

# Winmostar™ チュートリアル

## Gromacs

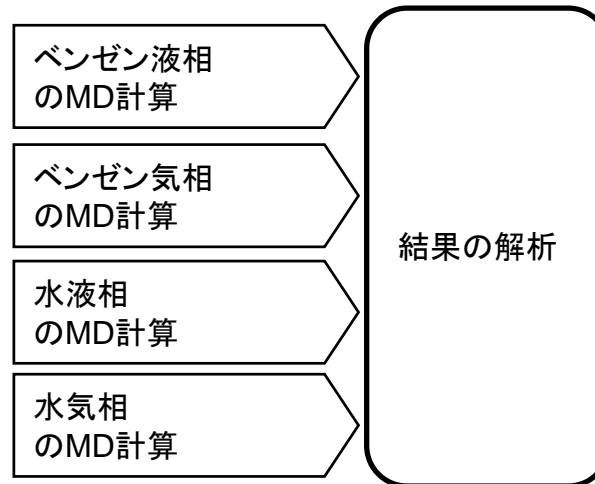
### 溶解度/ $\chi$ /DPDパラメータの算出

V9.0.2

株式会社クロスアビリティ  
2019年2月7日

## 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  $\chi$  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/download\\_jp.html](https://winmostar.com/jp/download_jp.html)のインストール方法のビルド済みのcygwin\_wmをインストールする場合をクリックし、そこに書かれた手順に従いセットアップを行います。

## Winmostar(TM) V8用 Gromacs, Amber のインストール


### 1. 簡易インストール方法(Windows)

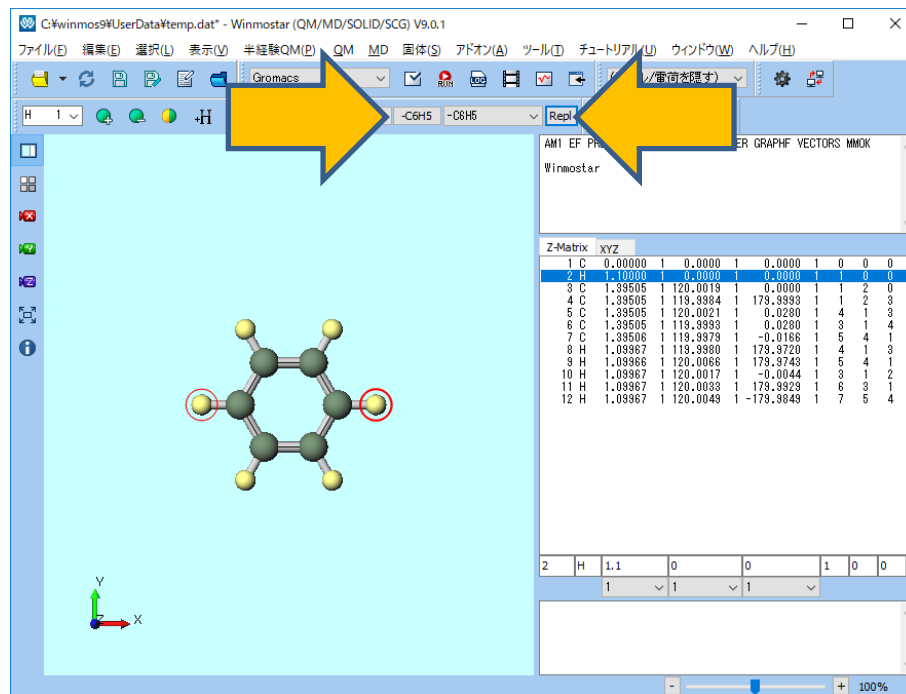
こちら

下記リンクから各パッケージがコンパイル済のCygwinのインストーラをダウンロードし、実行します。  
[cygwin\\_wm\\_v8\\_20180727.exe\(687MB\)](#)  
これにより、GROMACS, Amber(amber)の実行に必要な環境 (Cygwin,Acypypeなど) が全て整います。

# 1. 成分1の液相のMD計算(モデリング)

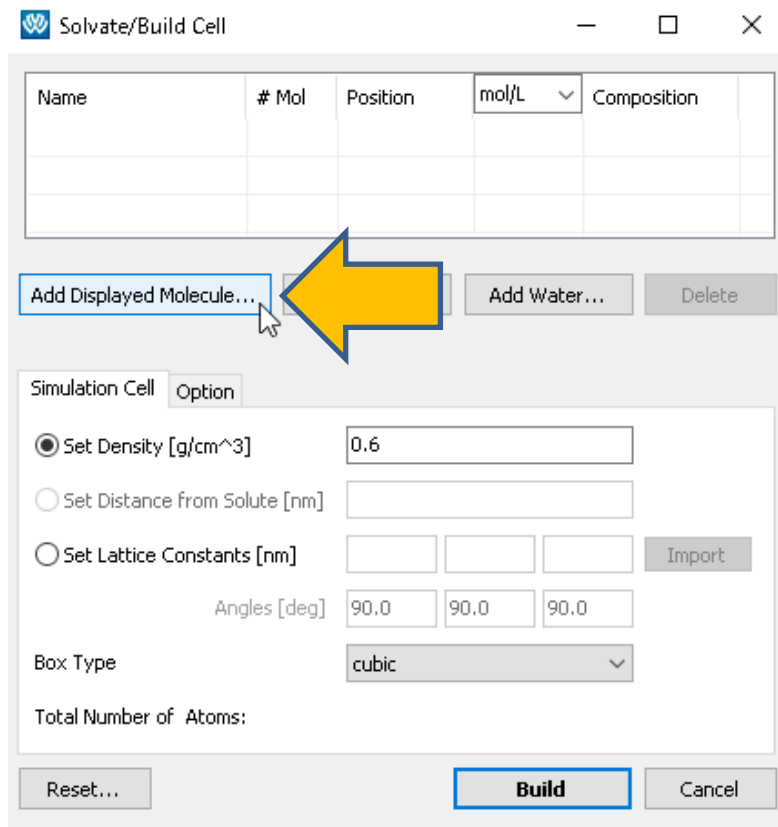
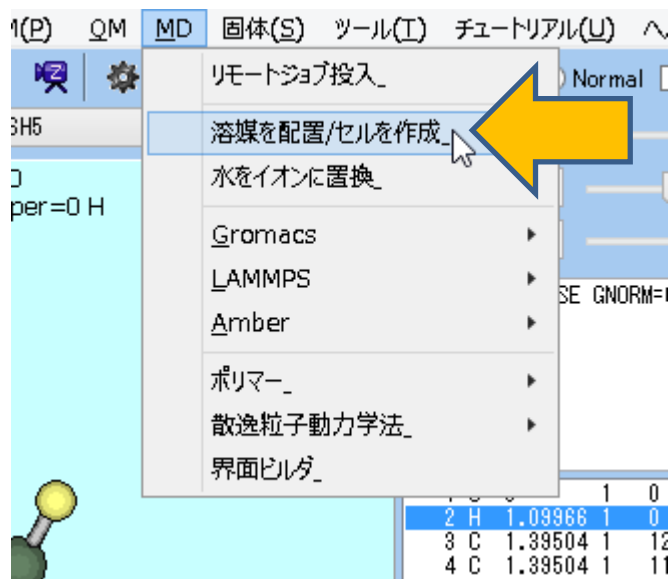
ここでは成分1をベンゼンとする。

1. -C6H5をクリックする。
2. Replをクリックすることでベンゼンが作成される。
3.  (名前を付けて保存)をクリックする。
4. ファイル名はbenzene.mol2として保存する。



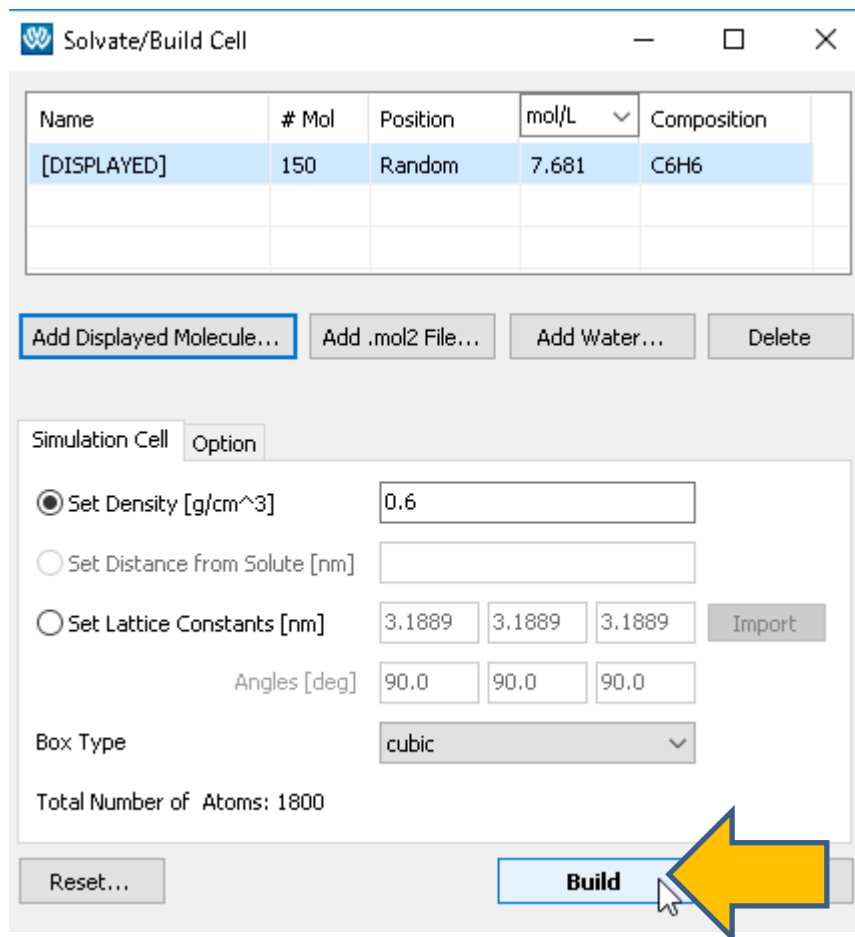
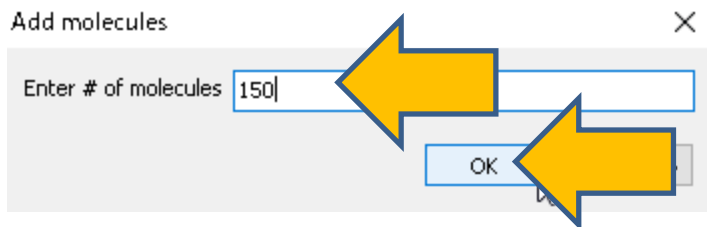
# 1. 成分1の液相のMD計算(系の作成)

1.  (溶媒を配置/セルを作成)をクリックする。
2. Add Displayed Moleculeをクリックする。



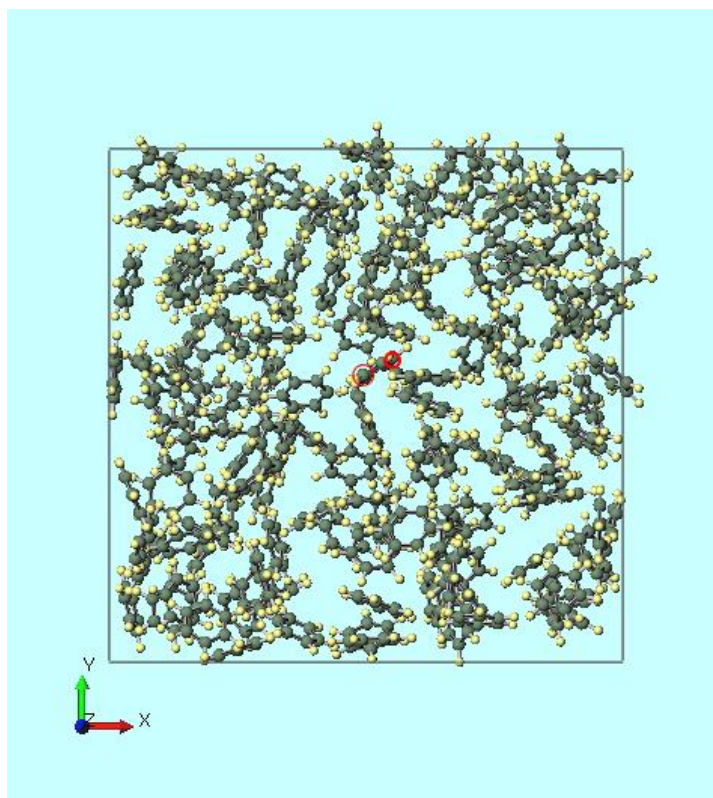
# I. 成分1の液相のMD計算(系の作成)

1. Enter # of moleculesに150と入力しOKをクリックする。
2. Buildをクリックする。



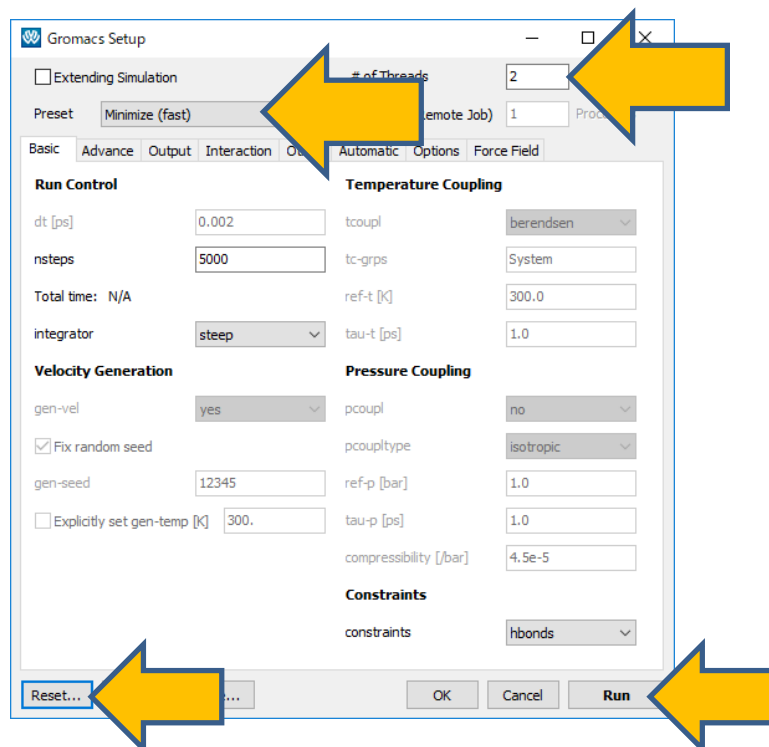
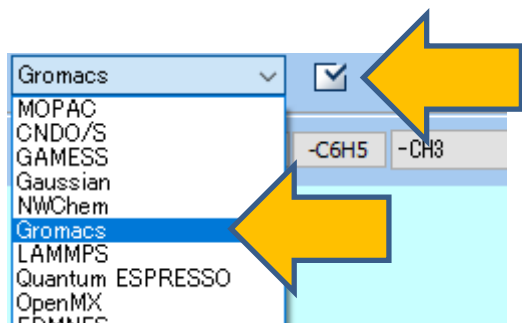
# I. 成分1の液相のMD計算(系の作成)

以下のように、メインウィンドウに作成された系が表示される。



# 1. 成分1の液相のMD計算(平衡化1)

1. ソルバを選択からGromacsを選択し  (キーワード設定) をクリックする。
2. Resetをクリックする。
3. PresetにMinimize (fast)、# of Threadsに並列数を指定する。
4. Runをクリックし、座標ファイル名とトポロジファイル名をそれぞれ c6h6\_liquid.groとc6h6\_liquid.topとして保存する。





# 1. 成分1の液相のMD計算(平衡化2)

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)を指定する。
3. nstepsに25000、constraintsにall-bondsを指定する。
4. Runをクリックする。「継続ジョブを開始しますか?」と聞かれたらはいをクリックする。

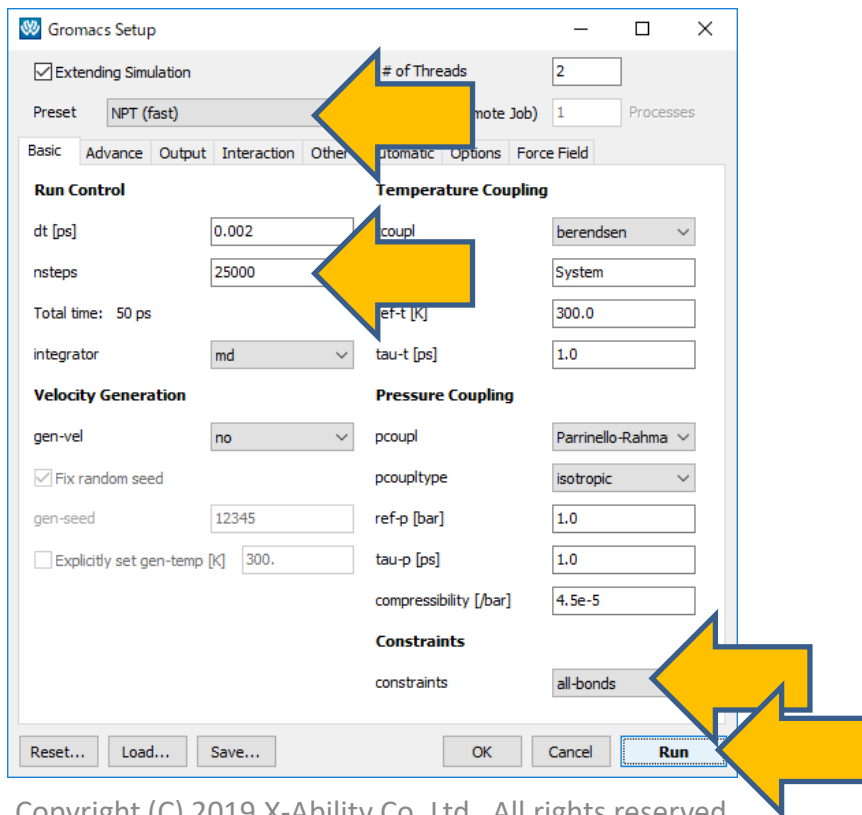
The image shows the Gromacs Setup dialog box with the following settings:

- Extending Simulation
- Preset: NVT (fast)
- # of Threads: 2
- Remote Job: 1
- Processes: 1
- Basic tab selected
- Run Control:
  - dt [ps]: 0.002
  - nsteps: 25000
  - Total time: 50 ps
  - integrator: md
- Velocity Generation:
  - gen-vel: yes
  - Fix random seed
  - gen-seed: 12345
  - Explicitly set gen-temp [K]: 300.
- Temperature Coupling:
  - tcoupl: berendsen
  - System: System
  - ref-t [K]: 300.0
  - tau-t [ps]: 1.0
- Pressure Coupling:
  - pcoupl: no
  - pcoupltype: isotropic
  - ref-p [bar]: 1.0
  - tau-p [ps]: 1.0
  - compressibility [bar]: 4.5e-5
- Constraints:
  - constraints: all-bonds
- Buttons: Reset..., Load..., Save..., OK, Cancel, Run


The confirmation dialog asks: 継続ジョブを開始しますか? (Start continuing job?) with buttons: はい (Yes) and キャンセル (Cancel).

# 1. 成分1の液相のMD計算(平衡化3)


1. 計算終了後、 (キーワード設定) をクリックする。
2. PresetにNPT (fast)を指定する。
3. nstepsに25000、constraintsにall-bondsを指定する。
4. Runをクリックし、先ほどと同様に計算を開始する。

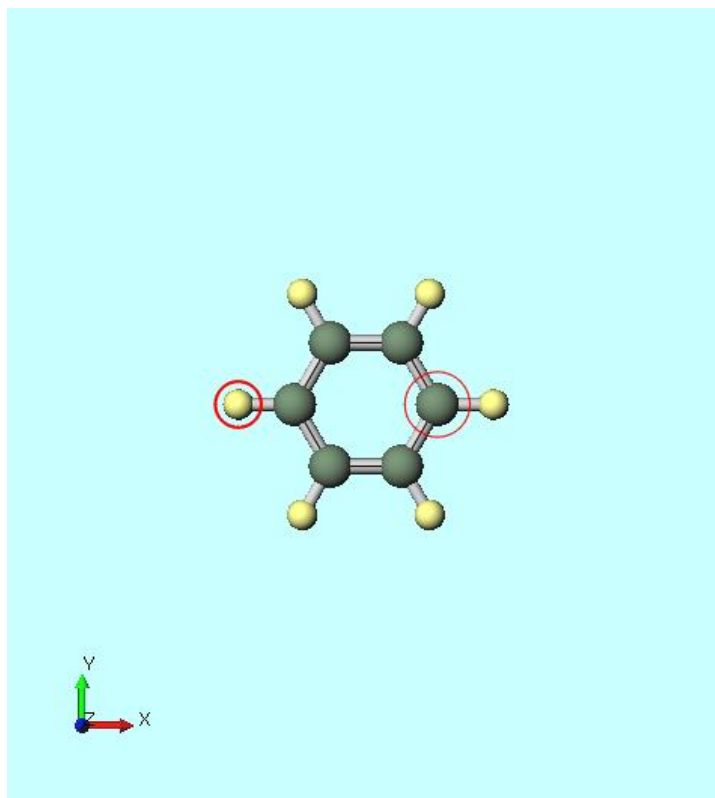


## I. 成分1の液相のMD計算(本計算)

計算終了後、キーワードは変更せず、 (Gromacs実行)をクリックし、本計算を実行する。

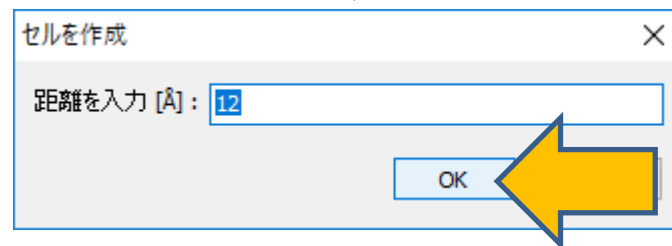
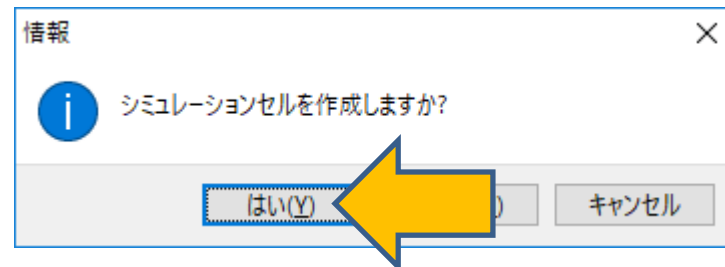
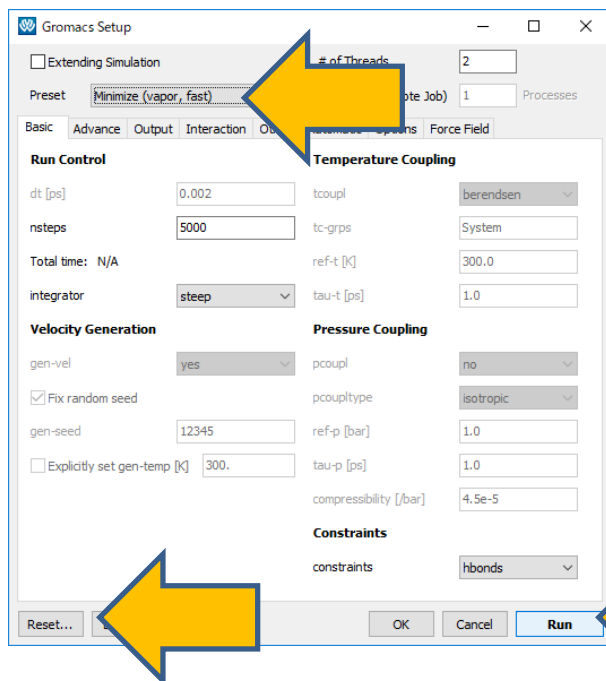
## II. 成分1の気相のMD計算(系の作成)

1.  (ファイルを開く) をクリックする。
2. 先ほど保存したbenzene.mol2を開く。



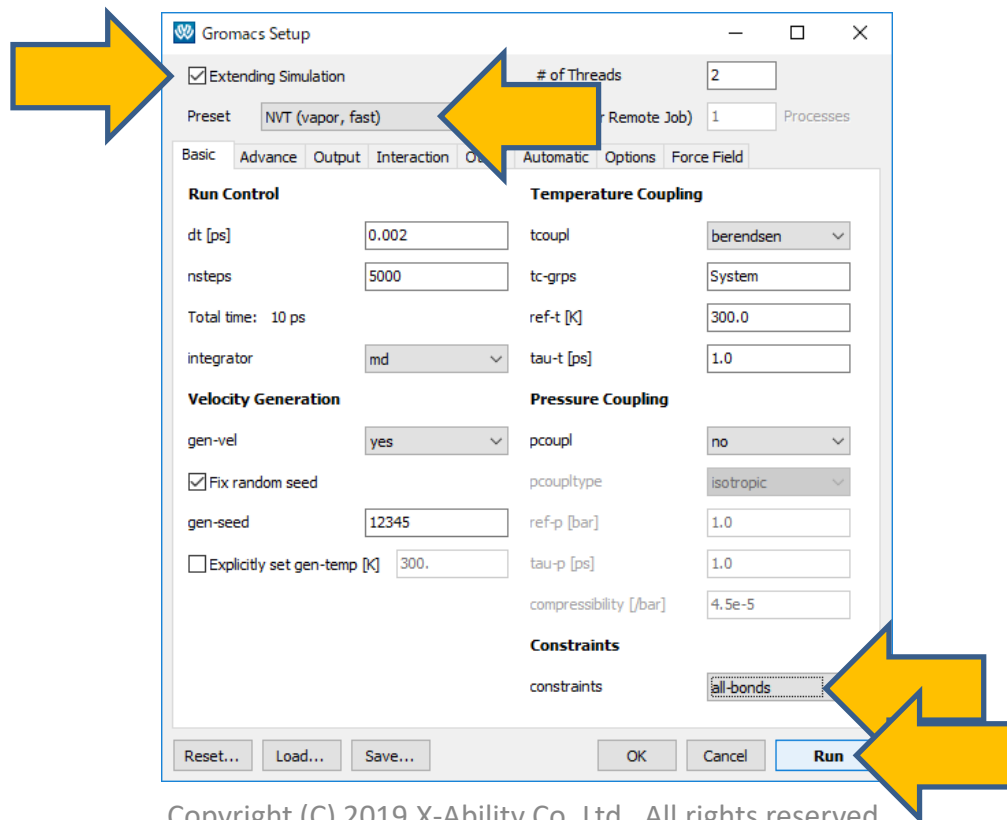
## II. 成分1の気相のMD計算(平衡化1)

1.  (キーワード設定)をクリックする。
2. Resetをクリックし、PresetにMinimize (vapor, fast)を指定する。
3. Runをクリックする。
4. シミュレーションセルを作成しますか?と聞かれるのはいををクリックする。
5. 距離を入力は12のままOKをクリックする。
6. ファイル名を6h6\_vapor.gro、c6h6\_vapor.topとして保存する。



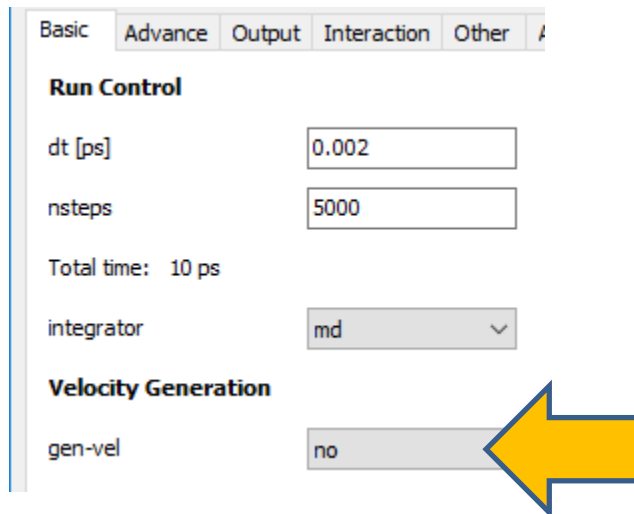
## II. 成分1の気相のMD計算(平衡化2)

1.  (キーワード設定)をクリックする。
2. Extending Simulationにチェックを入れる。
3. PresetにNVT (vapor, fast)を指定し、constraintsにall-bondsを指定する。
4. Runをクリックする。



## II. 成分1の気相のMD計算(本計算)

1.  (キーワード設定)をクリックする。
2. Basicタブにてgen-velをnoに設定する。
3. Runをクリックする。




The screenshot shows a software interface with several tabs: Basic, Advance, Output, Interaction, and Other. The 'Basic' tab is active. Under the 'Run Control' section, there are input fields for 'dt [ps]' (0.002) and 'nsteps' (5000), and a 'Total time: 10 ps' label. The 'integrator' dropdown is set to 'md'. Under the 'Velocity Generation' section, the 'gen-vel' dropdown is set to 'no', and a large yellow arrow points to this dropdown.

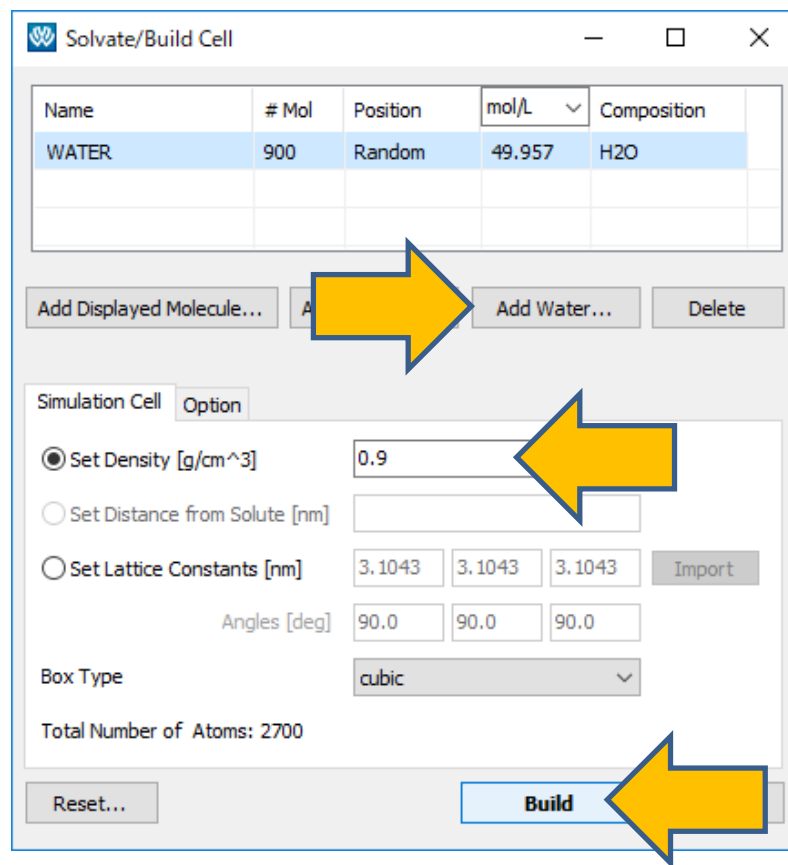
### III. 成分2のMD計算

- 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。
- $\chi$ ・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)

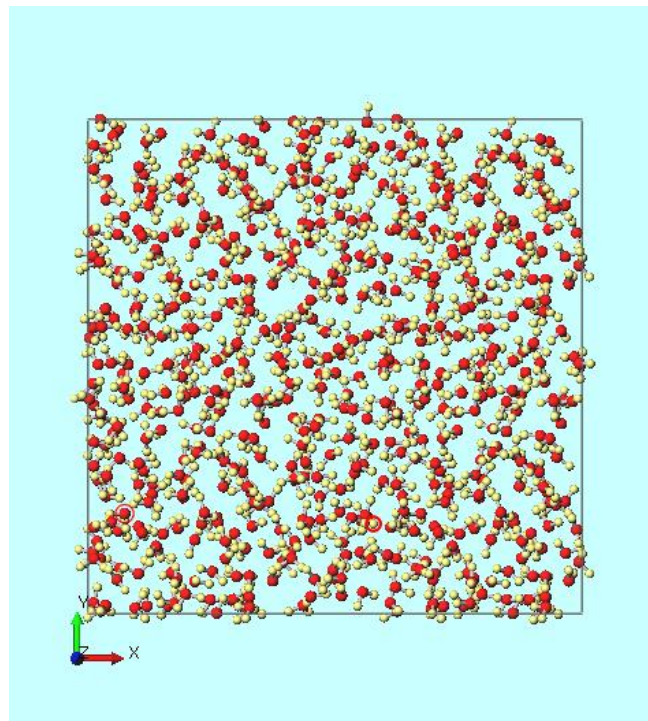
1.  (溶媒を配置/系を作成)をクリックする。
2. Add Waterをクリックし、900個の水分子を追加する。
3. Set Densityの値を0.9に変更し、Buildをクリックする。




### III. 成分2の液相のMD計算

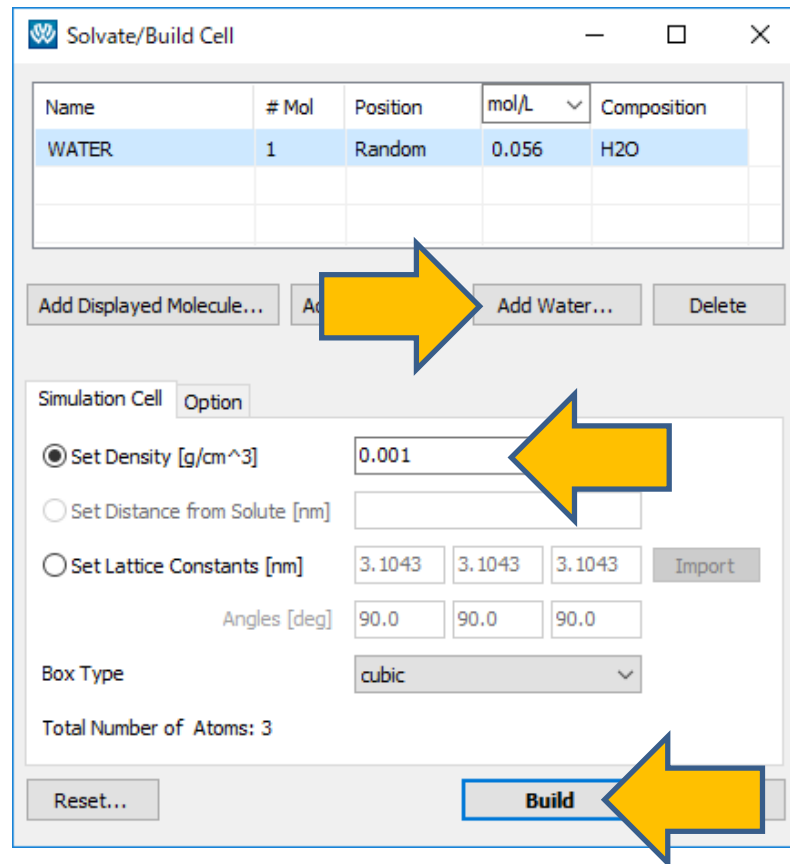
作成された系は下図のようになる。

1. 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。
2. 保存する座標ファイル名とトポロジファイル名はそれぞれ h2o\_liquid.gro、 h2o\_liquid.topとする。



### III. 成分2の気相のMD計算(系の作成)

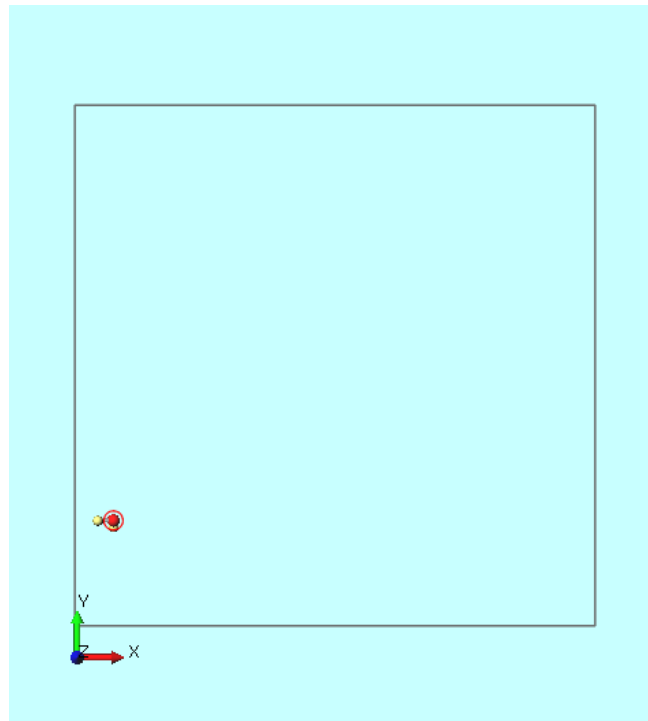
1.  (溶媒を配置/系を作成)をクリックする。
2. Add waterをクリックし、1個の水分子を追加する。
3. Set Densityの値を0.001に変更し、Buildをクリックする。



### III. 成分2の気相のMD計算

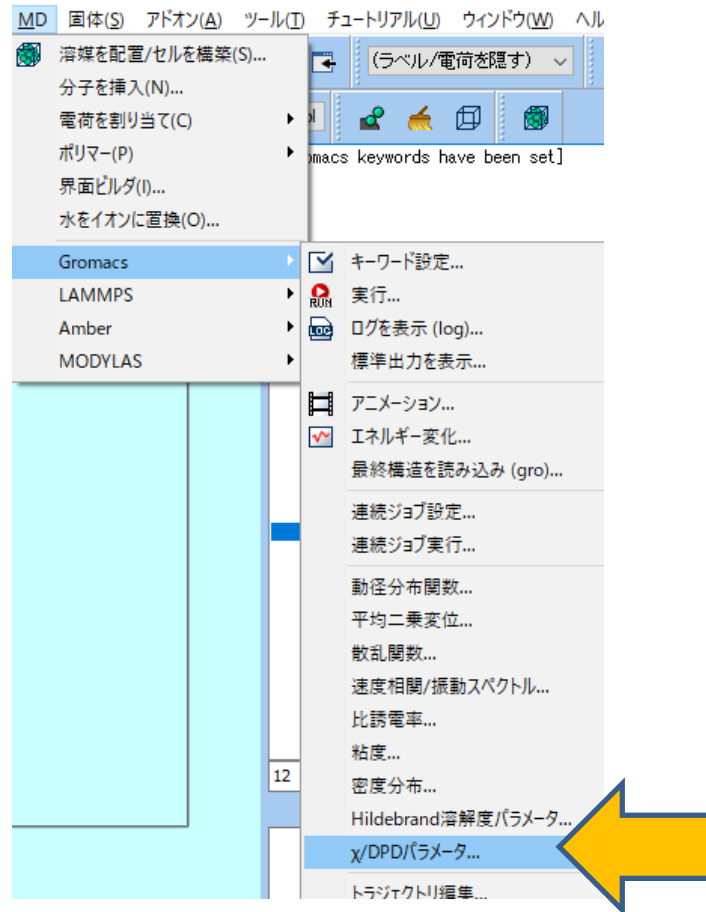
作成された系は下図のようになる。

1. 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。
2. 座標ファイル名はh2o\_vapor.gro、トポロジファイル名はh2o\_vapor.topとする。



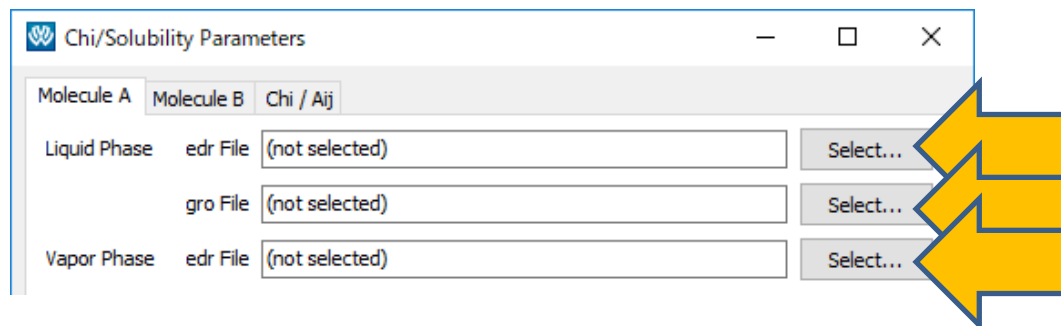
## IV. 結果解析

 (結果解析) |  $\chi$  /DPDパラメータをクリックする。



## IV. 結果解析

1. Molecule Aタブをクリックする。
2. Liquid Phaseのedr FileのSelectをクリックし、c6h6\_liquid\_gmx\_tmp以下のgmx\_tmp\_mdrun.edrを選択する。
3. Liquid Phaseのgro FileのSelectをクリックし、c6h6\_liquid\_gmx\_tmp以下のgmx\_tmp\_mdrun.groを選択する。
4. Vapor Phaseのedr FileのSelectをクリックし、c6h6\_vapor\_gmx\_tmp以下のgmx\_tmp\_mdrun.edrを選択する。



## IV. 結果解析

Molecule A (ここではベンゼン) のHildebrand溶解度パラメータ  $\delta$  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 ase%UserData%c6h6\_liquid\_gmx\_tmp#gmx\_tmp\_mdrun.edr Select...

gro File ase%UserData%c6h6\_liquid\_gmx\_tmp#gmx\_tmp\_mdrun.gro Select...

Vapor Phase edr File ise%UserData%c6h6\_vapor\_gmx\_tmp#gmx\_tmp\_mdrun.edr Select...

Properties

Molar Volume	Vma	[m <sup>3</sup> /mol]	9.42451e-05
Temperature	T	[K]	301.933
Isothermal Compressibility	Kt	[J/m <sup>3</sup> ]	2.08081e-09
Dimensionless Compressibility	K=Vma/(R*T*Kt)	[-]	18.04188
DPD Parameter	Aii=(K-1)/(0.2*rho)	[-]	16.87315
Liquid Potential Energy	Ei	[kJ/mol]	23.8875
Vapor Potential Energy	Ev	[kJ/mol]	48.6022
Cohesive Energy	dE=Ev-Ei	[kJ/mol]	24.71470
Solubility Parameter	da=sqrt(dE/Vma)	[(J/cm <sup>3</sup> ) <sup>1/2</sup> ]	16.19378

Reset Excel Close

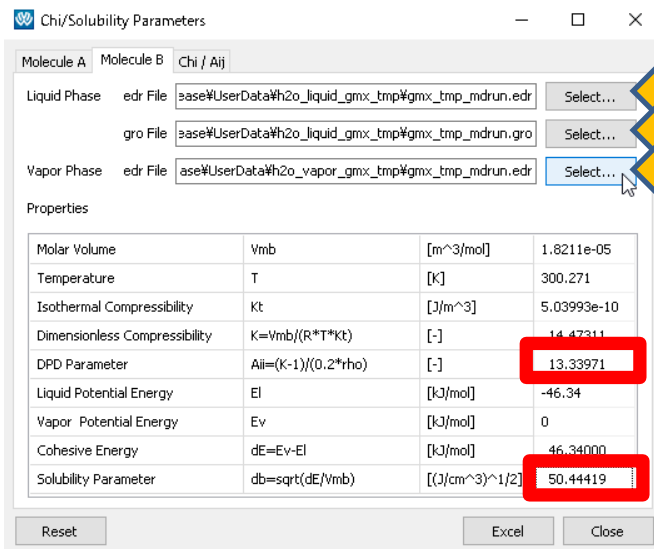
同種粒子間  
DPDパラメータ

溶解度パラメータ

## IV. 結果解析

$\chi$  およびDPDパラメータ $A_{ij}$ を求める場合

1. Molecule Bタブをクリックする。
2. Liquid Phaseのedr FileのSelectをクリックし、h2o\_liquid\_gmx\_tmp以下のgmx\_tmp\_mdrun.edrを選択する。
3. Liquid Phaseのgro FileのSelectをクリックし、h2o\_liquid\_gmx\_tmp以下のgmx\_tmp\_mdrun.groを選択する。
4. Vapor Phaseのedr FileのSelectをクリックし、h2o\_vapor\_gmx\_tmp以下のgmx\_tmp\_mdrun.edrを選択する。



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	Vmb	[m <sup>3</sup> /mol]	1.8211e-05
Temperature	T	[K]	300.271
Isothermal Compressibility	Kt	[J/m <sup>3</sup> ]	5.03993e-10
Dimensionless Compressibility	K=Vmb/(R*T*Kt)	[-]	14.47311
DPD Parameter	Aii=(k-1)/(0.2*rho)	[-]	13.33971
Liquid Potential Energy	Ei	[kJ/mol]	-46.34
Vapor Potential Energy	Ev	[kJ/mol]	0
Cohesive Energy	dE=Ev-Ei	[kJ/mol]	46.34000
Solubility Parameter	db=sqrt(dE/Vmb)	[(J/cm <sup>3</sup> ) <sup>1/2</sup> ]	50.44419

Reset Excel Close

同種粒子間  
DPDパラメータ

溶解度パラメータ



## IV. 結果解析

Chi/Aijタブに、 $\chi$  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 <sup>3</sup> /mol]	1.8211E-005
Chi Parameter	Chi=Vb*(da-db) <sup>2</sup> /RT	[-]	8.53331
DPD Parameter	Aij-Aii	[-]	12.37330

Citation

R. D. Groot and P. B. Warren, J. Chem. Phys., 107 (11), 1997.

Reset Excel Close

$\chi$ パラメータ

異種粒子間  
DPDパラメータ

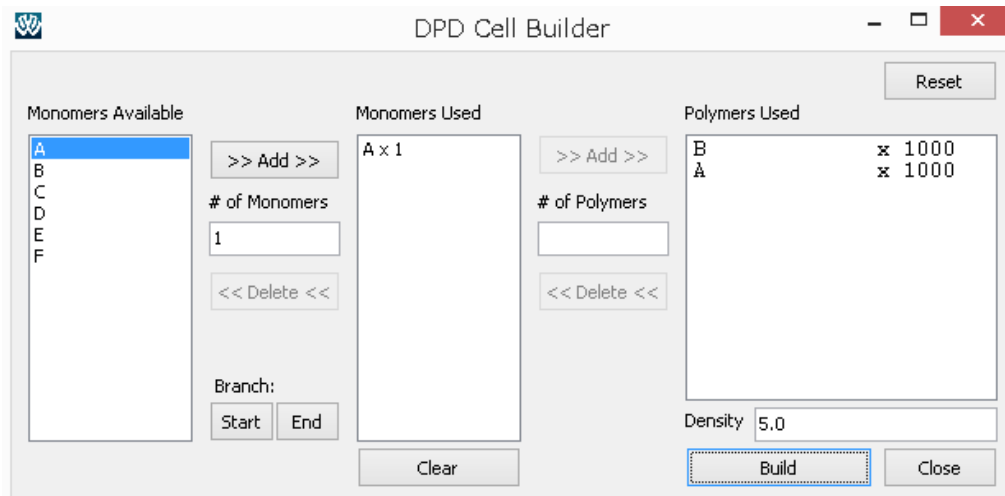
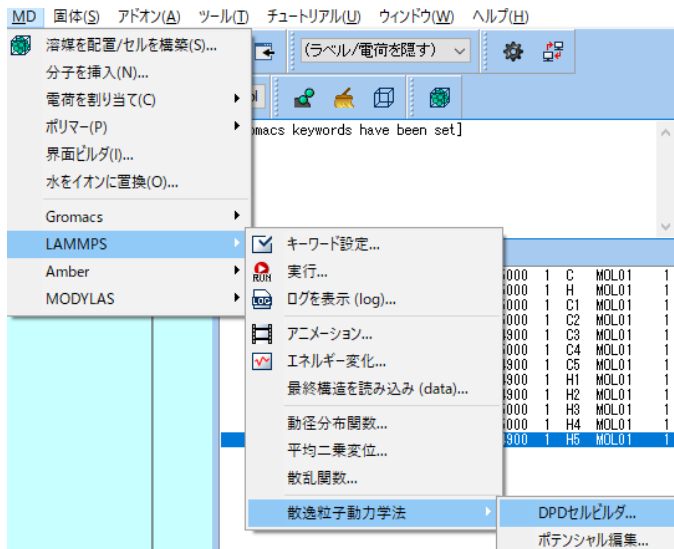
## V. DPD計算の設定

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 | LAMMPS | 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Chi/Solubility PatametersウィンドウのChi/Ajタブに表示されているDensity for DPDの値を入力する。

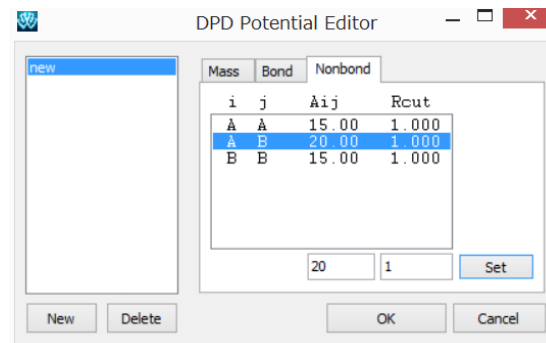
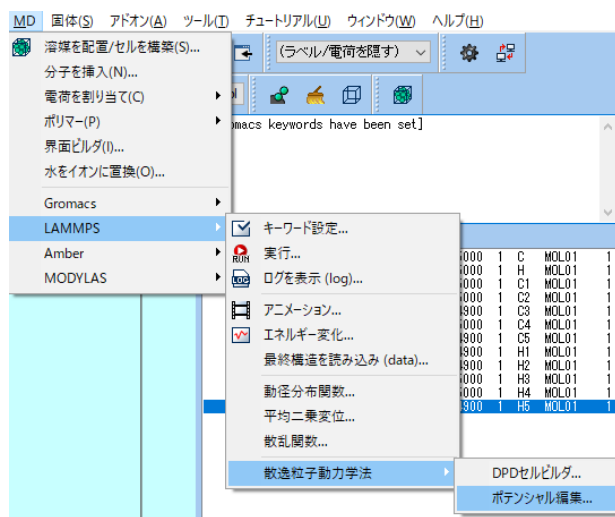


## V. DPD計算の設定

次に、MD | LAMMPS | 散逸粒子動力学 | ポテンシャル編集のNonbondタブにおいて、A-A間やB-B間の $A_{ij}$ については、MonomerA, MonomerBタブでそれぞれ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H<sub>2</sub>Oの値を採用し、小数点以下の値は四捨五入している

<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**  
クロスアビリティ

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

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