

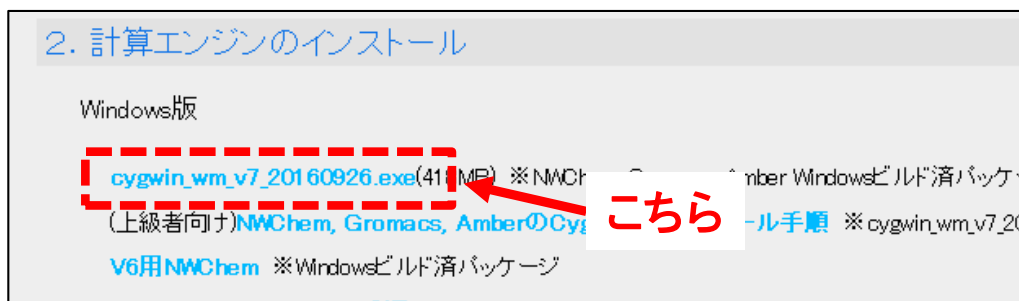
Winmostar™ チュートリアル
Gromacs
粘度・誘電率
V9.0.1

株式会社クロスアビリティ
2019年2月8日

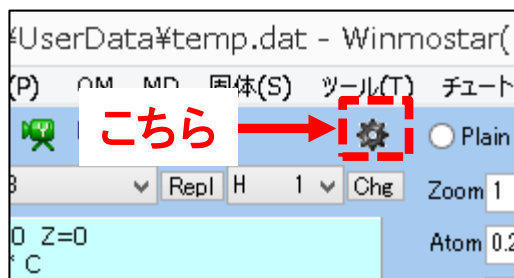
動作環境設定

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。

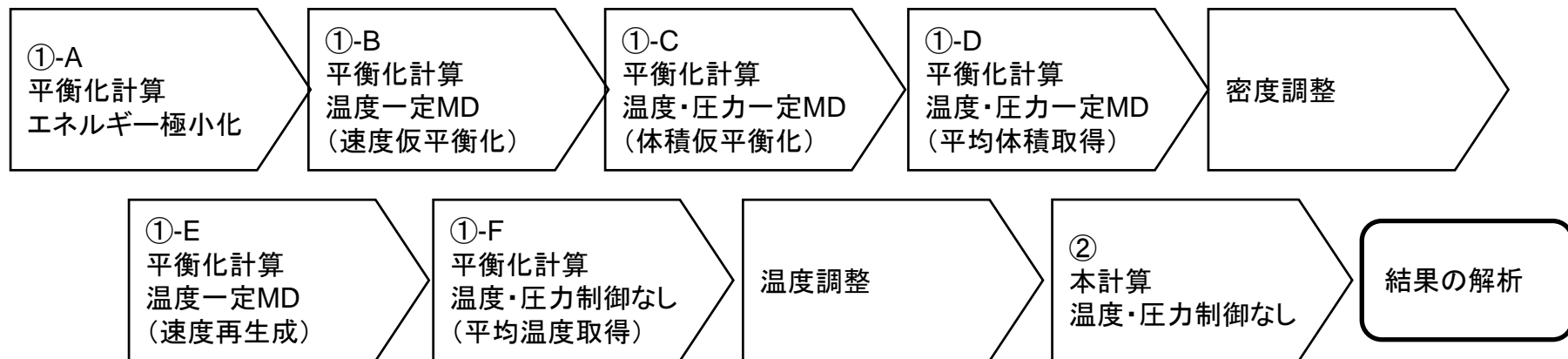


- デフォルトではC:\直下にインストールされますが、Winmostarの環境設定の「プログラムパス」>「Cygwin」を変更することで任意の場所にインストール可能です。



概要


本チュートリアルでは、水の液体の粘度と誘電率の計算を実施します。分子の微妙な運動に敏感な物性を計算するため、本計算はNVEアンサンブル(温度・圧力制御なし)で実施する。目標温度・圧力下でNVEアンサンブルの計算をするための平衡化手順も示す。

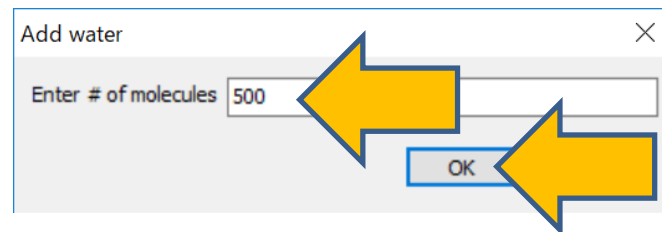
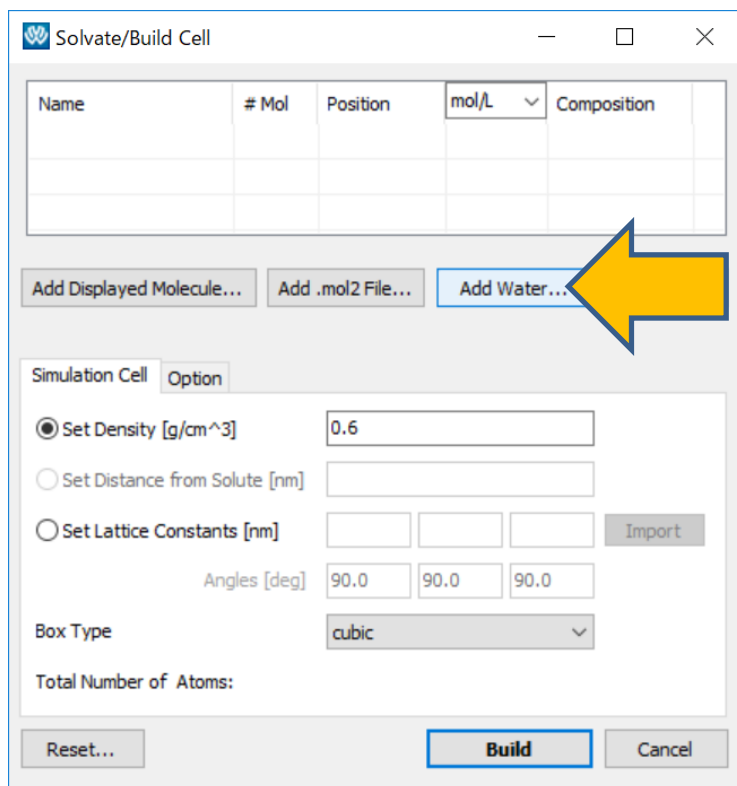


注意点:

- 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変化します。
- “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。
- 力場の種類、相互作用の計算条件、系のサイズなどが計算結果に影響を与えます。

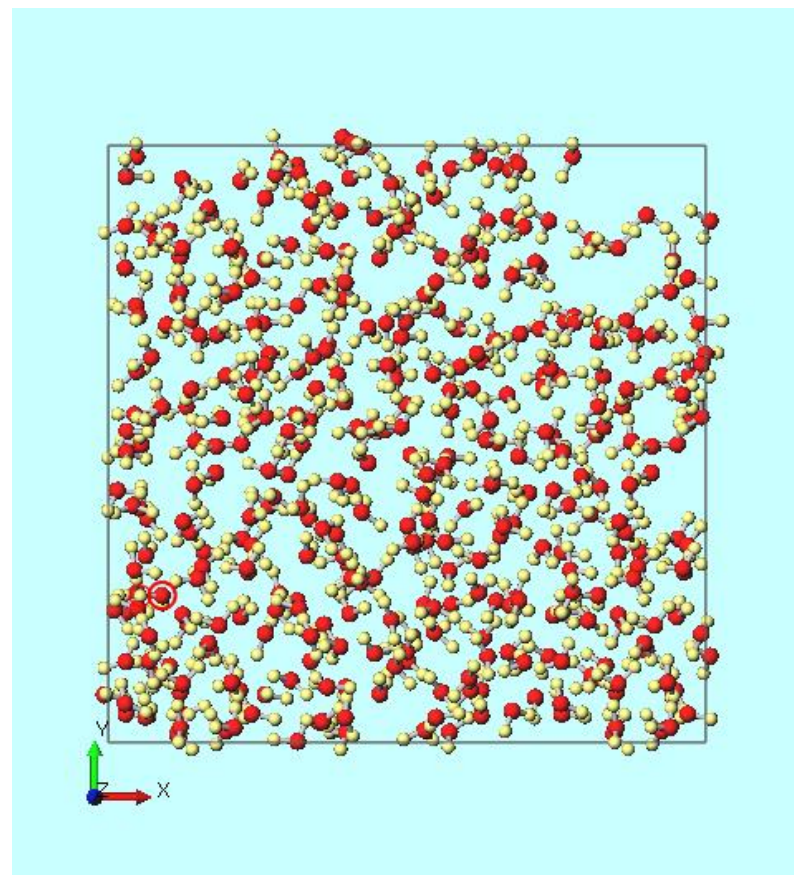
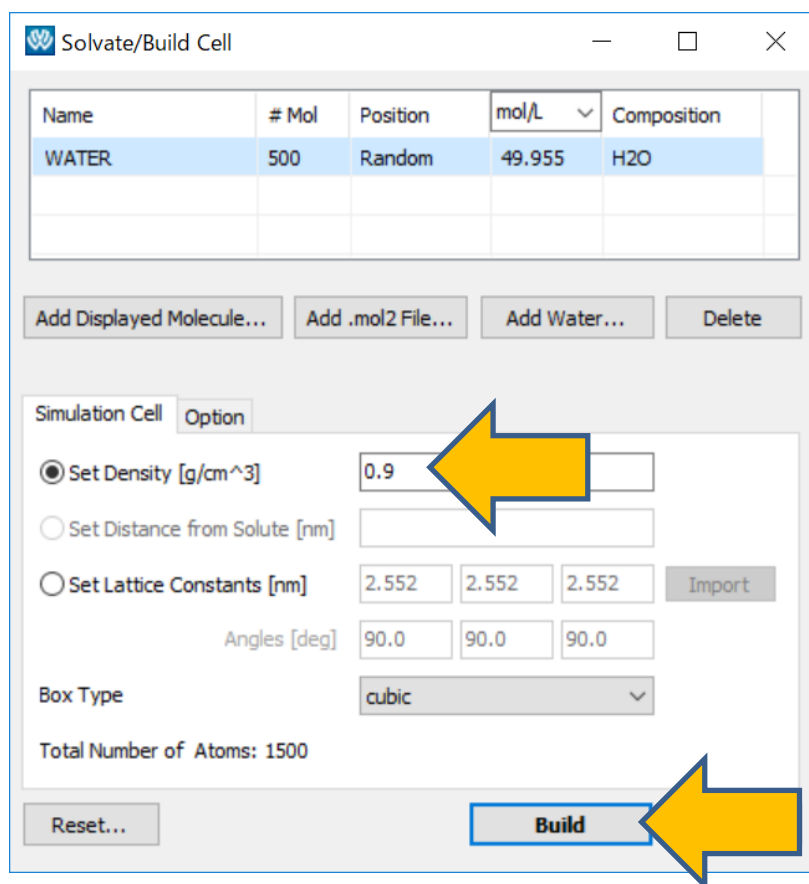
I. 系の作成

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。



II. 平衡化計算 (A~C)

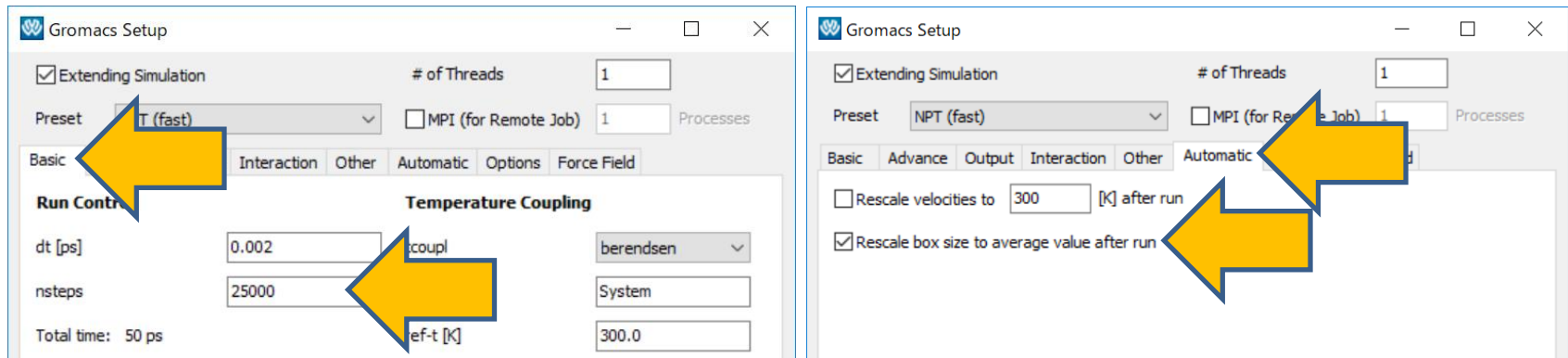
1. MD | Gromacs | 連続ジョブ設定をクリックする。
2. Use presetでMinimize (fast)を選び>>> Add >>>を1回クリックする。
3. Use presetでNVT (fast)を選び>>> Add >>>を1回クリックする。
4. Use presetでNPT (fast)を選び>>> Add >>>を1回クリックする。
5. Setをクリックする。
6. MD | Gromacs | 連続ジョブ実行をクリックする。
7. ファイル名をvdc.gro, vdc.topとして保存する。
8. 警告ウィンドウではいをクリックする。

The image shows a software interface with a menu on the left and a 'Sequential Job' configuration window on the right. The menu includes 'MD', 'Gromacs', and other simulation options. The 'Gromacs' menu is expanded, showing '連続ジョブ設定...' (Continuous Job Setting) highlighted with a yellow arrow. The 'Sequential Job' window has a 'Job Setting' section with 'Use preset' selected. A dropdown menu shows 'NPT (fast)' selected, with a yellow arrow pointing to it. To the right of the dropdown are '>>> Add >>>' and '<<< Delete <<<' buttons, with a yellow arrow pointing to the 'Add' button. At the bottom right of the window is a 'Set' button, also highlighted with a yellow arrow. A table on the right side of the window lists the added presets:

#	Setting
0	Preset: Minimize (fast)
1	Preset: NVT (fast)
2	Preset: NPT (fast)

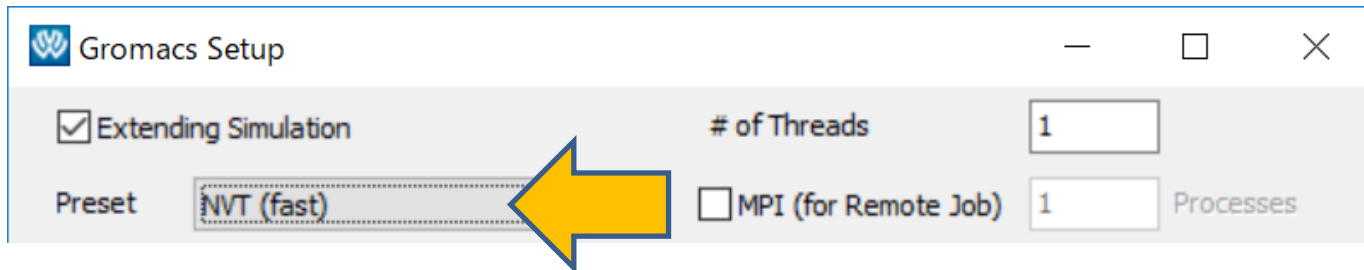
II. 平衡化計算(D)+密度調整

1. 計算終了後、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. **Basic**タブにて**nsteps**を**25000**に変更する。
3. **Automatic**タブにて**Rescale box size...**にチェックを入れる。
4. **Run**をクリックする。



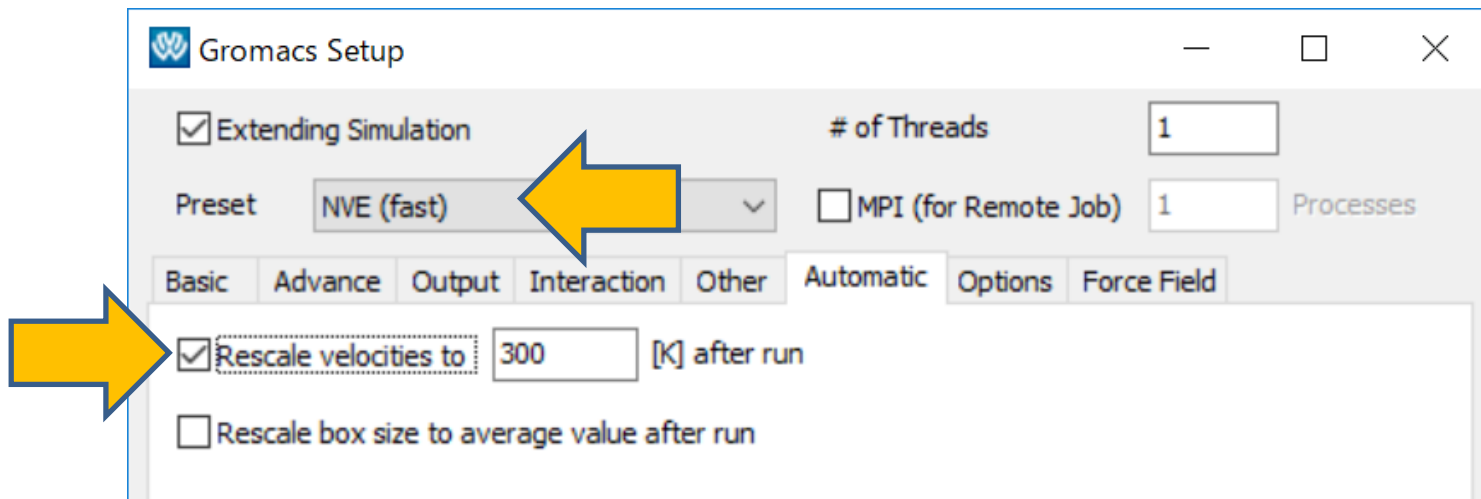
II. 平衡化計算(E)

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



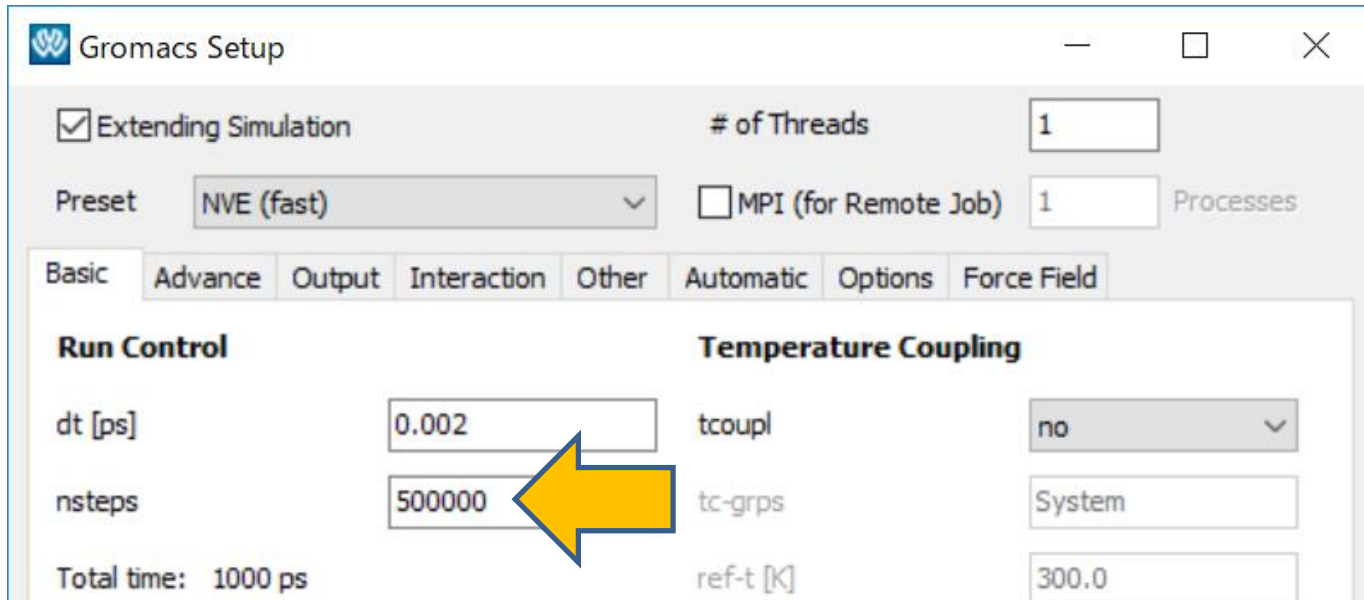
II. 平衡化計算(F)

1. 計算終了後、 (キーワード設定)をクリックする。
2. **Preset**に**NVE (fast)**を指定する。
3. **Automatic**タブの**Rescale Velocities to ...**をチェックする。
4. **Run**をクリックする。




III. 本計算

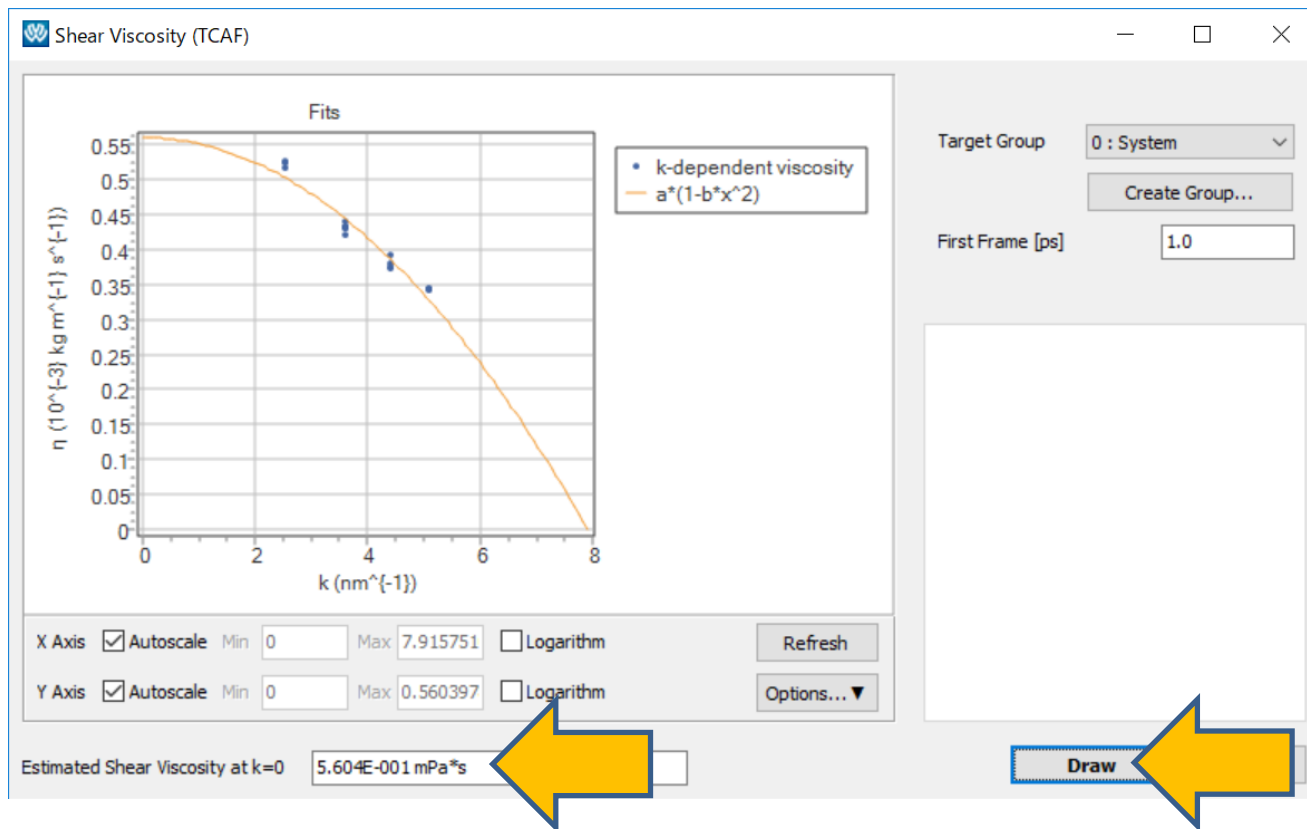
1. 計算終了後、 (キーワード設定)をクリックする。
2. **Basic**タブにて**nsteps**に**500000**を指定する。
3. **Run**をクリックする。




The screenshot shows the Gromacs Setup window. The 'Basic' tab is selected. Under 'Run Control', the 'nsteps' field is set to 500000, with a yellow arrow pointing to it. Other fields include 'dt [ps]' at 0.002, 'Total time: 1000 ps', 'Temperature Coupling' set to 'no', 'tc-grps' set to 'System', and 'ref-t [K]' set to 300.0. The 'Extending Simulation' checkbox is checked, and the 'Preset' is 'NVE (fast)'. The window title is 'Gromacs Setup'.

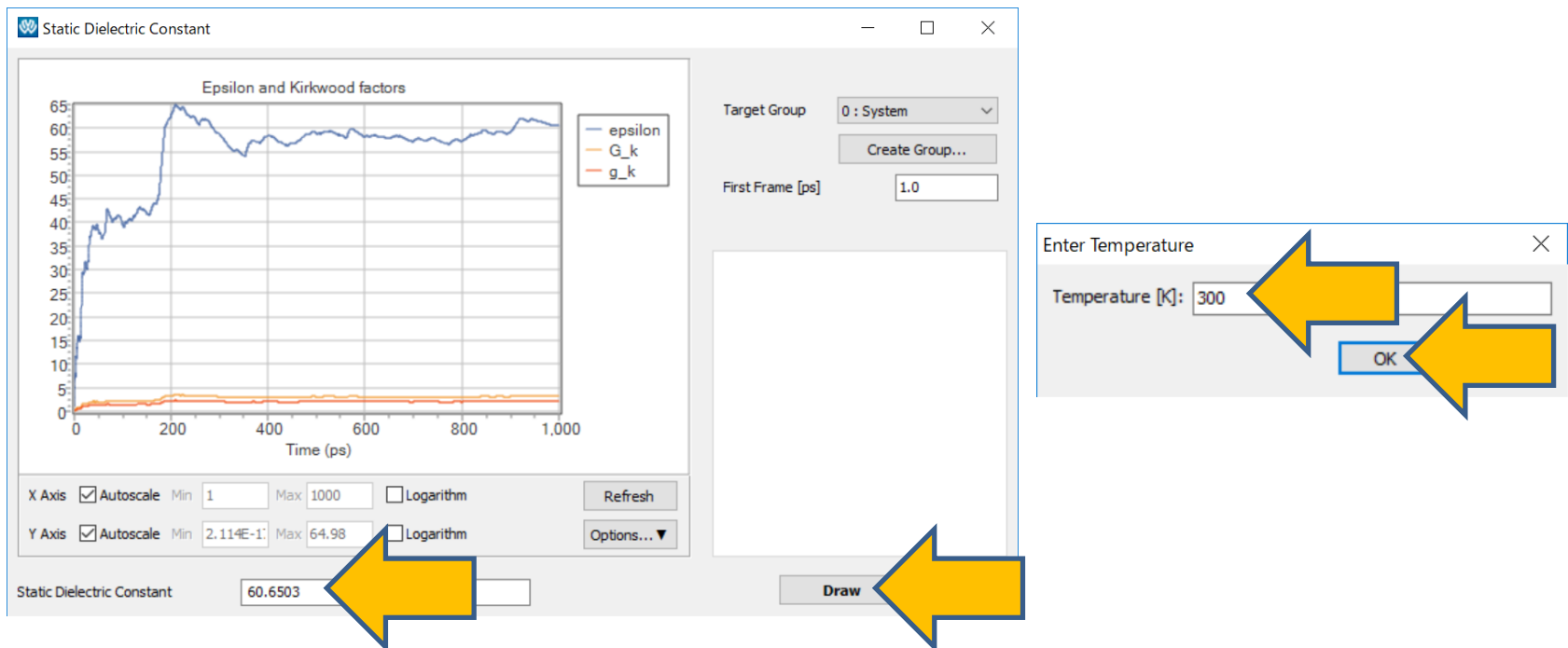
IV. 粘度の算出

1. 計算終了後、 (結果解析) | 粘度をクリックする。
2. デフォルトで選択されるファイルを開く操作を3回繰り返す。
3. **Draw**をクリックすると、粘度の推測値が下に表示される。



V. 誘電率の算出

1. 計算終了後、 (結果解析) | 比誘電率をクリックする。
2. デフォルトで選択されるファイルを開く操作を3回繰り返す。
3. **Draw**をクリックし、設定温度(300)を入力すると、誘電率の推測値が下に表示される。



<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

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