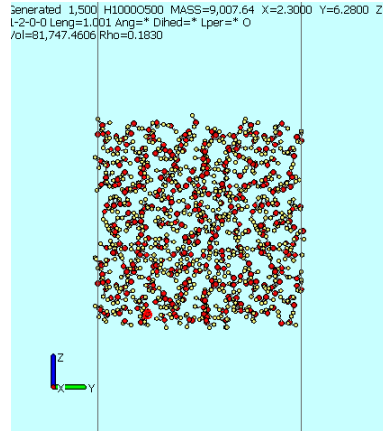


Winmostar™ チュートリアル
Gromacs
蒸気圧・表面張力
V9.0.1

株式会社クロスアビリティ
2019年4月1日

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。



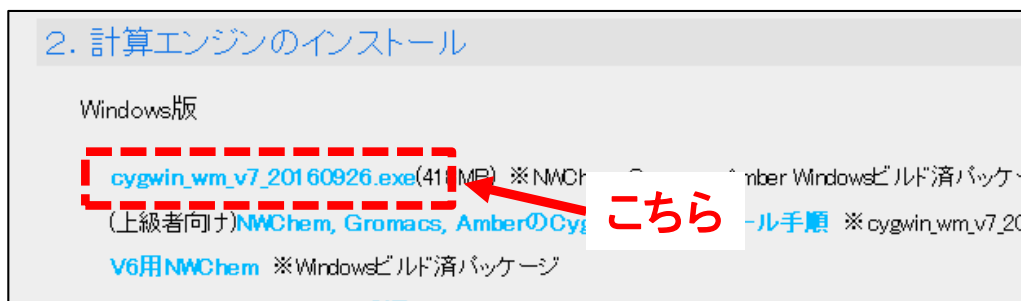
注意点:

- 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。

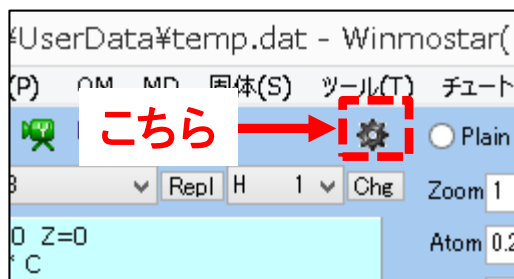
動作環境設定

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。




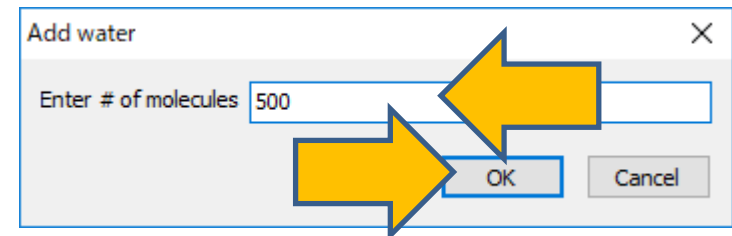
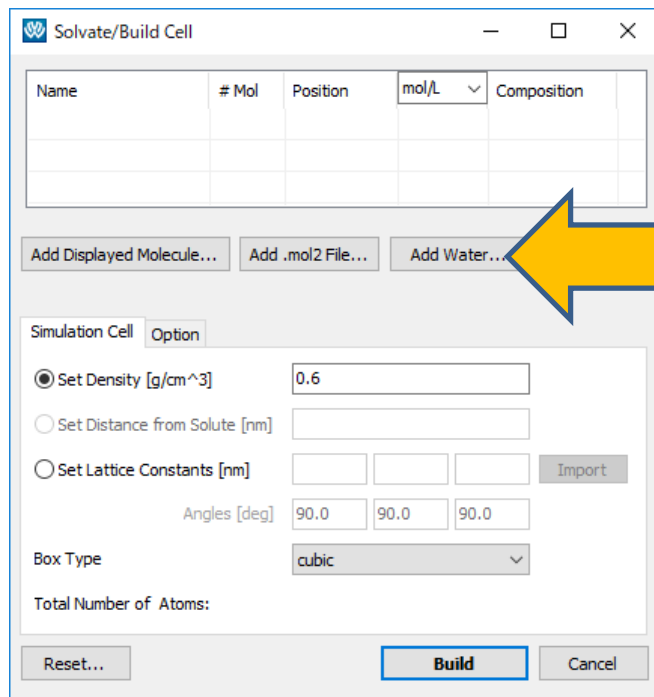
- デフォルトではC:\直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」>「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



I. 系の作成

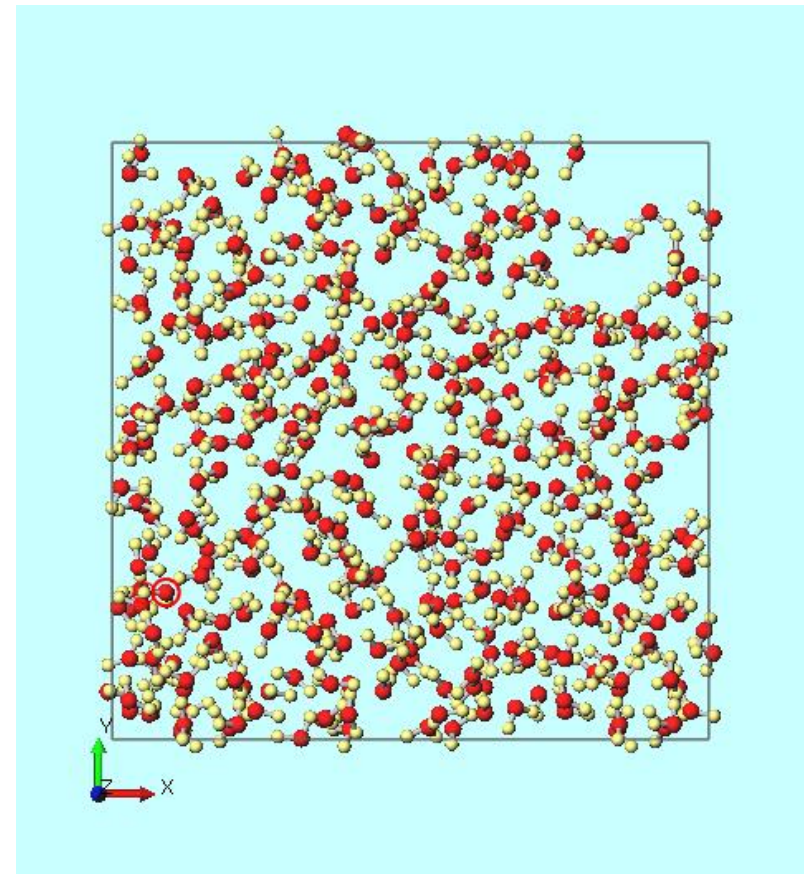
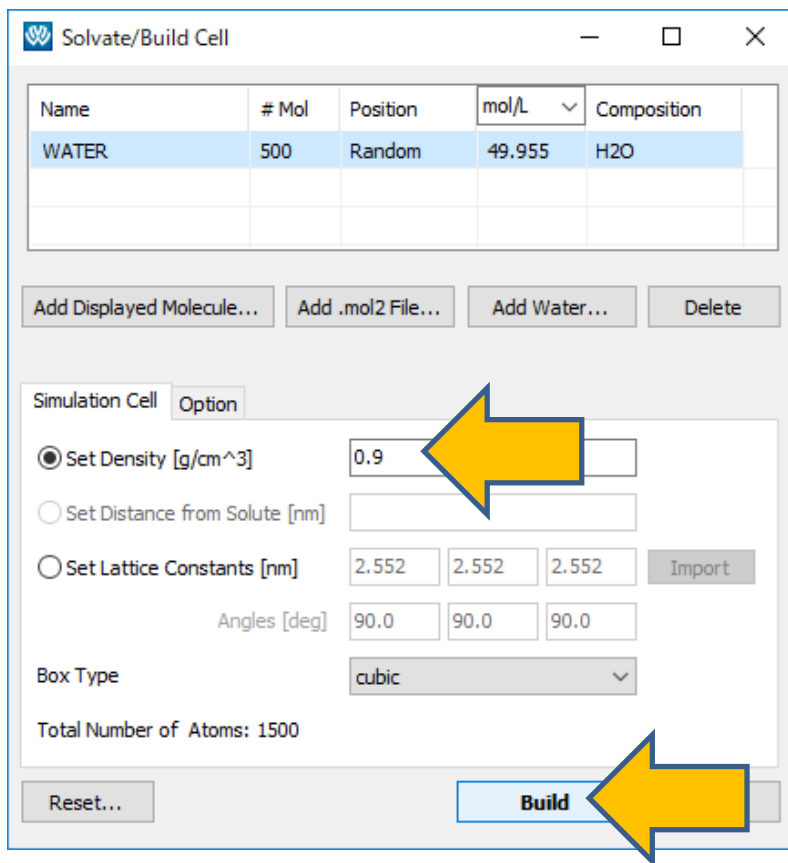
本チュートリアルでは水の気液平衡系の計算から蒸気圧と表面張力を計算する。

1.  (溶媒を配置/セルを作成) をクリックする。
2. **Add Water** をクリックする。
3. **Enter # of molecules** に **500** と入力し **OK** をクリックする。




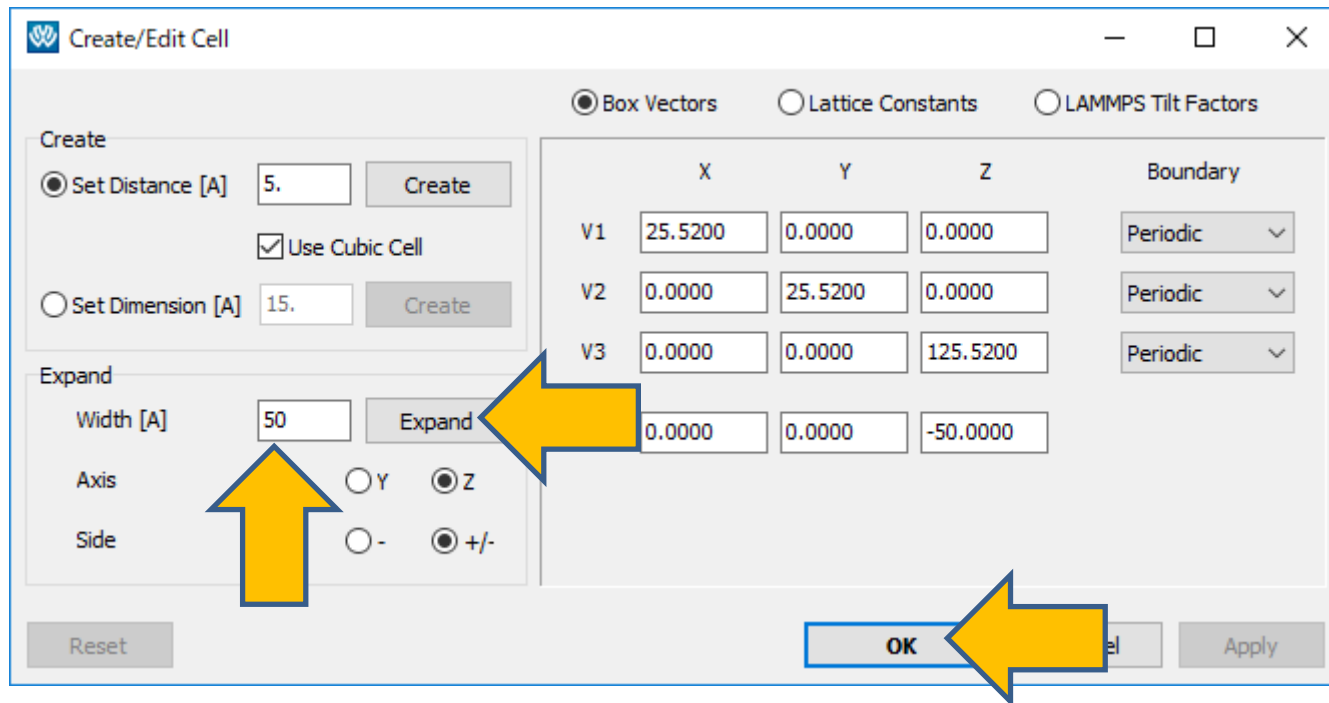
I. 系の作成

1. **Set Density**に**0.9**と入力する。
2. **Build**をクリックすると左図のような系が作成される。





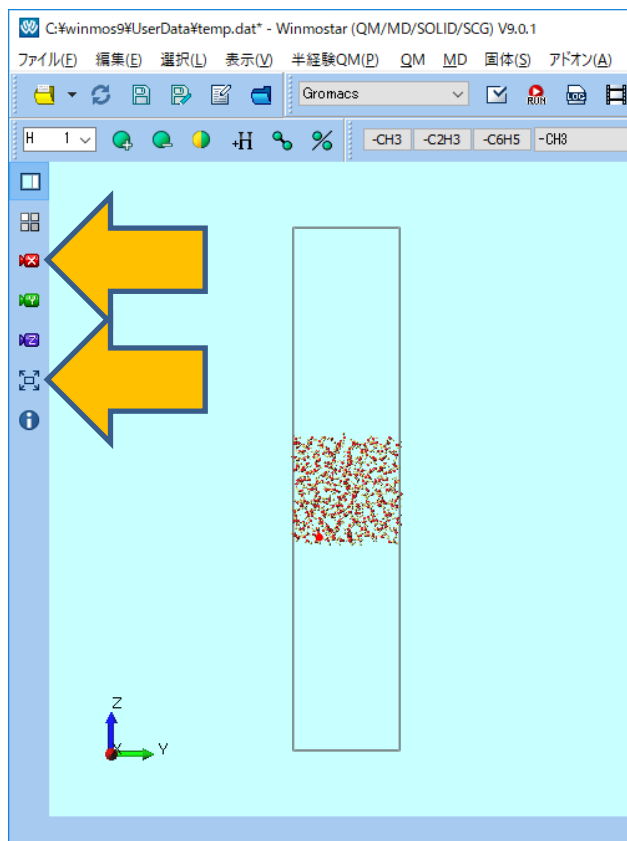
I. 系の作成

1.  (セルを作成/編集)をクリックする。
2. **Expand**の**Width**に**50**と入力し、**Expand**をクリックする。
3. **OK**をクリックする。



1. 系の作成

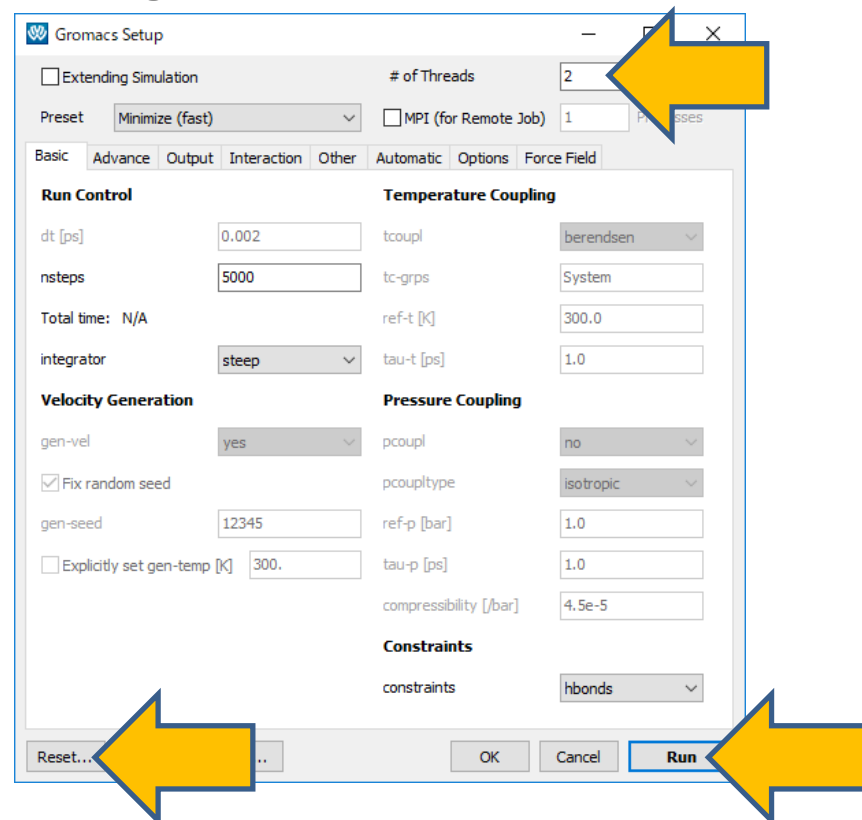
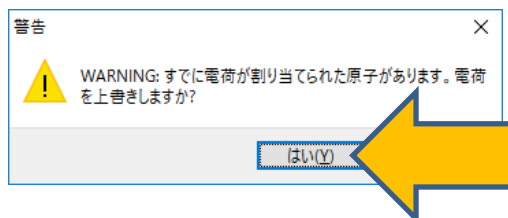
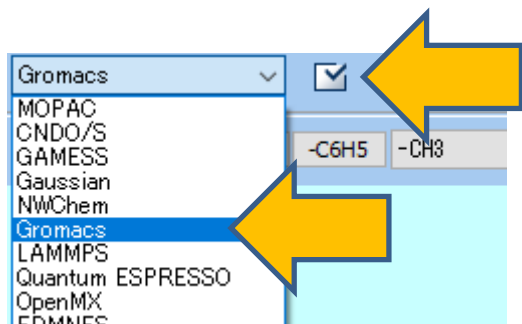
1.  (X軸方向から表示) をクリックする。
2.  (ウィンドウに合わせる) をクリックする。



気液平衡系が作成された様子が分かる。

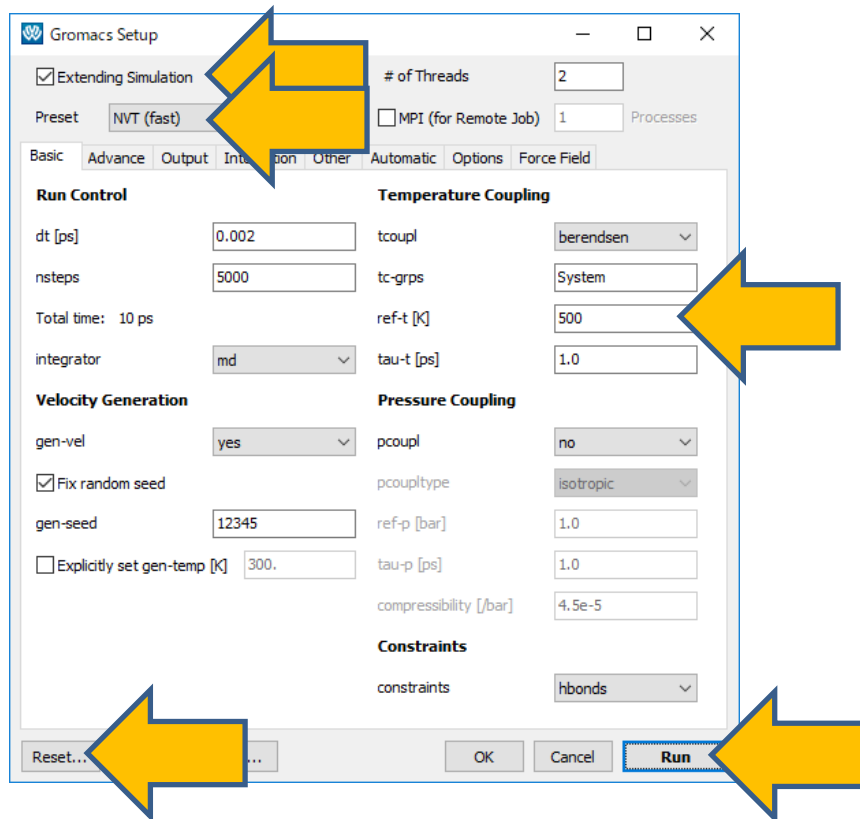
II. 平衡化計算

1. ソルバー一覧から**Gromacs**を選択し (キーワード設定)をクリックする。
2. **Reset**をクリックし、**# of Threads**に並列数を入力する。
3. **Run**をクリックする。
4. 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。
5. 警告ウィンドウではいをクリックする。



II. 平衡化計算

1. 計算終了後、 (キーワード設定) をクリックする。
2. **Extending Simulation**にチェックを入れ**Preset**に**NVT (fast)**を選択する。
3. **ref-t [K]**に**500**を入力する。
4. **Run**をクリックする。



III. 本計算

1. 計算終了後、 (キーワード設定)をクリックする。
2. **nsteps**に**250000**と入力し、**gen-vel**に**no**を選択する。
3. **Run**をクリックする。

Gromacs Setup

Extending Simulation # of Threads: 2

Preset: NVT (fast) MPI (for Remote Job) 1 Processes

Basic | Advance | Output | Interaction | Other | Automatic | Options | Force Field

Run Control

dt [ps]: 0.002

nsteps: 250000

Total time: 500 ps

integrator: md

Velocity Generation

gen-vel: no

Fix random seed

gen-seed: 12345

Explicitly set gen-temp [K]: 300.

Temperature Coupling

tcoupl: berendsen

System

ref-t [K]: 500

tau-t [ps]: 1.0

Pressure Coupling

pcouptype: isotropic

ref-p [bar]: 1.0

tau-p [ps]: 1.0


compressibility [/bar]: 4.5e-5

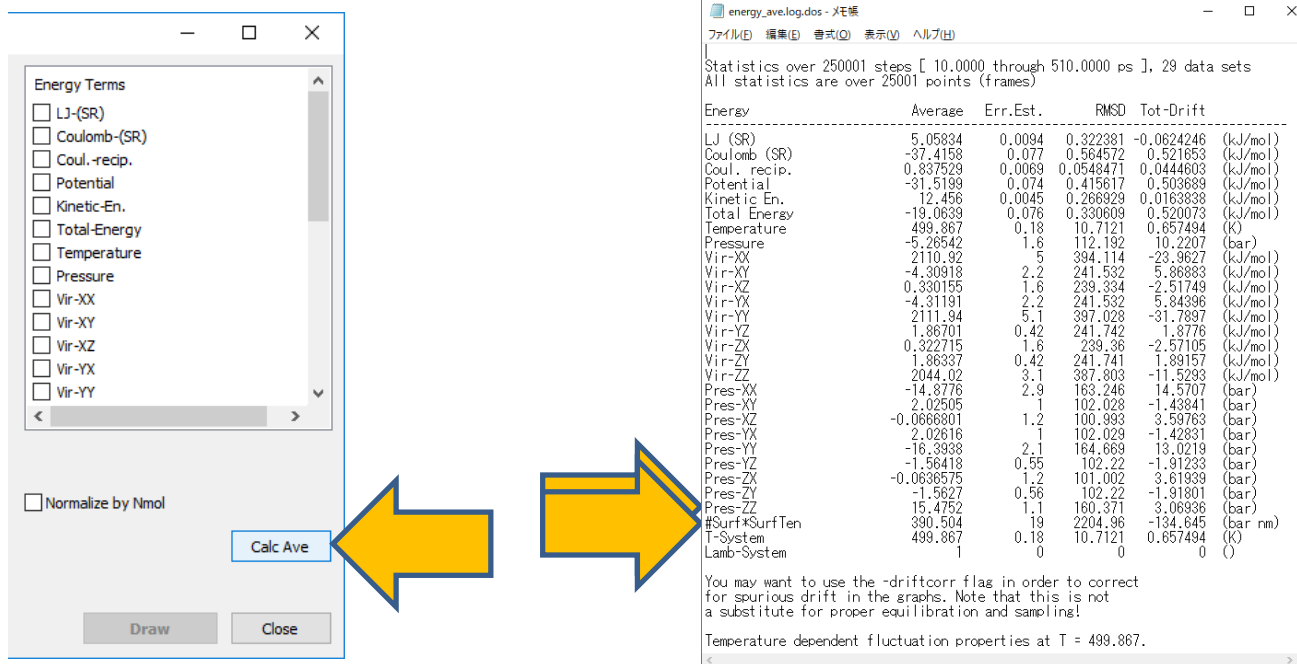
Constraints

constraints: hbonds

Reset... Load... Save... OK Cancel **Run**

IV. 物性算出

1.  (エネルギー変化)をクリックし、デフォルトで選ばれるedrファイルを開く。
2. **Calc Ave**をクリックし、デフォルトで選ばれるgroファイルを開く。
3. **Enter first frame to read**は0のまま**OK**をクリックする。
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。



The screenshot shows the 'energy_ave.log.dos' window with the 'Energy Terms' dialog open. The 'Calc Ave' button is highlighted with a yellow arrow pointing to the data table in the main window.


| Energy | Average | Err.Est. | RMSD | Tot-Drift | |
|---------------|------------|----------|-----------|------------|----------|
| LJ (SR) | 5.05834 | 0.0094 | 0.322381 | -0.0624246 | (kJ/mol) |
| Coulomb (SR) | -37.4158 | 0.077 | 0.564572 | 0.521653 | (kJ/mol) |
| Coul. recip. | 0.837529 | 0.0069 | 0.0548471 | 0.0444803 | (kJ/mol) |
| Potential | -31.5199 | 0.074 | 0.415617 | 0.503689 | (kJ/mol) |
| Kinetic En. | 12.456 | 0.0045 | 0.268329 | 0.0183933 | (kJ/mol) |
| Total Energy | -19.0639 | 0.076 | 0.330609 | 0.520073 | (kJ/mol) |
| Temperature | 499.867 | 0.18 | 10.7121 | 0.657494 | (K) |
| Pressure | -5.26542 | 1.6 | 112.192 | 10.2207 | (bar) |
| Vir-XX | 2110.92 | 5 | 394.114 | -23.9627 | (kJ/mol) |
| Vir-XY | -4.30918 | 2.2 | 241.532 | 5.86883 | (kJ/mol) |
| Vir-XZ | 0.330155 | 1.6 | 239.334 | -2.51749 | (kJ/mol) |
| Vir-YX | -4.31191 | 2.2 | 241.532 | 5.84396 | (kJ/mol) |
| Vir-YY | 2111.94 | 5.1 | 397.028 | -31.7897 | (kJ/mol) |
| Vir-YZ | 1.86701 | 0.42 | 241.742 | 1.8776 | (kJ/mol) |
| Vir-ZX | 0.322715 | 1.6 | 239.36 | -2.57105 | (kJ/mol) |
| Vir-ZY | 1.86337 | 0.42 | 241.741 | 1.89157 | (kJ/mol) |
| Vir-ZZ | 2044.02 | 3.1 | 367.803 | -11.5293 | (kJ/mol) |
| Pres-XX | -14.8776 | 2.9 | 163.246 | 14.5707 | (bar) |
| Pres-XY | 2.02505 | 1 | 102.028 | -1.43841 | (bar) |
| Pres-XZ | -0.0666801 | 1.2 | 100.993 | 3.59763 | (bar) |
| Pres-YX | 2.02616 | 1 | 102.029 | -1.42831 | (bar) |
| Pres-YY | -16.3938 | 2.1 | 164.669 | 13.0219 | (bar) |
| Pres-YZ | -1.56418 | 0.55 | 102.22 | -1.91233 | (bar) |
| Pres-ZX | -0.0636575 | 1.2 | 101.002 | 3.61939 | (bar) |
| Pres-ZY | -1.5627 | 0.56 | 102.22 | -1.91801 | (bar) |
| Pres-ZZ | 15.4752 | 1.1 | 160.371 | 3.06936 | (bar) |
| #Surf*SurfTen | 390.504 | 19 | 2204.96 | -134.645 | (bar nm) |
| T-System | 499.867 | 0.18 | 10.7121 | 0.657494 | (K) |
| Lamb-System | 1 | 0 | 0 | 0 | () |

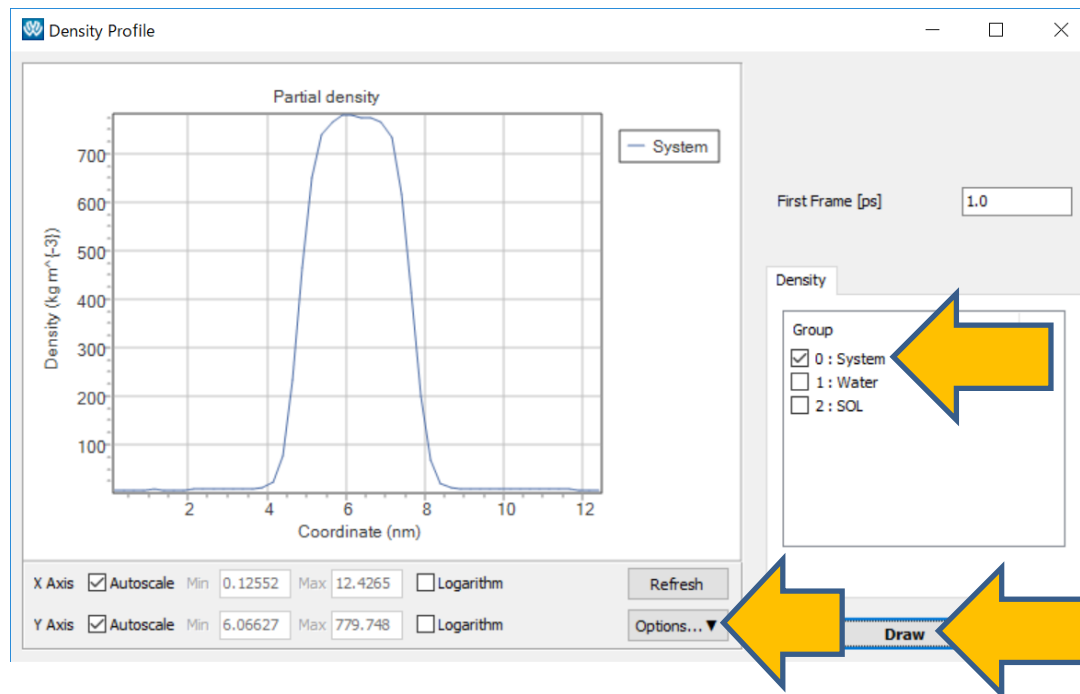
You may want to use the -driftcorr flag in order to correct for spurious drift in the graphs. Note that this is not a substitute for proper equilibration and sampling!

Temperature dependent fluctuation properties at T = 499.867.

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

IV. 物性算出

1.  (結果解析) | 密度分布をクリックし、デフォルトで選ばれる3つのファイルを開く。
2. **Group**で**0: System**にチェックを入れる。
3. **Draw**をクリックすると、z軸方向の密度分布が表示される。
4. 液相、気相それぞれの密度を取得する際は、**Options | Open Excel**をクリックし、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。



<https://www.facebook.com/X-Ability-CoLtd-168949106498088/>

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.さんや他の友

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! 138件

情報

http://x-ability.jp/

写真

ユーザー投稿

X-Ability Co.,Ltd.
11月14日 20:30 · 公開

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_au_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 · 公開