

Winmostar™ チュートリアル

Gromacs

界面張力

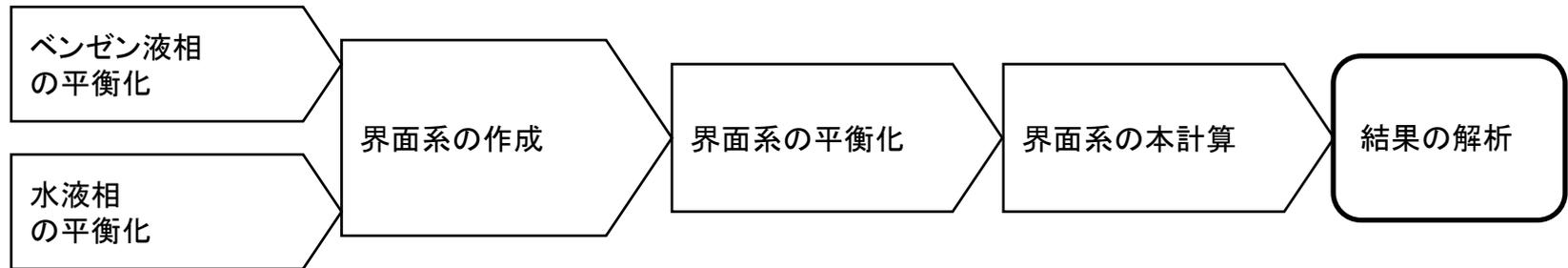
V9.0.1

株式会社クロスアビリティ

2019年4月1日

概要

- 水-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。



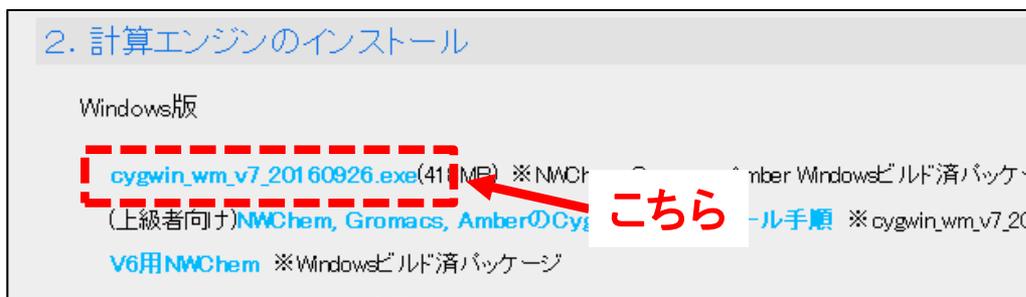
注意点:

- 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。

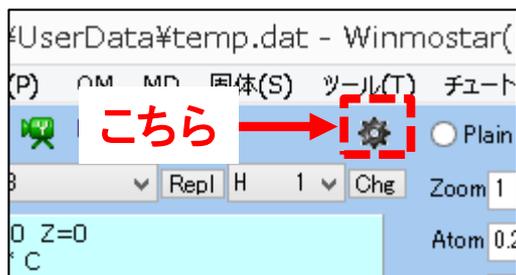
動作環境設定

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。



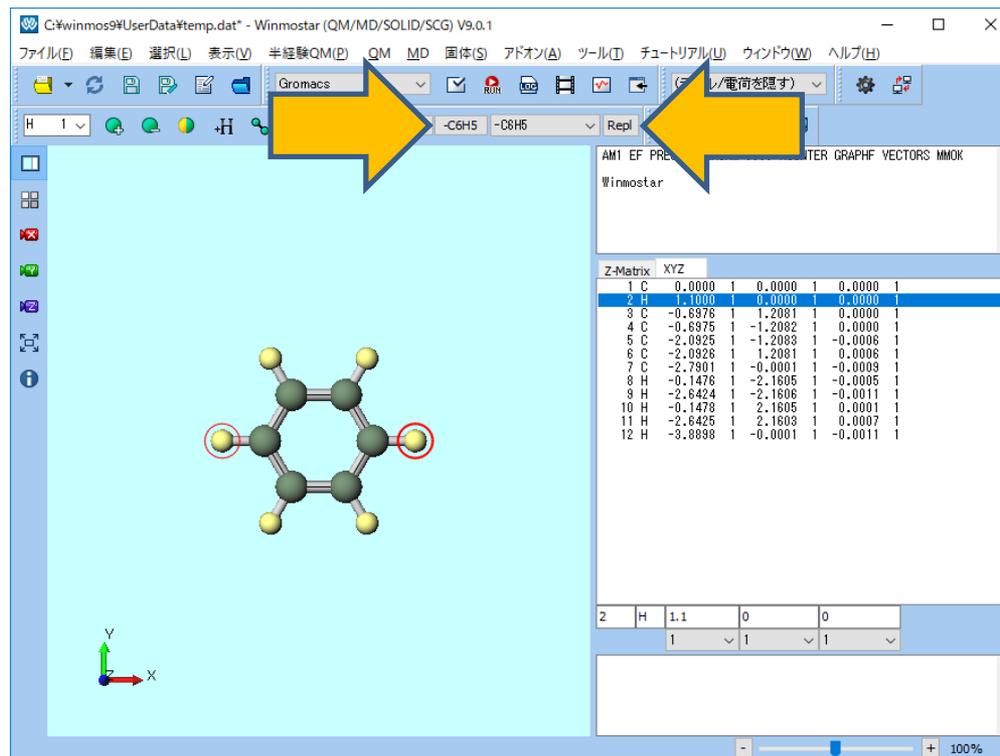
- デフォルトではC:\直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」>「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



I. 成分1の液相のMD計算(モデリング)

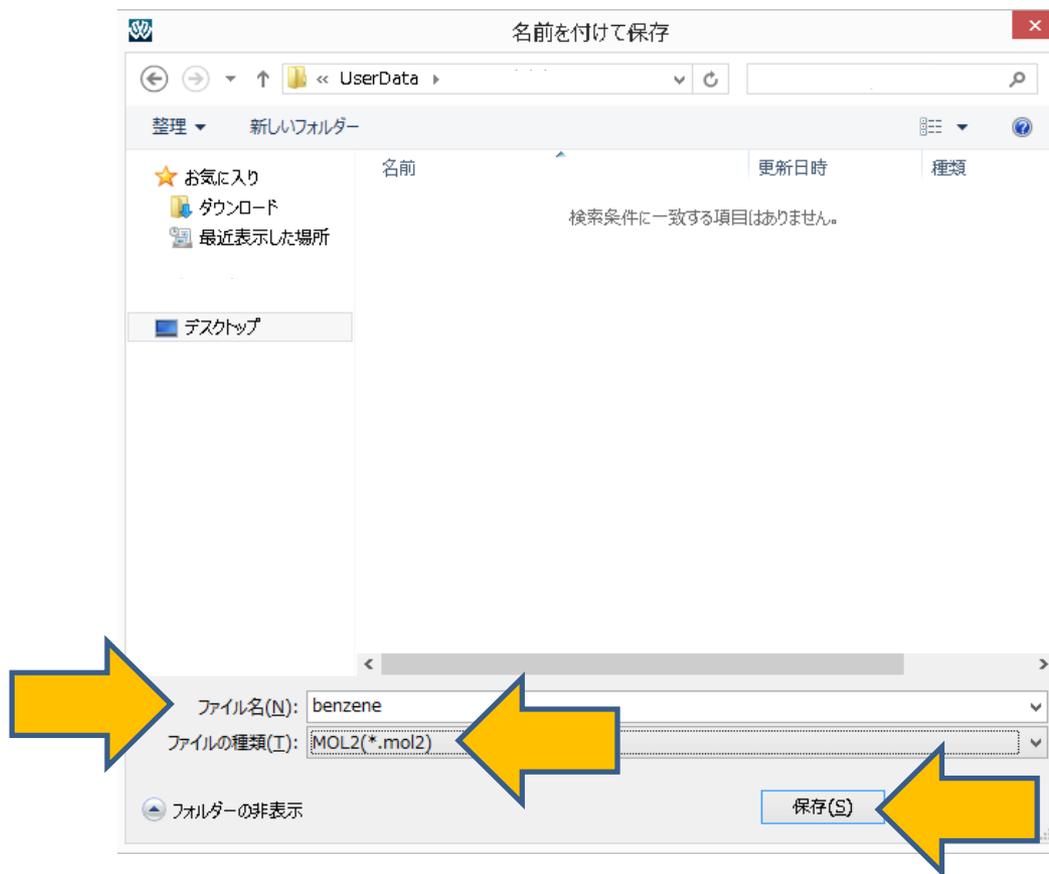
ここでは成分1をベンゼンとする。

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。



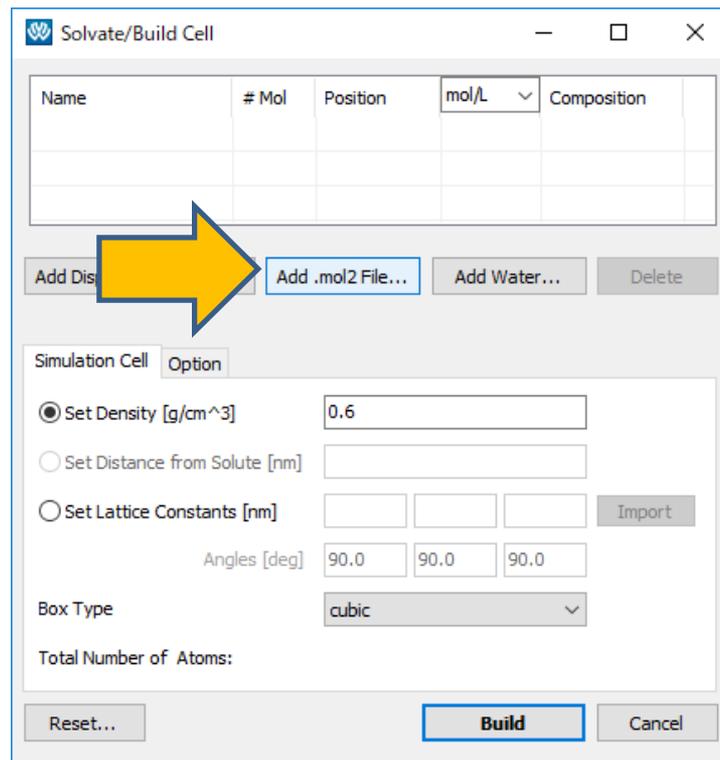
I. 成分1の液相のMD計算(モデリング)

1.  (名前を付けて保存)をクリックする。
2. **benzene.mol2**として保存する。



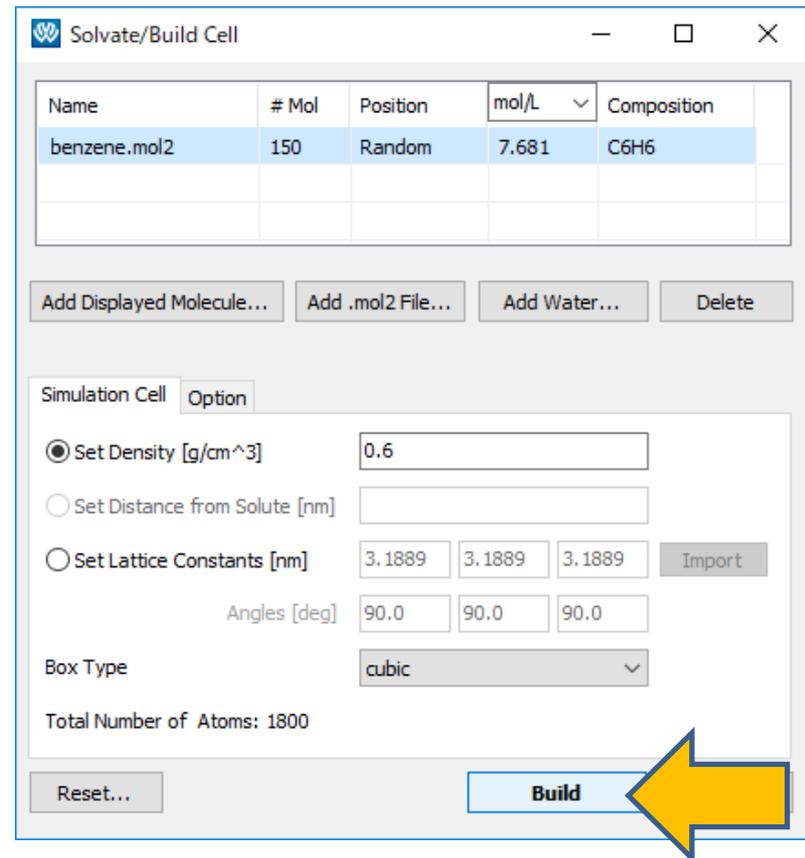
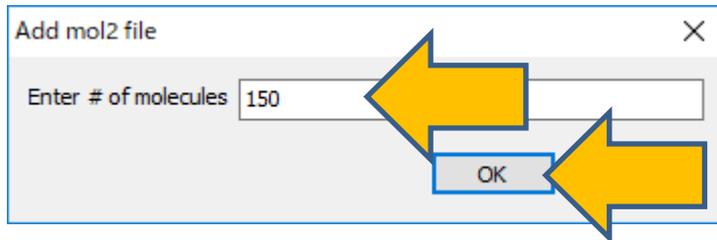
I. 成分1の液相のMD計算(系の作成)

1.  (溶媒を配置/セルを作成)をクリックする。
2. **Add mol2 File**をクリックする。
3. 先ほど保存した**benzene.mol2**を選ぶ。



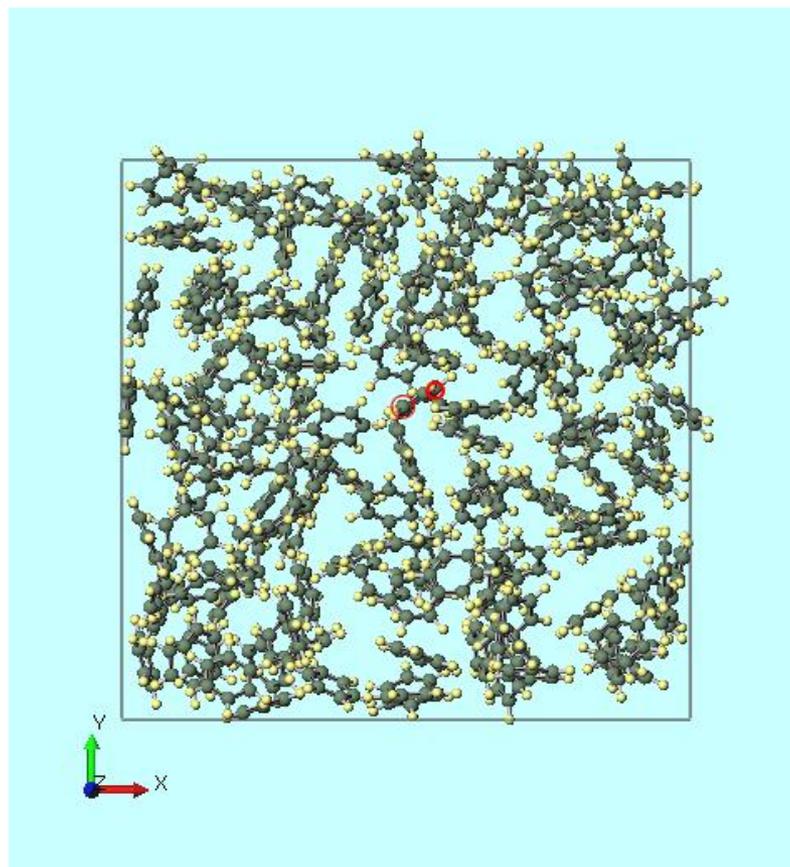
I. 成分1の液相のMD計算(系の作成)

1. mol2ファイルを選んだ後、**Enter # of molecules**に**150**と入力し**OK**する。
2. **Build**をクリックする。



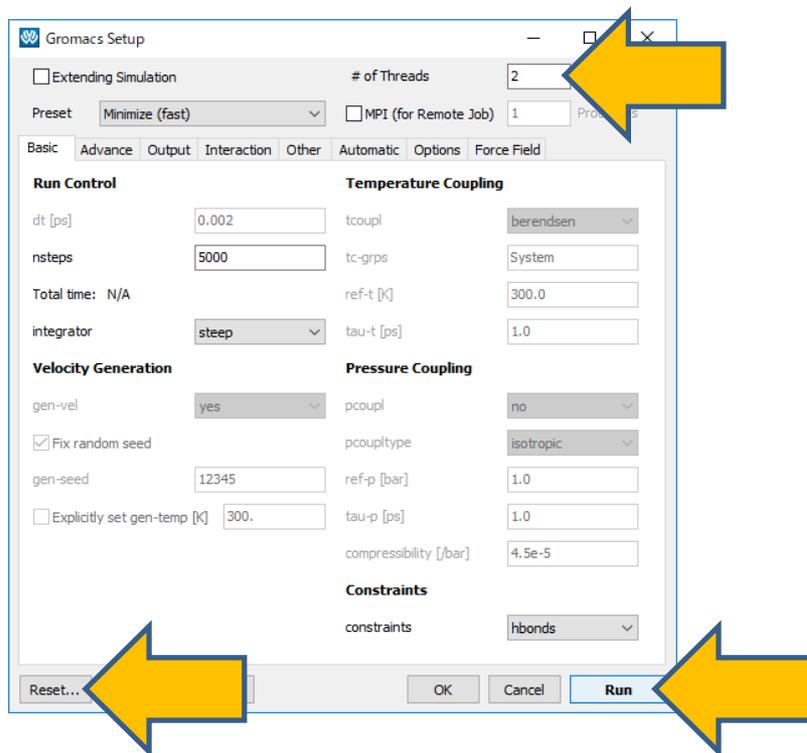
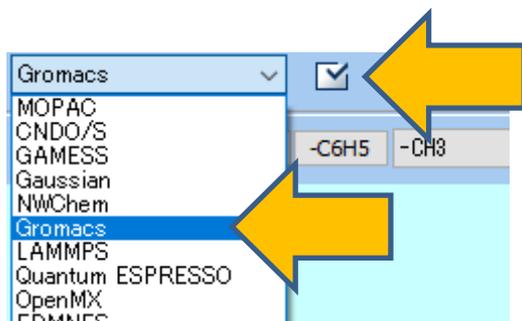
I. 成分1の液相のMD計算(系の作成)

以下のように、メイン画面に作成された系が表示される。



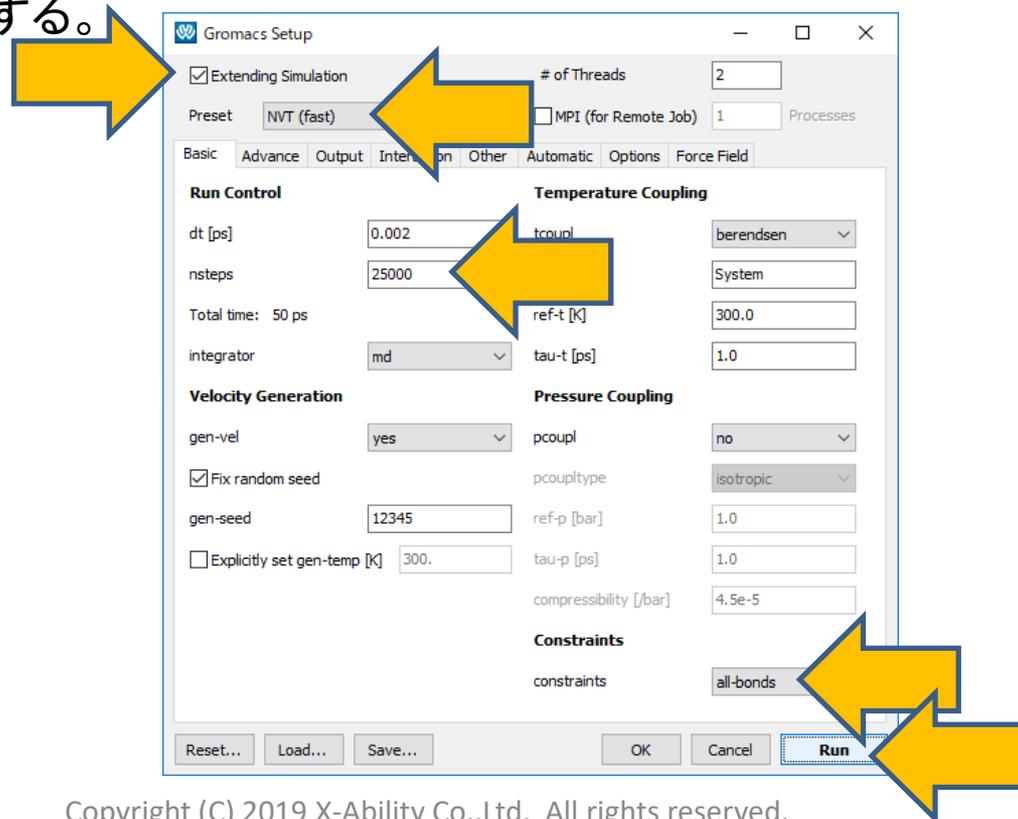
1. 成分1の液相のMD計算(平衡化1)

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**をクリックする。座標ファイル名、トポロジファイル名はそれぞれ、**benzene.gro**、**benzene.top**とする。



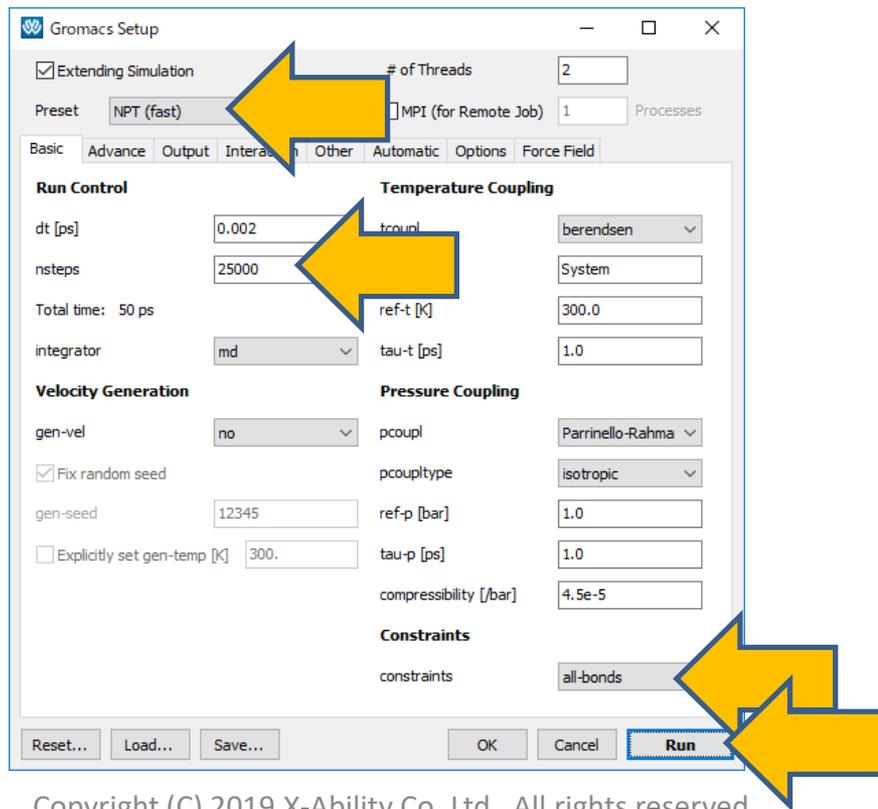
1. 成分1の液相のMD計算(平衡化2)

1. 計算終了後、 (キーワード設定)をクリックする。
2. **Extending Simulation**にチェックを入れる。
3. **Preset**に**NVT (fast)**を指定する。
4. **nsteps**に**25000**、**constraints**に**all-bonds**を指定する。
5. **Run**をクリックする。



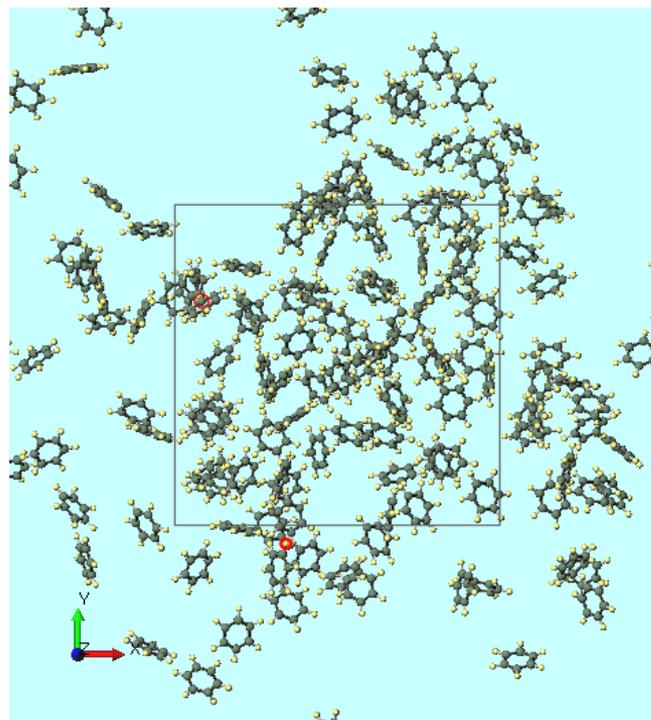
1. 成分1の液相のMD計算(平衡化3)

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**をクリックする。



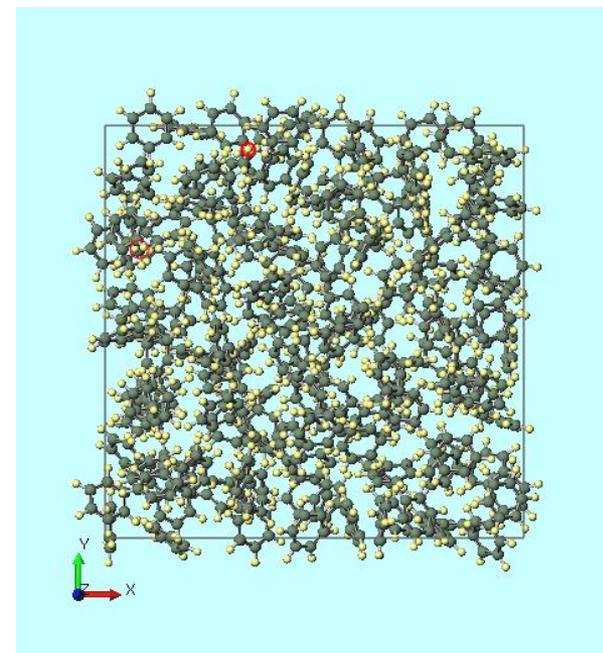
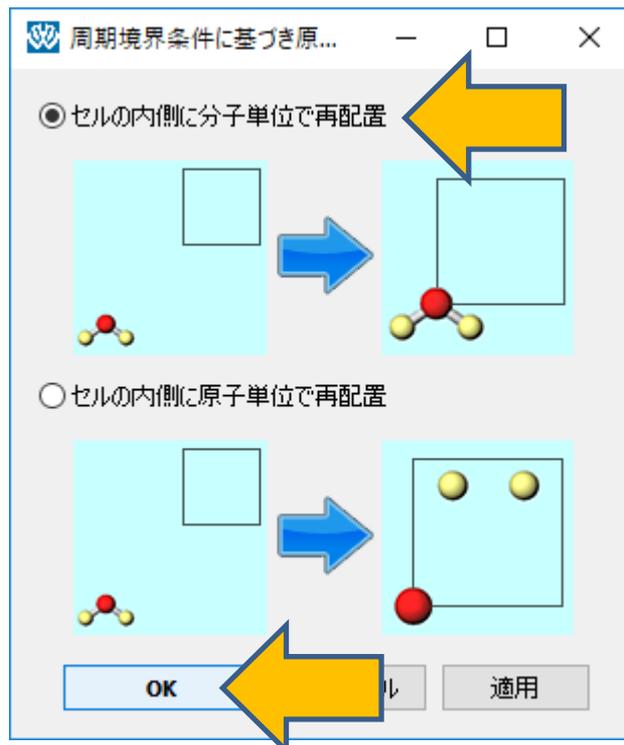
I. 成分1の液相のMD計算(座標の編集)

1. **MD | Gromacs | 最終構造を読み込み(gro)クリックする。**
2. デフォルトで選択されるファイルを選択する。
3. **表示 | 周期境界折り返し表示 | なしを選択する。**



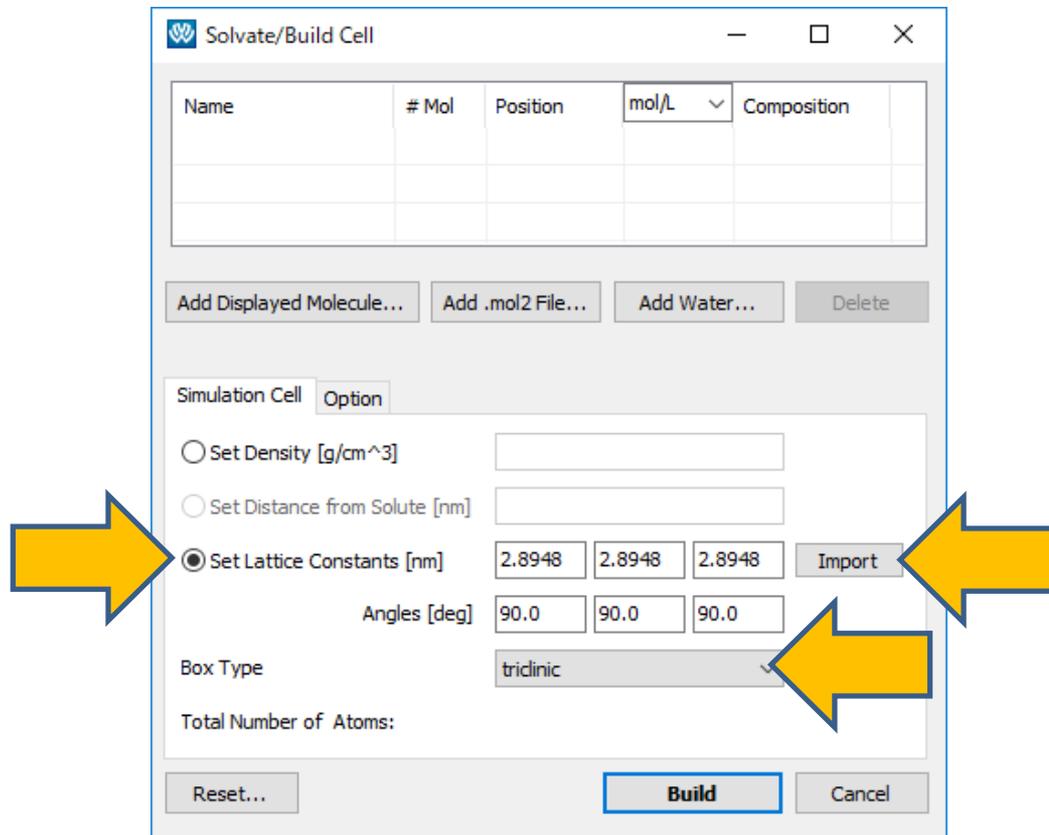
I. 成分1の液相のMD計算(座標の編集)

1. **編集 | 周期境界条件に基づき原子を再配置**をクリックする。
2. **セルの内側に分子単位で再配置**をクリックする。
3.  (名前を付けて保存) をクリックし、**benzene_eq.mol2**として保存する。



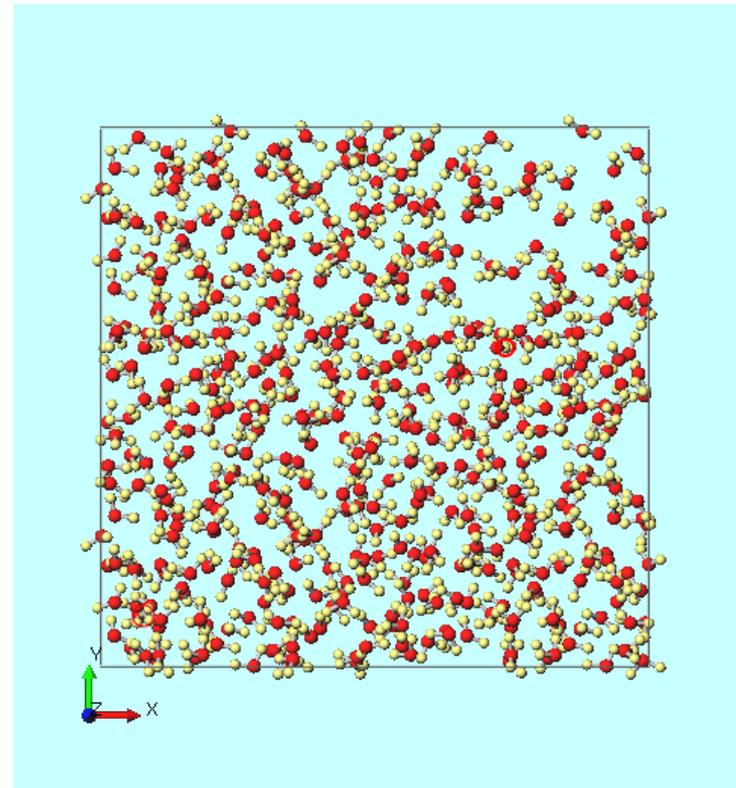
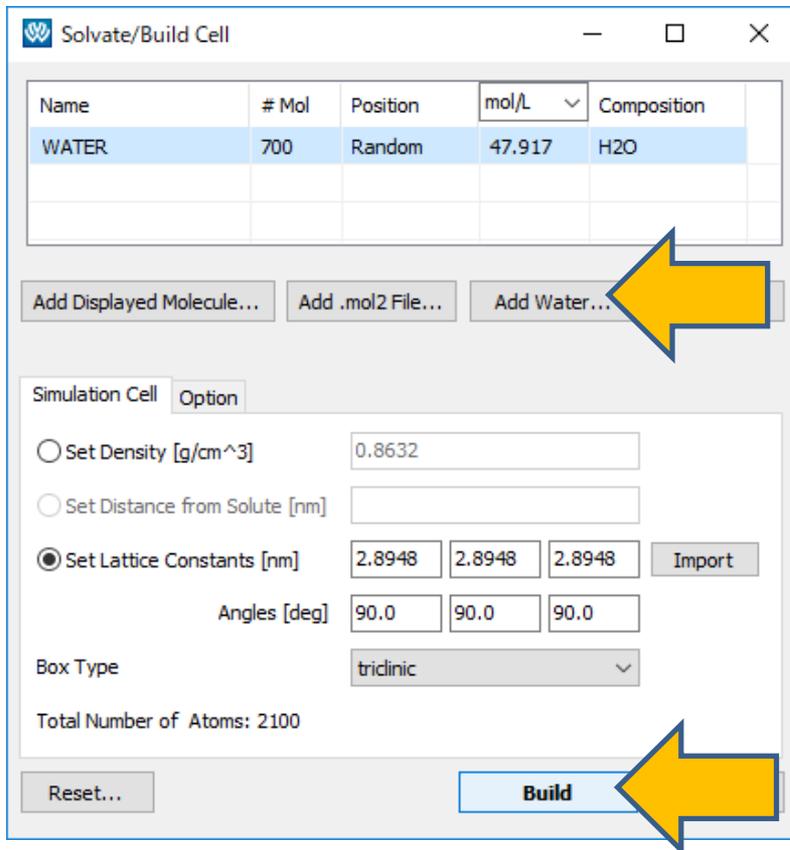
II. 成分2の液相のMD計算(系の作成)

1.  (溶媒を配置/セルを作成) をクリックする。
2. **Set Box Size**を選択し、**Import**をクリックする。
3. **Box Type**に**Triclinic**を選択する。



II. 成分2の液相のMD計算(系の作成)

1. **Add Water**をクリックし**700**と入力し**OK**をクリックする。
2. **Build**をクリックする。

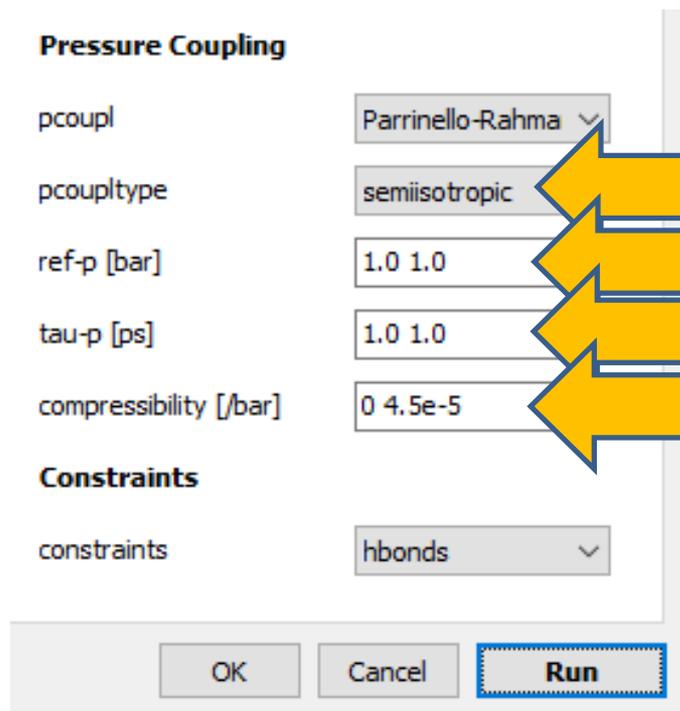
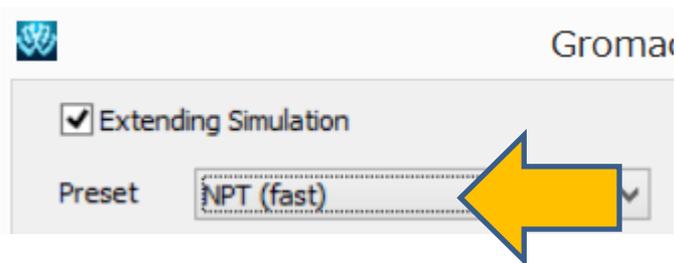


II. 成分2の液相のMD計算(平衡化1&2)

1. (キーワード設定)をクリックする。
 2. **Extending Simulation**のチェックを外す。
 3. **Preset**に**Minimize (fast)**を指定する。
 4. **Run**をクリックし、ファイル名は**water.gro**および**water.top**とする。
 5. 警告ウィンドウではいをクリックする。
-
1. 計算終了後、 (キーワード設定)をクリックする。
 2. **Extending Simulation**をチェックし、**Preset**に**NVT (fast)**を指定する。
 3. **Run**をクリックする。

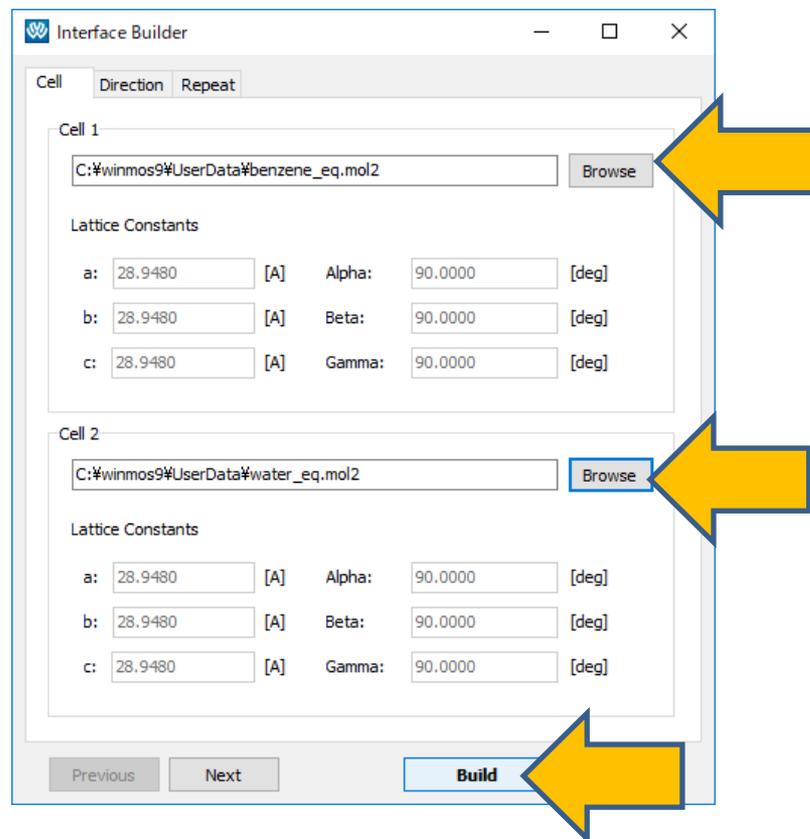
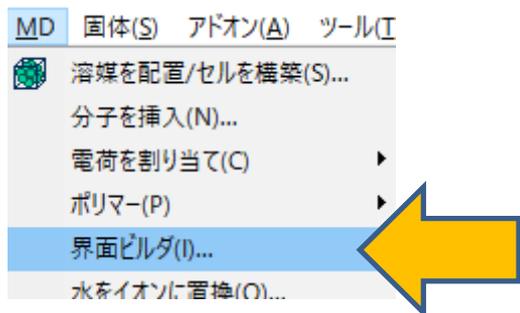
II. 成分2の液相のMD計算(平衡化3)

1. (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. 以下の様に設定する。
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)
4. **Run**をクリックする。



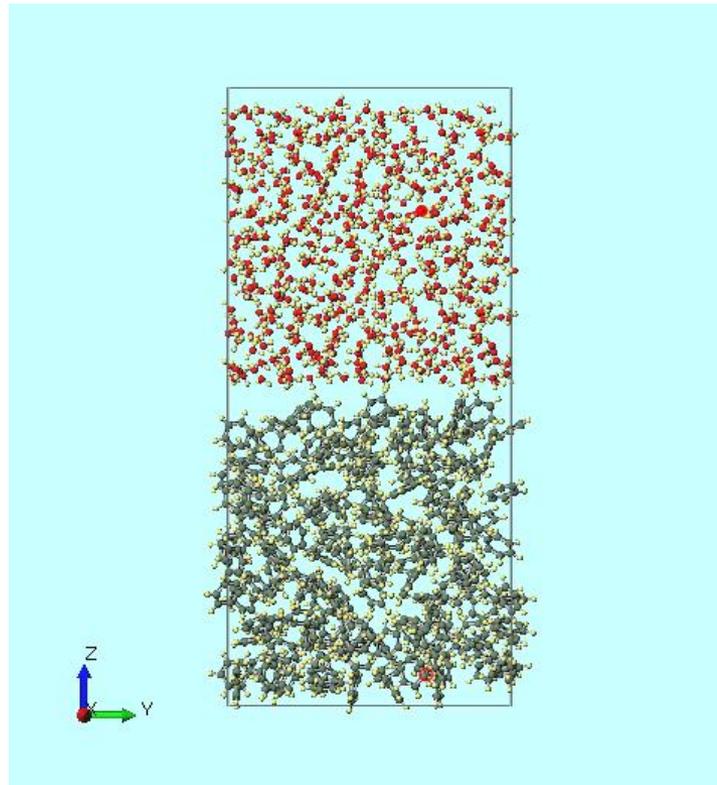
III. 界面系のMD計算(系の作成)

1. **MD | 界面ビルダ**をクリックする。
2. **Cell 1**で**Browse**をクリックし、**benzene_eq.mol2**を選択する。
3. **Cell 2**で**Browse**をクリックし、**water_eq.mol2**を選択する。
4. **Build**をクリックする。



III. 界面系のMD計算(系の作成)

1. ファイル名は**interface.mol2**として保存する。
2. 保存後、界面ビルダを**Close**する。
3. 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)

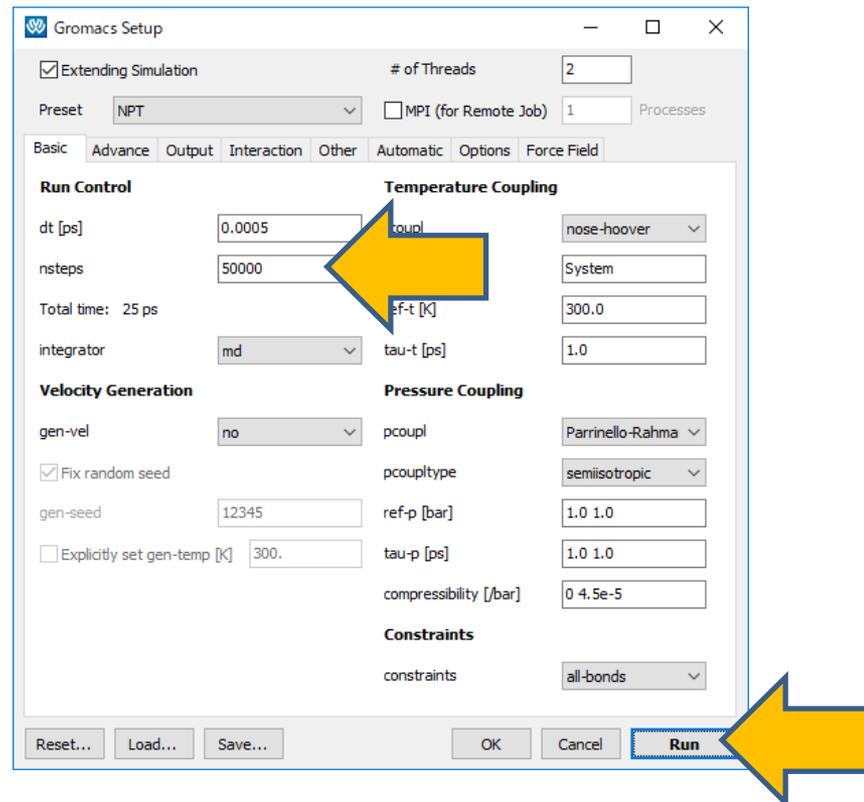
1. (キーワード設定)をクリックする。
2. **Extending Simulation**のチェックを外す。**Preset**に**Minimize (fast)**を指定する。
3. **Run**をクリックする。
4. ファイル名はそれぞれ**interface.gro**および**interface.top**とする。

1. 計算終了後、 (キーワード設定)をクリックする。
2. **Extending Simulation**をチェックする。
3. **Preset**に**NVT (fast)**を指定し、**constraints**に**all-bonds**を指定する。
4. **Run**をクリックする。

1. 計算終了後、 (キーワード設定)をクリックする。
2. **Preset**に**NPT**を指定し、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**
3. **Run**をクリックする。

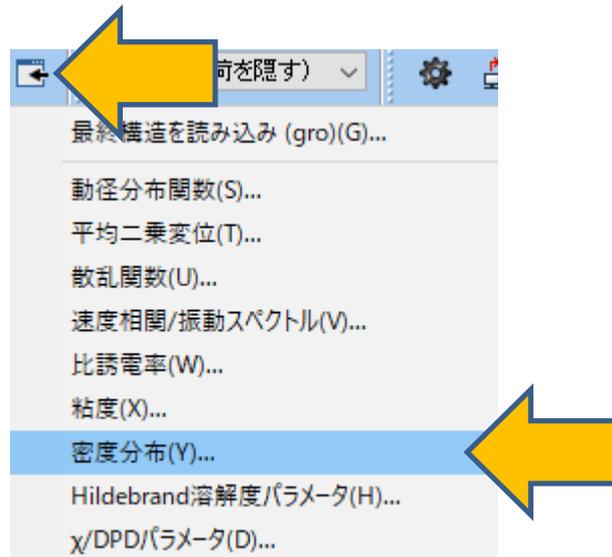
III. 界面系のMD計算(本計算)

1. 計算終了後、 (キーワード設定)をクリックする。
2. **Basic**タブにて**nsteps**を**50000**と指定する。
3. **Run**をクリックする。



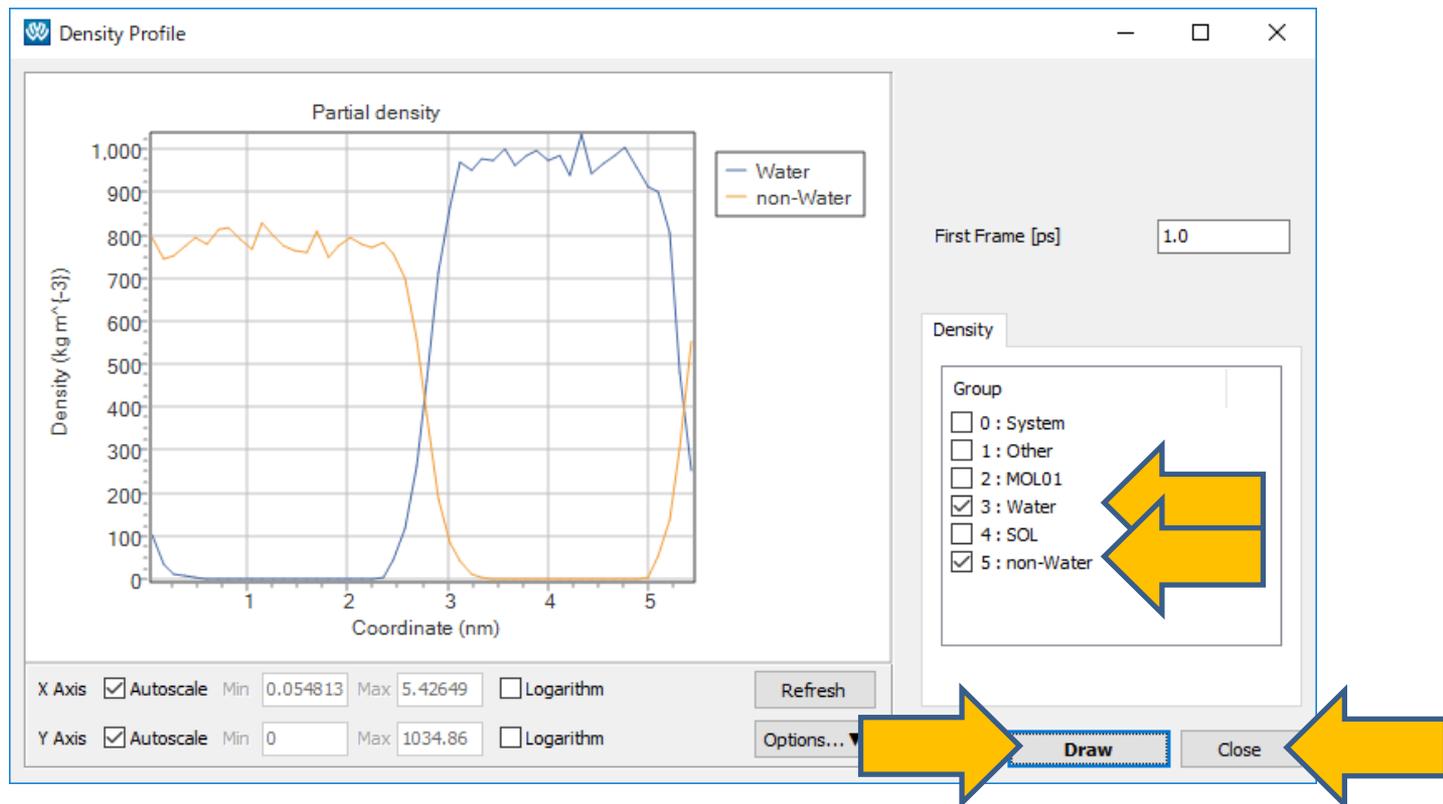
IV. 結果処理

1.  (結果解析) | 密度分布を選択する。
2. デフォルトで選択されるファイルを開く。



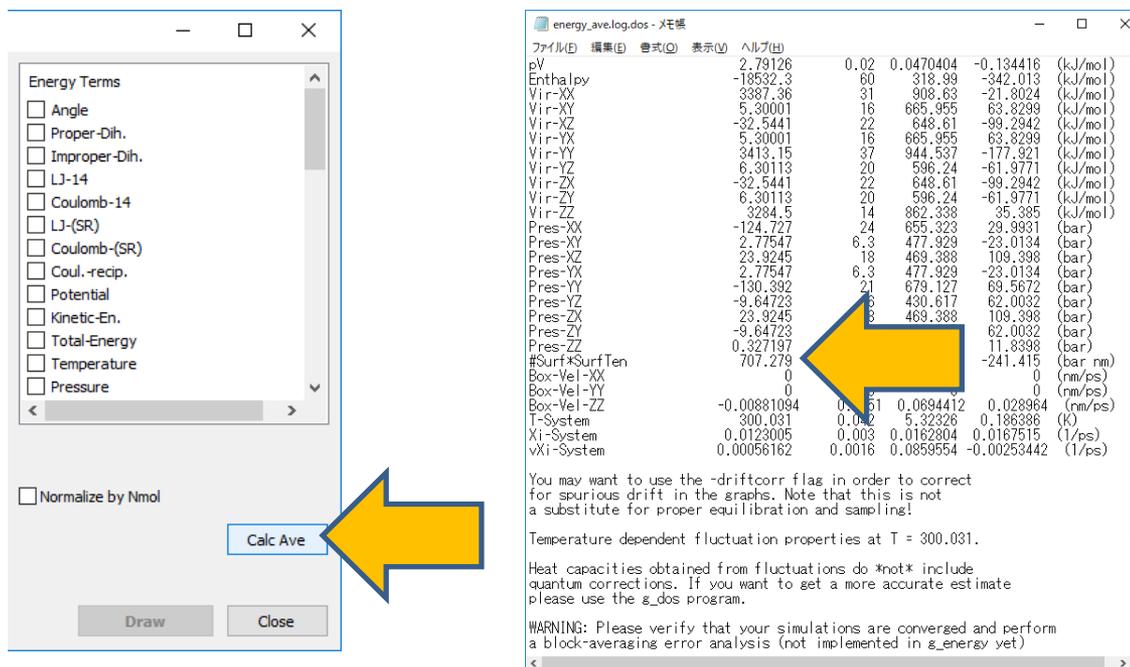
IV. 結果処理

1. **Density**タブの**Group**で**Water**と**non-Water**にチェックを入れる。
2. **Draw**をクリックすると、z方向に沿った密度分布が出現する。
3. 確認後、**Close**をクリックする。



IV. 結果処理

1.  (エネルギー変化) をクリックし、デフォルトで選択されるファイルを開く。
2. **Calc Ave** をクリックし、**Enter first frame to read** は **0** のまま **OK** をクリックする。
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 $1 \text{ bar nm} = 0.1 \text{ mN/m}$



The screenshot shows two windows from the software. On the left is the 'Energy Terms' dialog box, which has a list of energy terms with checkboxes. The 'Calc Ave' button is highlighted with a yellow arrow. On the right is the 'energy_ave.log.dos' window, which displays a table of simulation results. A yellow arrow points to the row labeled '#Surf*SurfTen', which shows a value of 707.279. Below the table, there is a warning message and some technical notes.

Energy Term	Value	Unit
pV	2.79126	
Enthalpy	-18532.3	
Vir-XX	3387.36	
Vir-XY	5.30001	
Vir-XZ	-32.5441	
Vir-YY	5.30001	
Vir-YZ	3413.15	
Vir-ZX	6.30113	
Vir-ZY	-32.5441	
Vir-ZZ	6.30113	
Vir-ZZ	3284.5	
Pres-XX	-124.727	
Pres-XY	2.77547	
Pres-XZ	23.9245	
Pres-YY	2.77547	
Pres-YZ	-130.392	
Pres-ZX	-9.64723	
Pres-ZY	23.9245	
Pres-ZZ	-9.64723	
Pres-ZZ	0.327197	
#Surf*SurfTen	707.279	(bar nm)
Box-Vel-XX	0	(nm/ps)
Box-Vel-YY	0	(nm/ps)
Box-Vel-ZZ	-0.00881094	(nm/ps)
T-System	300.031	(K)
Xi-System	0.0123005	(1/ps)
xXi-System	0.00056162	(1/ps)

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 = 300.031.

Heat capacities obtained from fluctuations do not include quantum corrections. If you want to get a more accurate estimate please use the `_g_dos` program.

WARNING: Please verify that your simulations are converged and perform a block-averaging error analysis (not implemented in `_g_energy` yet)

<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

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...

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