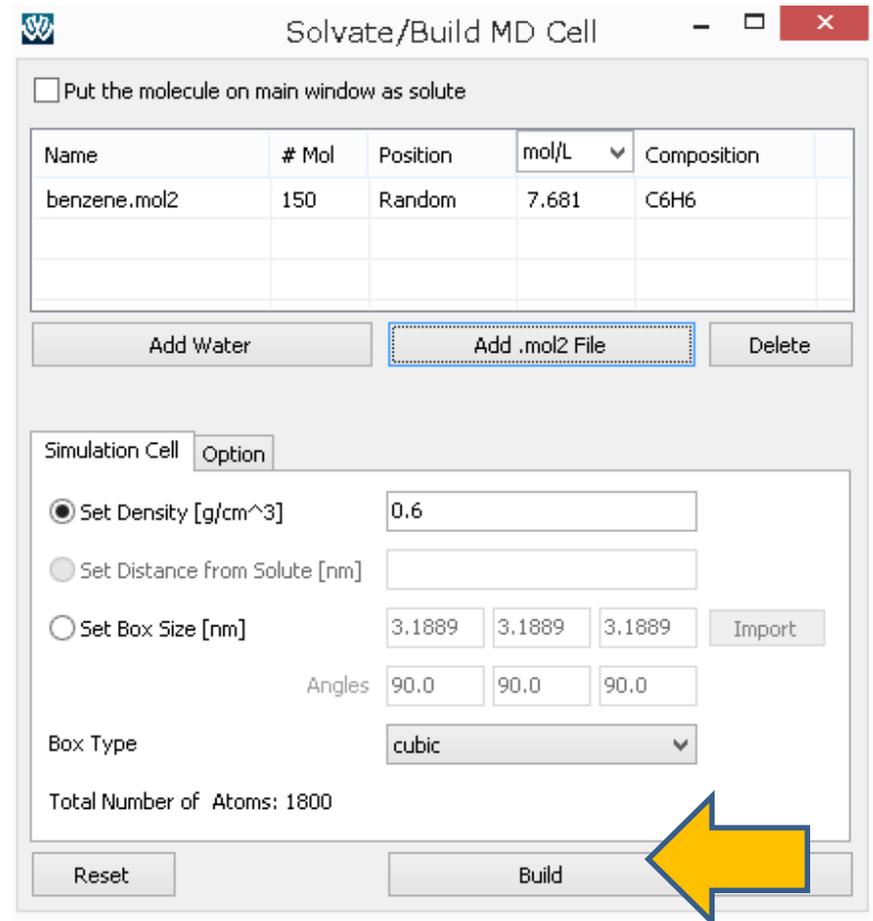
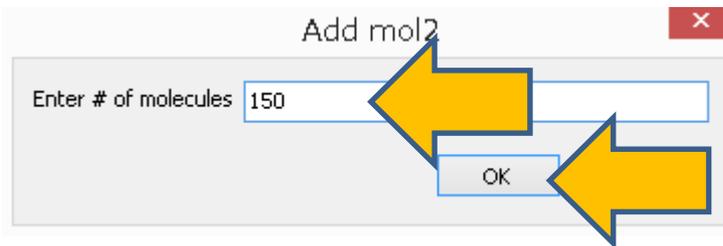
I. 成分1の液相のMD計算(系の作成)

「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。

The screenshot shows the X-Ability software interface. The main window displays a 3D ball-and-stick model of a complex organic molecule. The interface includes a menu bar, a toolbar, and a right-hand panel with a coordinate table.

Menu: ファイル(F) 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(U) ヘルプ(H)

Toolbar: Add Del -CH3 -C2H3 -C6H5 -C6H5 [Rep] H 1 Cheg

Right Panel: Plain Normal Number Zoom 1 Atom 0.25 Bond 10

AM1 EF PRECISE GNORM=0.05 NOINTER GRAPHF MMOK

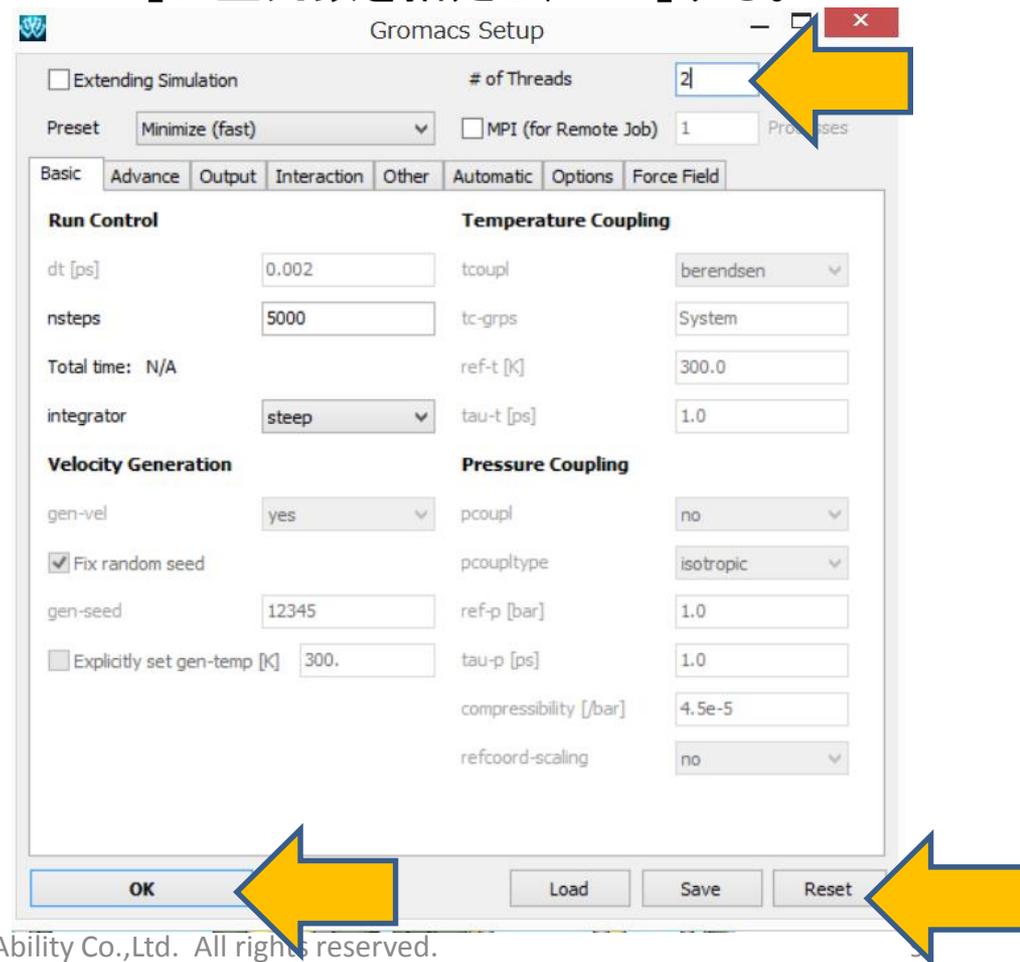
Winmostar

1784	H	1.10145	149	120.317	UN	-44.0858	H	17801777	419
1785	H	1.09695	149	120.6122	UN	-179.688	H	178117801777	
1786	H	1.09599	149	119.7558	UN	131.1273	H	17791777	419
1787	H	1.09622	149	120.327	UN	-179.809	H	178217791777	
1788	H	1.10186	149	120.8773	UN	-179.997	H	178317811780	
1789	C	4.48504	150	83.5823	UN	-95.4178	C	914	913
1790	H	1.09936	150	149.3199	UN	-66.6946	H	1789	914
1791	C	1.3956	150	49.8363	UN	-156.464	C	1789	914
1792	C	1.40676	150	80.7654	UN	61.1992	C	1789	914
1793	C	1.38383	150	119.7872	UN	32.6401	C	17921789	914
1794	C	1.38383	150	120.6344	UN	-44.0734	C	17911789	914
1795	C	1.39570	150	120.5525	UN	0.2993	C	179317921789	
1796	H	1.09594	150	119.5345	UN	-147.384	H	17821789	914
1797	H	1.0995	150	120.0755	UN	179.6383	H	179317921789	
1798	H	1.10127	150	119.2423	UN	136.3192	H	17911789	914
1799	H	1.09594	150	120.6783	UN	-179.856	H	179417911789	
1800	H	1.09279	150	120.5912	UN	-179.473	H	179517931792	

XYZ 1 1 1

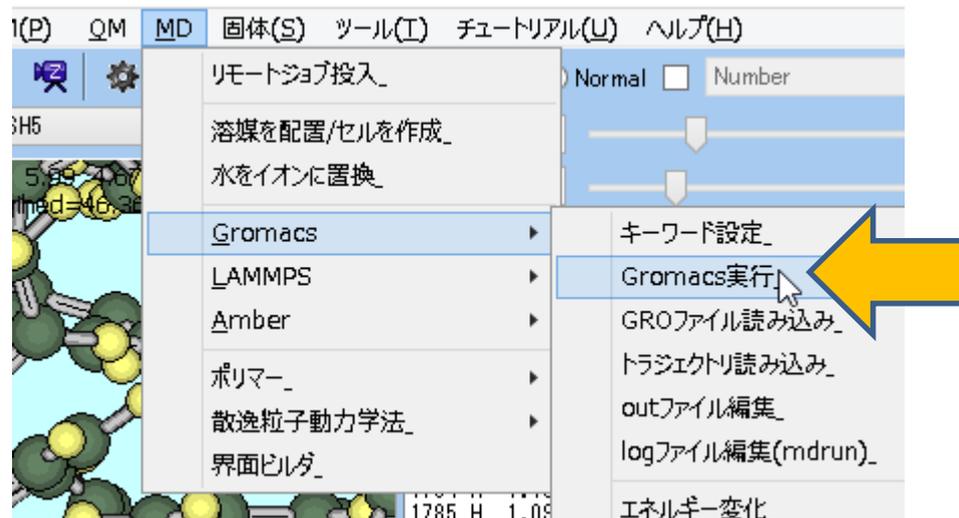
I. 成分1の液相のMD計算(平衡化1)

「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。



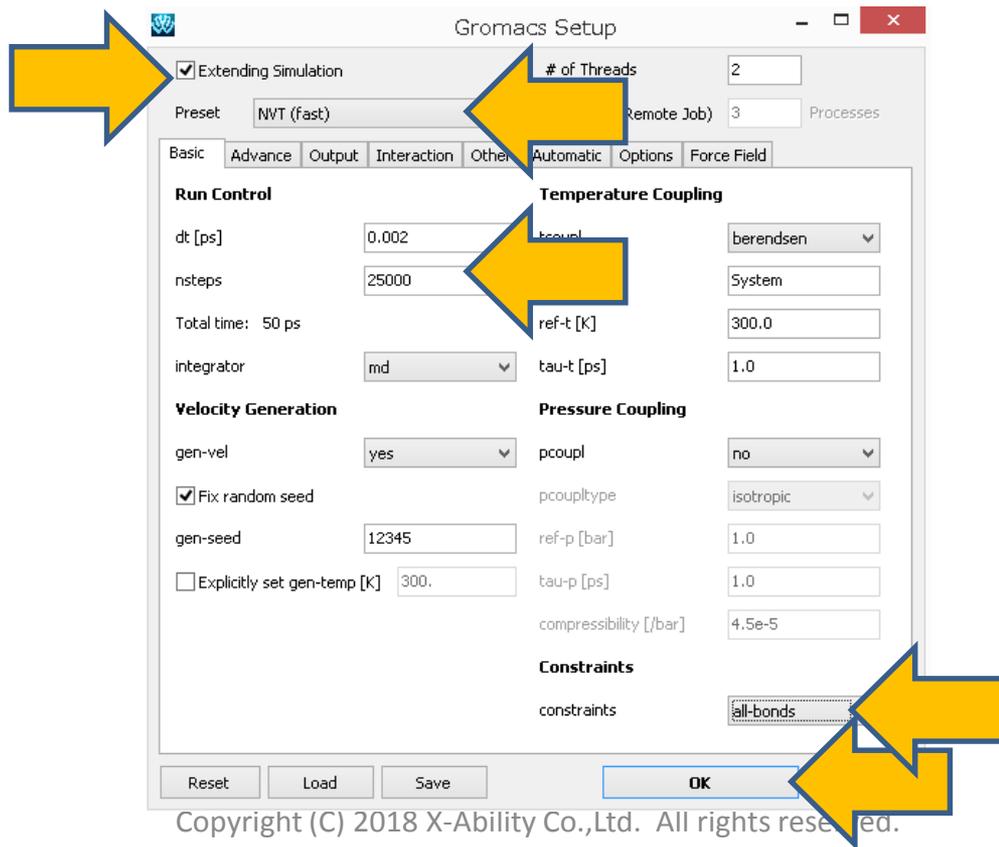
I. 成分1の液相のMD計算(平衡化1)

「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「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。



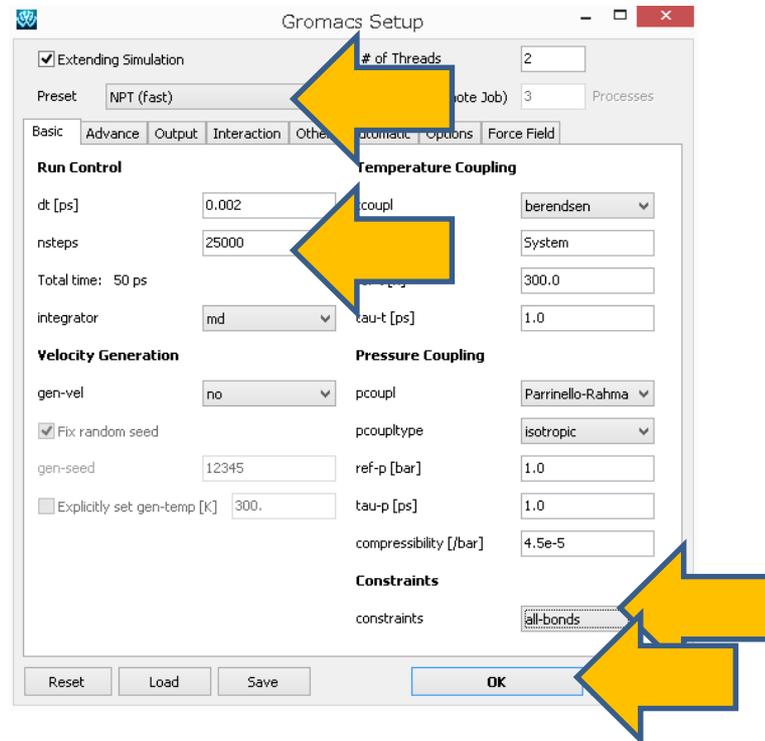
I. 成分1の液相のMD計算(平衡化2)

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)

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。



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。

The screenshot shows the '表示' (View) menu in the X-Ability software. The '周期境界折り返し表示' (Periodic Boundary Wrapping) option is expanded, and 'なし' (None) is selected. A blue arrow points from this menu to the right, where a 3D molecular model of a liquid phase simulation box is displayed. The model shows a complex network of atoms (represented by spheres) and bonds (represented by sticks) within a rectangular simulation box. A coordinate system (X, Y, Z) is visible at the bottom left of the model. The text at the top right of the model reads: 'Generated 1,800, 0.000900 MASS=11,730.00 X=9.41 Y=1.26 Z=2.0 1800-1-2-12 Length=2.4558 Ang=111.4 Dihed=117.475 Lper=0.279 H Vol=24,338.5749 Prop=0.9994'.

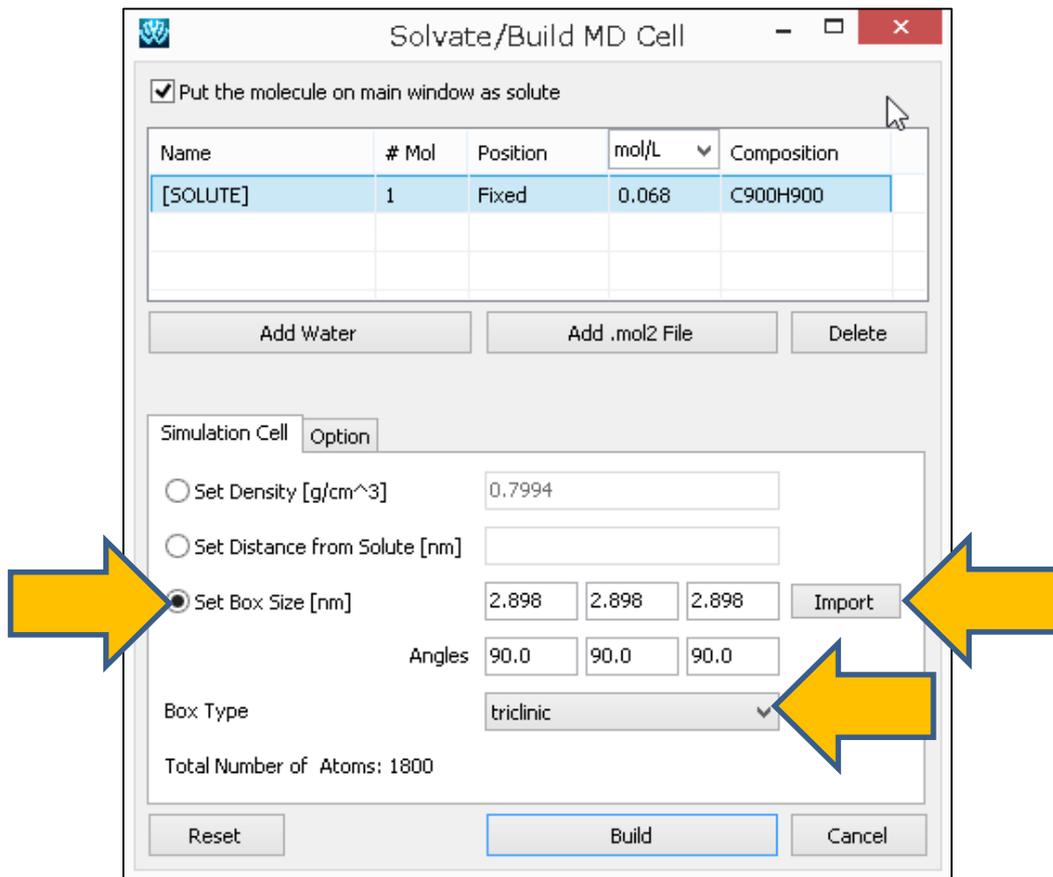
I. 成分1の液相のMD計算(座標の編集)

「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。



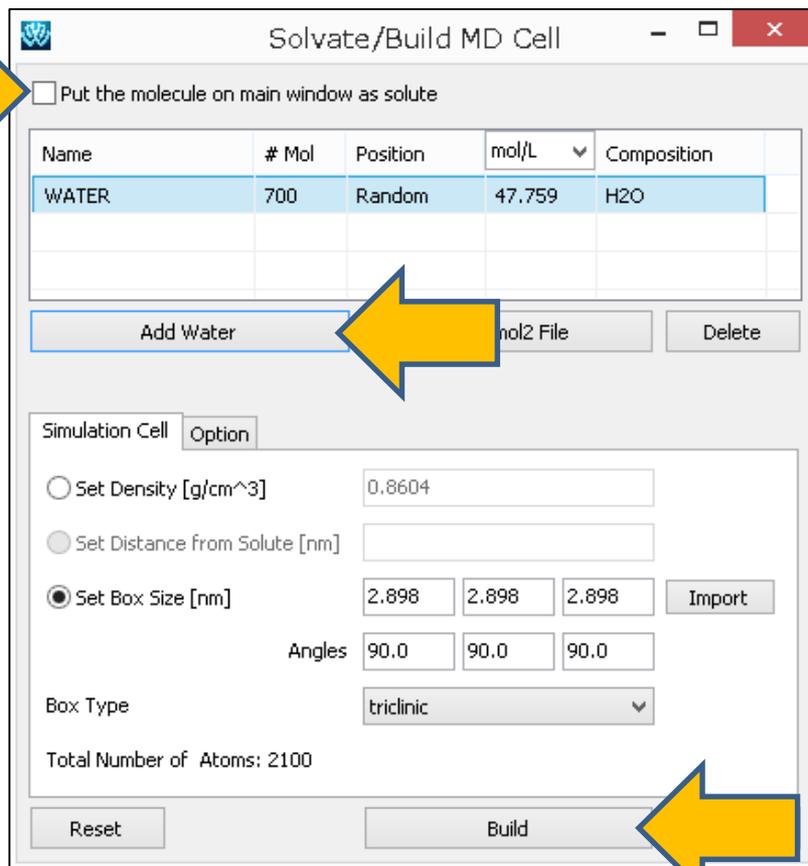
II. 成分2の液相のMD計算(系の作成)

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。

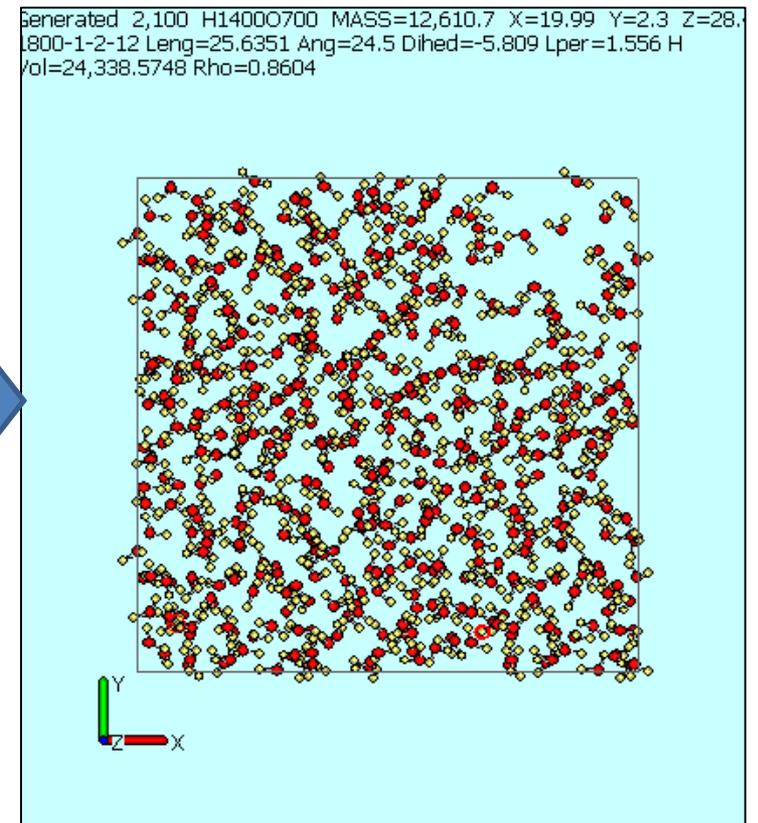


II. 成分2の液相のMD計算(系の作成)

「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。



```
Generated 2,100 H14000700 MASS=12,610.7 X=19.99 Y=2.3 Z=28.7
L800-1-2-12 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。

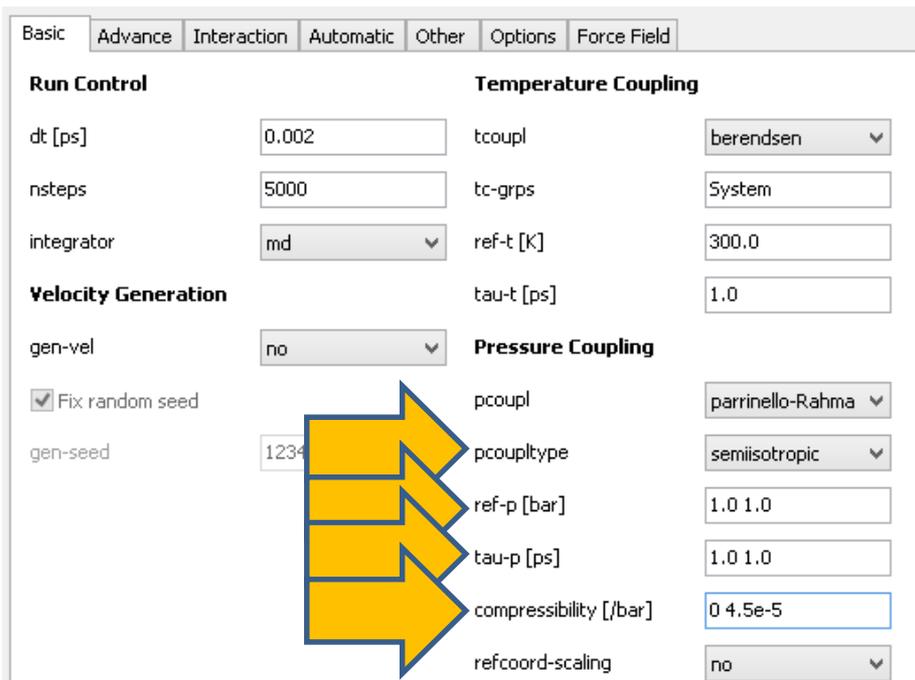
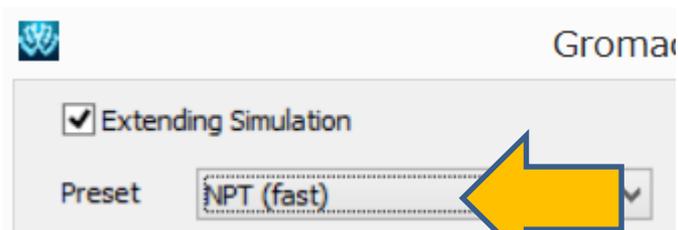
そして「OK」をクリックし、「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。
ファイル名は「water.gro」および「water.top」とする。

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。

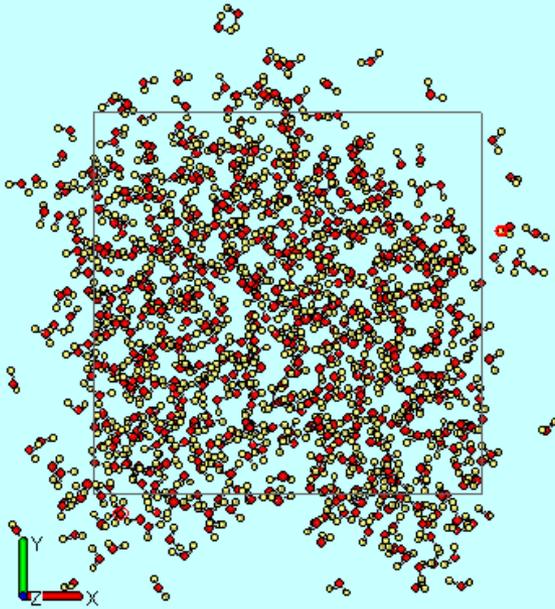
- 「pcoupltype」に「semiisotropic」
- 「ref-p」に「1.0 1.0」
- 「tau-p」に「1.0 1.0」
- 「compressibility」に「0 4.5e-5」(x,y方向に圧力制御をしないための設定)



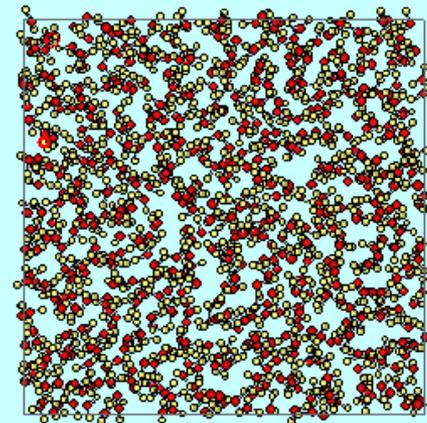
II. 成分2の液相のMD計算(座標の編集)

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
```

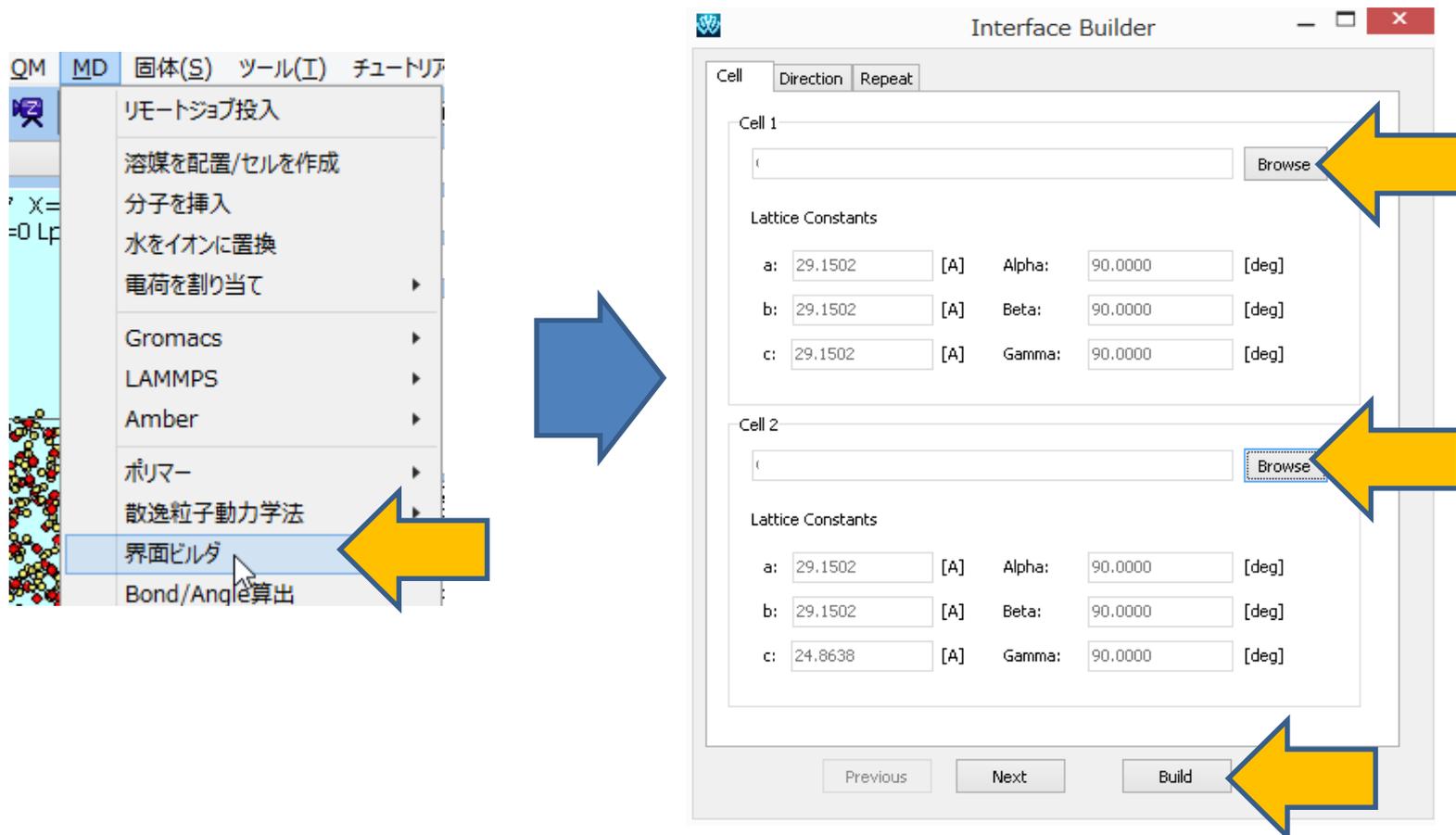


```
generated 2,100 H14000700 MASS=12,610.7 X=1.5098 Y=20.02 Z  
2100-1-1800-1 Leng=15.7528 Ang=69.5 Dihed=0 Lper=0 H  
Vol=21,127.6202 Rho=0.9911
```



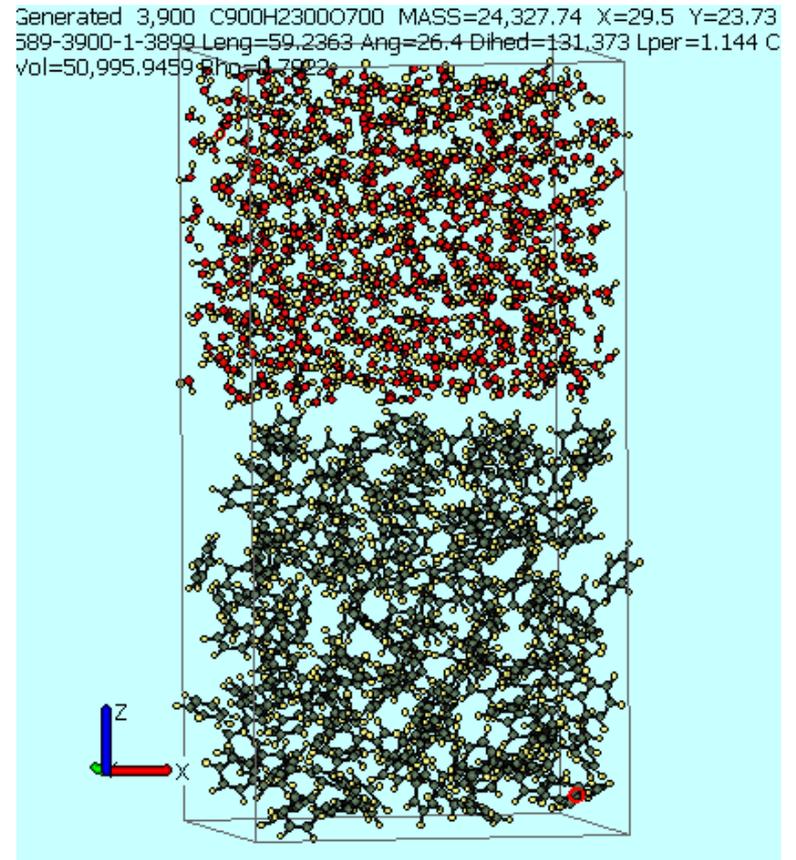
III. 界面系のMD計算(系の作成)

「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。
視点を調整すると作成された系を確認できる。



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。

- 「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」
- 「constraints」に「all-bonds」

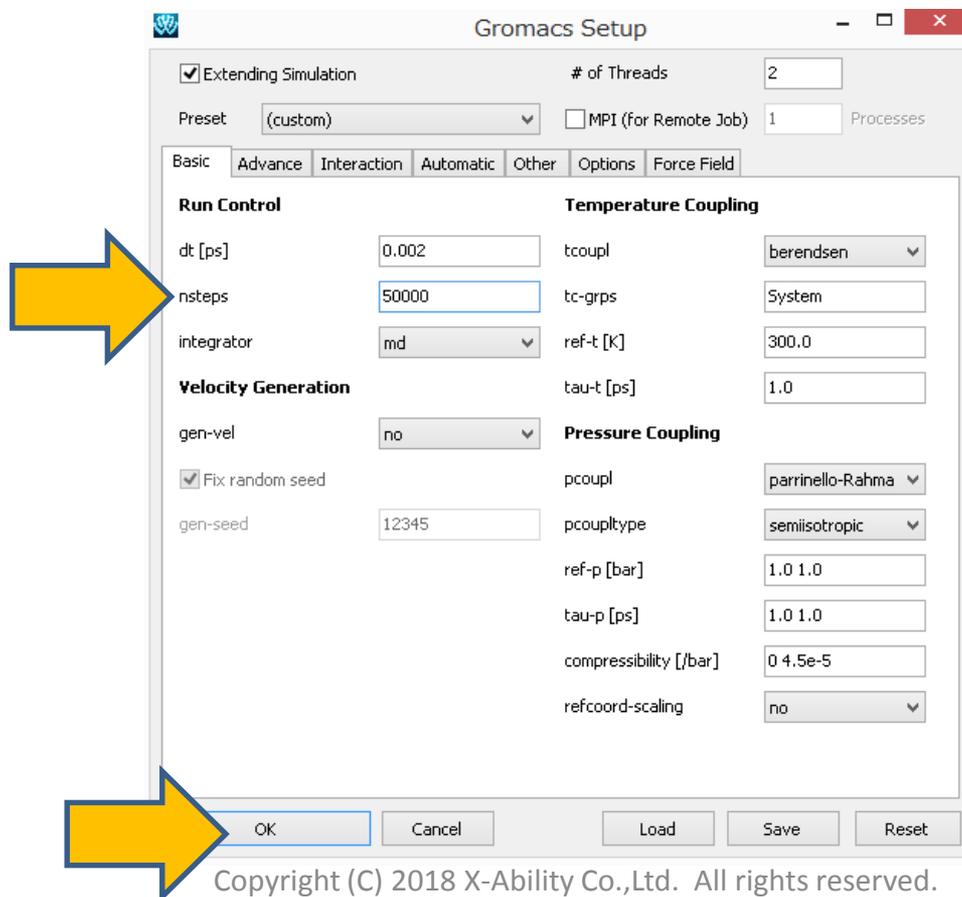
そして「OK」をクリックし、「MD>Gromacs>Gromacs実行」とする。

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。

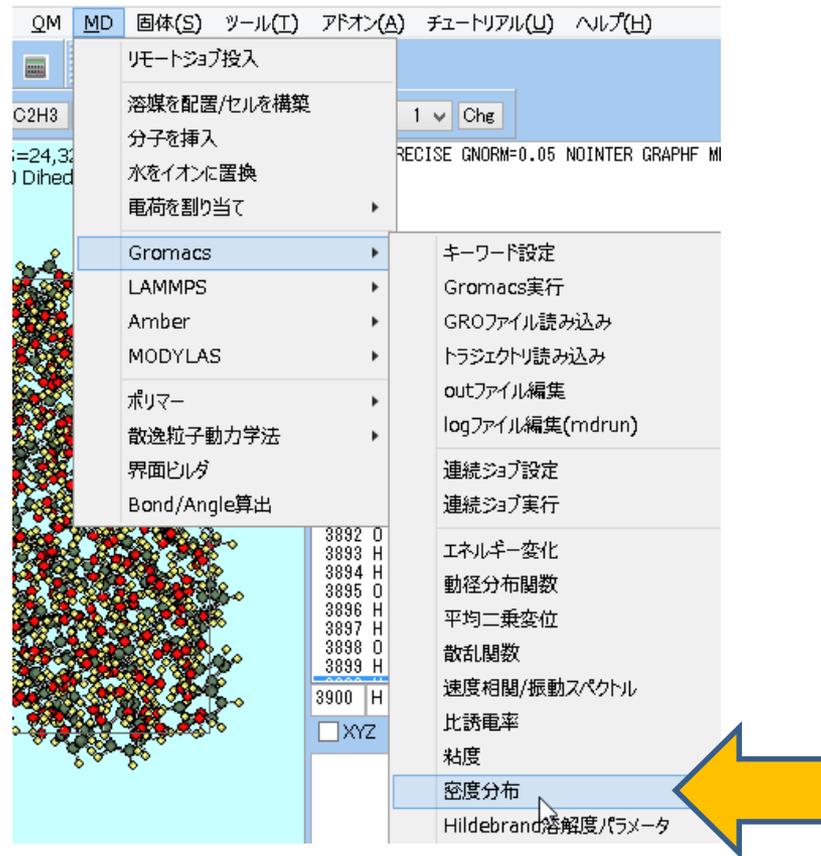
- 「Basic」タブの「nsteps」に「50000」

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



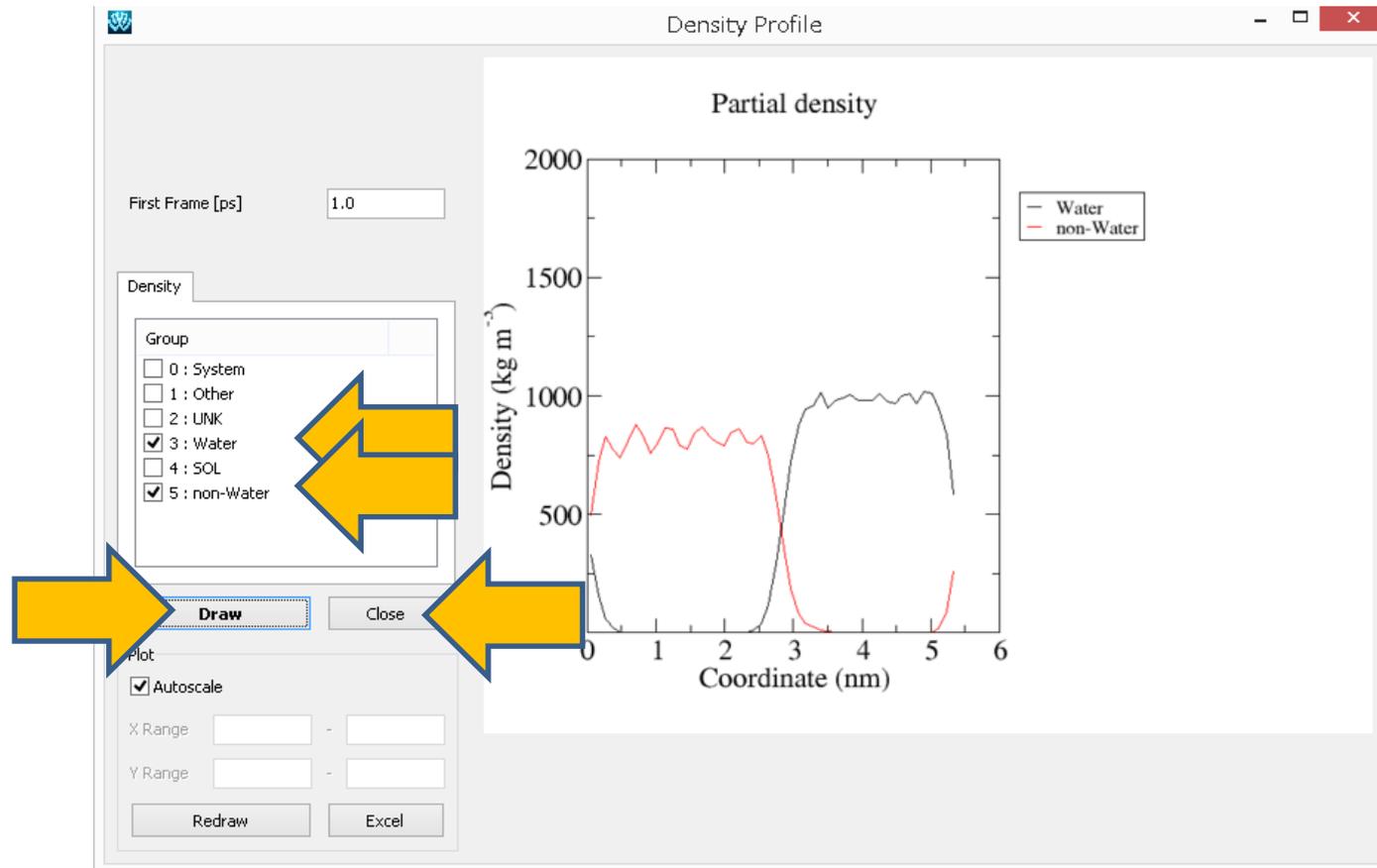
IV. 結果処理

「MD>Gromacs>密度分布」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

「Density」タブの「Group」で「Water」と「non-Water」にチェックを入れ「Draw」ボタンを押すと、z方向に沿った密度分布が出現する。確認後「Close」ボタンを押す。



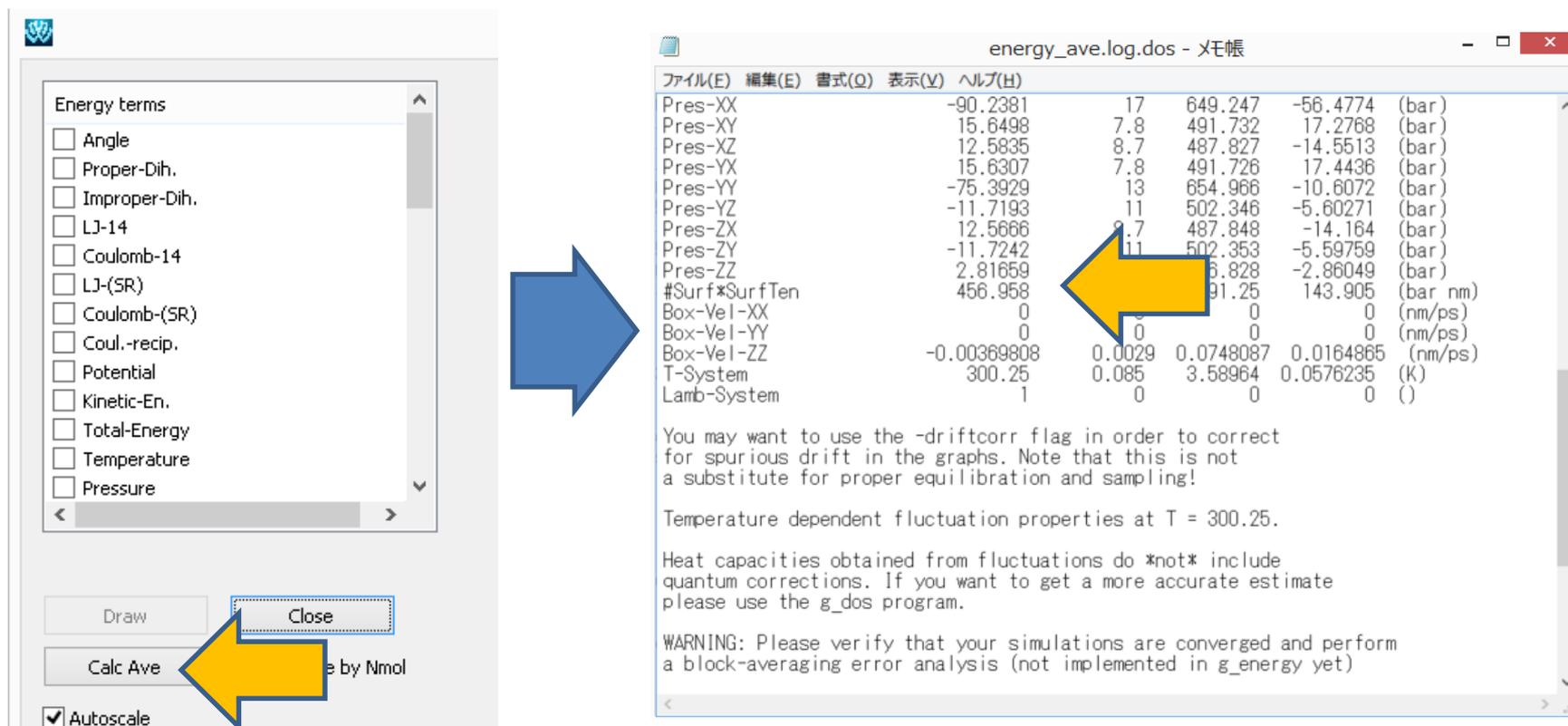
IV. 結果処理

「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「#Surf*SurfTen」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



The screenshot shows the software interface. On the left, the 'Energy terms' dialog box is open, with the 'Calc Ave' button highlighted by a yellow arrow. A blue arrow points from this button to the 'energy_ave.log.dos' window on the right. The output window displays a table of simulation results. A yellow arrow points to the '#Surf*SurfTen' row, which shows a value of 456.958.

Term	Value	Unit
Pres-XX	-90.2381	(bar)
Pres-XY	15.6498	(bar)
Pres-XZ	12.5835	(bar)
Pres-YY	15.6307	(bar)
Pres-YY	-75.3929	(bar)
Pres-YZ	-11.7193	(bar)
Pres-ZX	12.5666	(bar)
Pres-ZY	-11.7242	(bar)
Pres-ZZ	2.81659	(bar)
#Surf*SurfTen	456.958	(bar nm)
Box-Vel-XX	0	(nm/ps)
Box-Vel-YY	0	(nm/ps)
Box-Vel-ZZ	-0.00369808	(nm/ps)
T-System	300.25	(K)
Lamb-System	1	()

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!