

NTChemを用いたQM/MM計算

第二回NTChem講習会

講習内容

- QM/MMハイブリッド法の概要
- NTChemにおける実装・計算手順
- QM/MM法の演習
- ONIOM(QM/MM)法の演習

- QM/MMハイブリッド法の概要
- NTChemにおける実装・計算手順
- QM/MM法の演習
- ONIOM(QM/MM)法の演習

QM/MMハイブリッド法

- 分子計算につきまとう規模と精度の問題
 - 全体構造的制約と局所的電子状態の両方が重要
 - 全体の低コスト計算＋重要な部位の高精度計算

 - 量子力学(QM)計算
 - 高計算コスト
 - 結合状態の事前決定が不要、高精度
 - 古典力学(MM)計算
 - 事前に設定した結合に対応した力場を利用
 - 低計算コスト

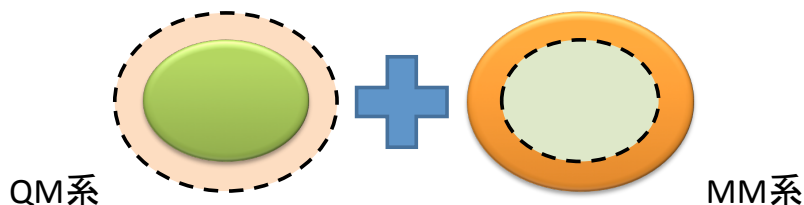
 - QM/MM法、ONIOM(QM/MM)法

• QM/MM法

– 全系 = QM系 + MM系

高精度

低精度



- MM環境下でのQM計算 + QM環境下でのMM計算
- QM部分とMM部分が相互に影響
- 現状のNTChemではQM/MM間結合は考慮しない

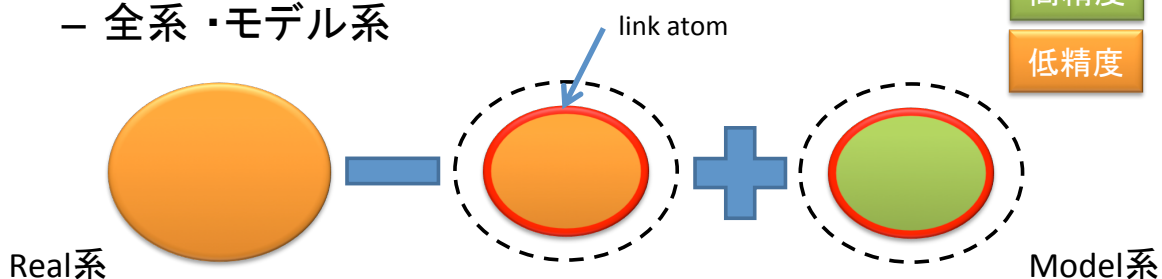
ONIOM法

• ONIOM法

– 全系・モデル系

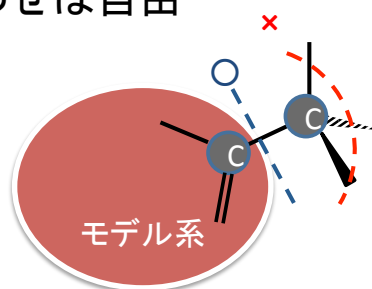
高精度

低精度



- 全系低精度 – モデル系低精度 + モデル系高精度
- 各計算は独立・計算レベルの組み合わせは自由
- NTChemでのlink atom

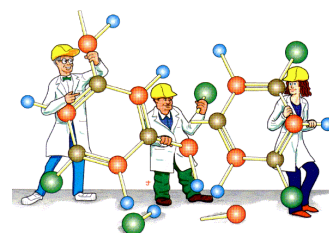
- モデル内1原子からは最大1個のlink atom
- 水素で置換・結合長は元の何倍か指定



- QM/MMハイブリッド法の概要
- NTChemにおける実装・計算手順
- QM/MM法の演習
- ONIOM(QM/MM)法の演習

NTChemでのハイブリッド法の実装概要

- **MM計算にはTinkerプログラムを利用**
 - フリーの古典動力学プログラム
 - Tinker2NT.exeを通して実行
 - Tinkerのインプット作成の知識が必要
- **複数のインプットで計算を細かく制御**
 - 全体を統括するインプット
 - “系×計算レベル”毎に別のインプット



• Tinkerのインプットファイル

- Tinker内での標準拡張子 .xyz
- 本講習内では拡張子 .tin として扱う

		...原子数						
1362								
1	C	-0.618857	0.280455	0.694444	174	2	3	4
2	HC	-1.025636	0.601040	1.653358	194	1		
3	O	-1.298259	0.066638	-0.305014	175	1		
4	N	0.696627	0.165599	0.657239	176	1	5	6
5	H	1.166436	-0.119781	-0.198998	179	4		
6	H	1.218847	0.419401	1.501609	179	4		
7	OW	-3.834754	-3.944380	-7.301575	53	8	9	
8	HW	-3.701833	-3.096644	-7.772730	54	7		
9	HW	-4.161088	-4.571539	-7.967254	54	7		
10	OW	-3.344361	-5.064728	-3.292616	53	11	12	
:								
	(番号)	(名称)	(X座標)	(Y座標)	(Z座標)	(原子タイプ)	(結合原子)	
:								
1362	HW	7.520907	6.410806	5.514449	54	1360		

• Tinkerのパラメータファイル

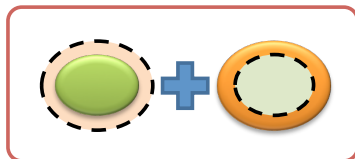
- Tinker内での標準拡張子 .prm

• 分子座標ファイル

- XMol XYZ file format
- 本講習内では拡張子 .xyz として扱う

		...原子数		
1362	(コメント行)			
C		-0.618857	0.280455	0.694444
H		-1.025636	0.601040	1.653358
O		-1.298259	0.066638	-0.305014
N		0.696627	0.165599	0.657239
H		1.166436	-0.119781	-0.198998
H		1.218847	0.419401	1.501609
O		-3.834754	-3.944380	-7.301575
H		-3.701833	-3.096644	-7.772730
H		-4.161088	-4.571539	-7.967254
O		-3.344361	-5.064728	-3.292616
:				
	(原子名)	(X座標)	(Y座標)	(Z座標)
:				
H		7.520907	6.410806	5.514449

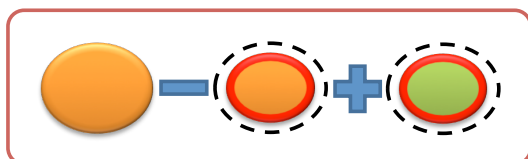
• QM/MM法



\${Name}.inp : 全体インプット
 \${Name}.QM.inp : QM計算インプット
 \${Name}.MM.inp : MM計算インプット

計3個のインプットファイル

• ONIOM(QM/MM)法



\${Name}.inp : 全体インプット
 \${Name}.LR.inp : Low-Realインプット
 \${Name}.LM.inp : Low-Modelインプット
 \${Name}.HM.inp : High-Modelインプット

計4個のインプットファイル

インプットの概要

• 全体インプットと個別インプット

NTPrepで作成
 Tin2QMMMで作成

全体インプット

ハイブリッド計算自体の条件を指定

```

&Control
Name='alice', NCorePerIO=8,
/

&QMMM
NameQM='alice.QM',
NameMM='alice.MM',
/

Geom
(全体の分子構造指定)
:
:
End
    
```

個別インプット

各々の部分計算の条件を指定

```

&Control
Name='alice.QM',/

&SCF
(計算条件)
/

Basis
(基底関数指定)
:
End

Geom_ONIOM
(部分構造指定)
:
:
End

TinXYZ
(分子の結合情報指定)
:
:
End
    
```

- 全系のTinkerインプットファイルを作成

- この部分はNTChem講習会の範囲外
- 講習会では予め用意したものを利用

- 系、計算レベル毎のインプットの作成

- 計算条件などはテンプレートを修正かNTPrepで作成
- 構造指定は全系のTinkerインプットから加工

- スクリプトファイルの作成

- テンプレートファイルを修正

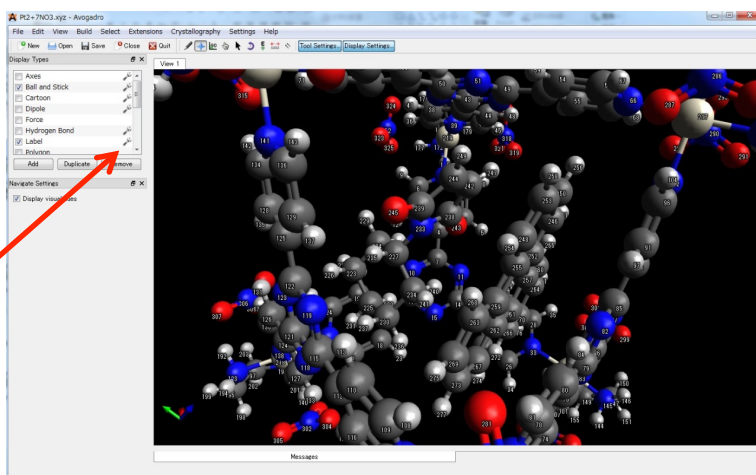
分子モデルビューア

- QM/MMの指定に番号確認が必要

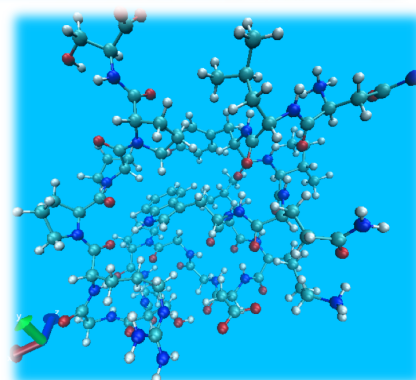
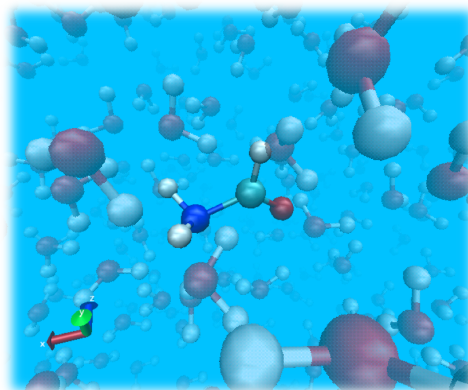
- Avogadroを利用して通し番号を確認

XMol XYZ形式(拡張子.xyz)のファイルを開く

Labelの右のマークをクリック
→ **Settingタブ**
Atom LabelsのTextで
“Unique ID”を選択
IDは0から始まるので注意!!



- QM/MMの例題
 - 水溶液中のホルムアミド
 - QM(ホルムアミド)/MM(水)
- ONIOMの例題
 - トリプトファンケージ
 - モデル系:トリプトファン部分
- エネルギー・微分計算
- 構造最適化

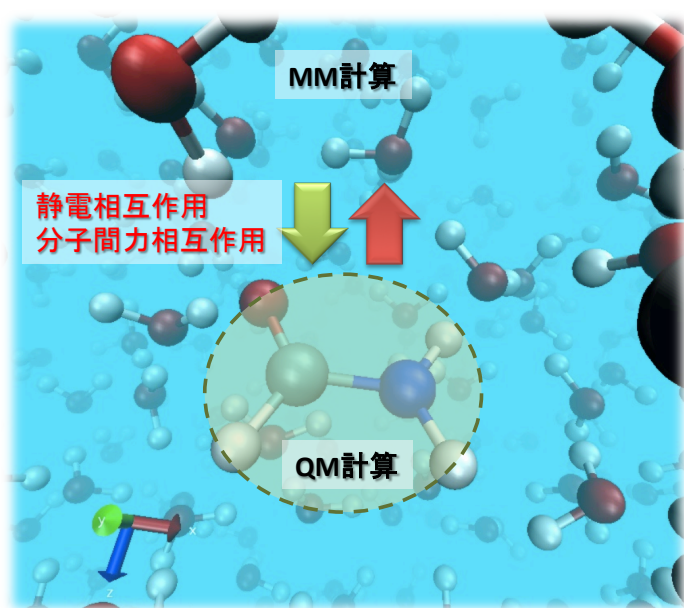


- QM計算はNTPrepのデフォルト値を利用
 - 計算条件
 - 計算手法 : DFT(RKS)
 - 汎関数 : ω B97XD
 - 基底関数 : Def2-SVP
 - 電荷 : 0
 - 2ノード40コアでの並列計算
 - NCorePerIOは並列数と同じ値に設定

- QM/MMハイブリッド法の概要
- NTChemにおける実装・計算手順
- **QM/MM法の演習**
- ONIOM(QM/MM)法の演習

QM/MM法の演習: 概要

- 水溶液中のホルムアミド
 - 水分子の影響をMMで扱って取り込む



• 利用するファイルの確認・コピー

- /home1/glez/share/training/QMMMlecture/以下
- ディレクトリ:Exam01
 - Tinkerインプット : formamide+water.tin
 - XMolファイル : formamide+water.xmol.xyz
- ディレクトリ:TEMPLATE/QMMM
 - インプット・スクリプトのテンプレート群
- ディレクトリ:TEMPLATE/Param
 - MMパラメータ : oplsa.prm
- 作業用ディレクトリを作成・ファイルをコピー

```
>$ mkdir Exam01_mine
>$ cd Exam01_mine
>$ cp /home1/glez/share/training/QMMMlecture/Exam01/* ./
>$ cp /home1/glez/share/training/QMMMlecture/TEMPLATE/QMMM/* ./
>$ cp /home1/glez/share/training/QMMMlecture/TEMPLATE/Param/oplsa.prm ./
```

• 使用するパラメータに不備がないか確認

- Tinkerの**analyze**を実行してみる
 - /home1/glez/share/tinker/6.2.05/bin/analyze

Tinkerディレクトリのanalyzeを実行

```
>$ /home1/glez/share/tinker/6.2.05/bin/analyze

#####
#####
###
###          TINKER  ---  Software Tools for Molecular Design      ###
###
###          Version 6.2  February 2013                          ##
###
###          Copyright (c) Jay William Ponder  1990-2013         ##
###          All Rights Reserved                                ###
###
#####
#####

Enter Cartesian Coordinate File Name :  formamide+water.tin
Enter Potential Parameter File Name :  oplsa.prm

The TINKER Analysis Facility can Provide :

General System and Force Field Information [G]
Force Field Parameters for Interactions [P]
Total Potential Energy and its Components [E]
Energy Breakdown over Each of the Atoms [A]
List of the Large Individual Interactions [L]
Details for All Individual Interactions [D]
Electrostatic, Inertial & Virial Properties [M]
Connectivity Lists for Each of the Atoms [C]
```

対話形式でTinkerインプット・パラメータを入力

ここまで来れば確認はOK

• MM計算で構造の修正

– Tinkerの**Minimize**を実行

```
>$ /home1/glez/share/tinker/6.2.05/bin/minimize
Enter Cartesian Coordinate File Name : formamide+water.tin
Enter Potential Parameter File Name : oplsa.prm
Enter RMS Gradient per Atom Criterion [0.01] : (Enterを押す)
Limited Memory BFGS Quasi-Newton Optimization :
QN Iter   F Value      G RMS      F Move    X Move    Angle  FG Call  Comment
   0      -5098.4568    0.0092      0.0000    0.0000    0.0000    1.0000    1
LBFGS -- Normal Termination due to SmallGrad
Final Function Value :      -5098.4568
Final RMS Gradient :        0.0092
Final Gradient Norm :        0.3408
```

– 最適化された .xyz ファイルを拡張子.tinにリネーム

• QM指定する部分の確認

– 例題の構造ファイルではホルムアミドが先頭に並ぶ

- 1番~6番の原子がQM原子

• ユーティリティプログラムを用いて部分構造準備

– **Tin2QMMM.exe**を実行

- /home1/glez/share/training/QMMMlecture/bin/Tin2QMMM.exe

Tin2QMMM.exeを実行
今回はQM/MMなので2を選択
パラメータファイルを指定
Tinkerインプットを指定
原子数は1362原子
453分子(ホルムアミド+水452個)

1番~6番までをQM領域に指定

このQM指定を採用
出力のベースネームを指定

できたファイルを確認
水色部分が新しくできたファイル

```
>$ /home1/glez/share/training/QMMMlecture/bin/Tin2QMMM.exe
Select calculation type [ 1:ONIOM(QM/MM) 2:QM/MM ] >> 2
Enter tinker param file >> oplsa.prm
Enter tinker input file >> formamide+water.tin
NAtom = 1362
NFrag = 453
>> Press enter to continue (Press Y to show fragment information)
(Enterを押す)
Input QM atom list:
Enter '-I J' to set sequential atoms from I to J
Enter '0' to terminate input
-1 6 0
Accept this QM/MM division ? (Y: Accept / Q: Quit / other: Redo)
y
Enter output base name >> exam01

>$ ls
DLFindFixXYZ.txt QMMM.inp0 QMMM_MM.inp0 QMMM_Opt.bash QMMM_SP.bash
QMMM_grad.bash exam01.QMMM.MM exam01.QMMM.QM exam01.QMMM.QM.xyz
formamide+water.tin formamide+water.xmol.xyz oplsa.prm
```

(赤字部分を入力)

• 生成されたファイルの内容

– exam01.QMMM.MM

- MM領域の構造指定: Geom_ONIOM + TinXYZ

– exam01.QMMM.QM

- QM領域の構造指定: Geom_ONIOM

– exam01.QMMM.QM.xyz

- QM領域のみを切り出したXMolファイル
 - これとNTPrepを用いてQM計算用のインプットを作成

– DLFindFixXYZ.txt

- micro iterationを利用した最適化をする際に必要な情報

• 全体インプットファイルの作成

– テンプレート(QMMM.inp0)を加工

- ネームリスト (&Control) の編集
 - Name='exam01', NCorePerIO=40,
- ネームリスト (&QMMM) の編集
 - NameQM='exam01.QM', NameMM='exam01.MM', Param='oplsaa.prm'
- 分子座標(Geomカード)の追加
 - formamide+water.xml.xyz の内容を挿入(先頭の原子数は消去)
 - 座標部分の先頭に"Geom", 末尾に"End"を追加
- Tinker結合指定の追加
 - formamide+water.tinの内容を挿入(先頭の原子数は消去)
 - 座標部分の先頭に"TinXYZ", 末尾に"End"を追加
- "exam01.inp"として保存

• QMインプットファイルの作成

- exam01.QMMM.QM.xyzファイルを元にNTPrep実行
 - /home1/share/NTChem/ntchem2013.4.0/scripts/ntprep
 - ベースネームは”**exam01.QM**”とする
 - 計算のタイプは 2 番 (gradient) を選択
- NTPrepで生成されたインプットファイルを加工
 - **exam01.QM.inp**
 - ネームリスト (**&MDInt1**) の編集 (“**CalChg=T**” を追加)
 - **Geomカードを削除**
 - **exam01.QMMM.QM**ファイルの内容を追加 (ファイル全体を挿入)
 - “exam01.QM.inp”として上書き保存
 - **exam01.QM_guess.inp**
 - ネームリスト (**&MDInt1**) の編集 (“**CalChg=T**”を追加)
 - **Geomカード・Basisカードを削除**
 - “exam01.QM_guess.inp”として上書き保存

• MMインプットファイルの作成

- テンプレート(QMMM_MM.inp0)を加工
 - ネームリスト (**&Control**) の編集
 - **Name='exam01.MM', NCorePerIO=40,** を追加
 - ネームリスト (**&Tinker**) の編集
 - **param='oplsaa.prm'** (今回使用するパラメータファイル)とする
 - 分子座標の追加
 - **exam01.QMMM.MM**の挿入
- “exam01.MM.inp”として保存

• スクリプトファイルの作成

- テンプレート(QMMM_SP.bash)を編集
 - ヘッダ部分の修正 (I.8-10)
 - 必要ならば”#SBATCH -o QMMM_SP_%J.o“(アウトプット名)などを変更
 - » #SBATCH -o exam01_SP_%J.o
 - 使用するファイル名の変更 (I.43, 49)
 - “export MOL=CHANGEME” →”export MOL=exam01”
 - “export MPMRM=CHANGEME” →”export MPMRM=oplsaa.prm”
- “exam01_SP.bash”として保存

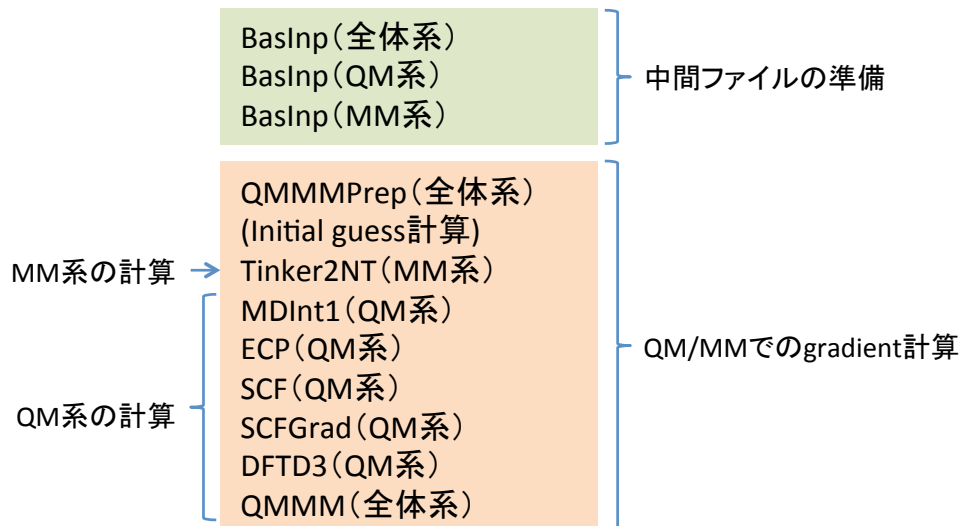
• ジョブの実行

- >\$ sbatch exam01_SP.bash

- 結果が exam01_SP_\${JobID}.o に出力される

• アウトプットファイルの見方

- 順番に以下の内容がアウトプットファイルに記述
 - スクリプトファイルの内容と比較してみましょう



• アウトプットファイルの見方

- QMMMPrep: 全系インプット

```

=====
Program      QMMMPrep start

o Set geometry based on exam01.Geom
  --- exam01.MM.Geom file is generated
  --- exam01.QM.Geom file is generated

Program      QMMMPrep finish. Total CPU time :      0.03 seconds
=====
    
```

QMMMPrepの仕事:
 全系の座標(exam01.Geom)から部分系(QM系、MM系)の座標を生成

・ アウトプットファイルの見方

– Tinker2NT:MM系インプット

```

=====
Program      Tinker2NT start

o Parameter file = oplsa.prm
-- Tinker input file exam01.MM.TinkerInp is generated
-- Execute Tinker program "testgrad"
-- Output is written to exam01.MM.TinkerOut file
o Total energy = -8.05125049086704
+++++ Total energy gradient +++++
1      0.000025130265   -0.000199439852   -0.000266987979
2      -0.000020829448    0.000073535539    0.000149347982
:
:
1355   0.000182152254    0.000163431050    0.000070583998
1356   0.000113001861    0.000131807395    0.000062488343

Program      Tinker2NT finish. Total CPU time :      0.03 seconds
=====
    
```

計算条件を表示

MM系のMM計算による
全エネルギー、
エネルギー微分を表示
(MM系なので1356原子)

Tinker2NTの仕事:

Tinkerのtestgradでエネルギー微分計算を行い、NTChem形式に出力

・ アウトプットファイルの見方

– SCFGrad:QM系インプット

```

=====
Program      SCFGrad start
:
+++++ Point charge contribution +++++
1      0.00001460    0.00033490    0.00048705
2      -0.00000163   -0.00013066   -0.00026595
:
:
1355   -0.00015525   -0.00016311   -0.00005883
1356   -0.00009242   -0.00012620   -0.00005062
+++++ 1e contribution for gradient +++++
:
+++++ Total energy gradient +++++
1      0.00497591    0.00522218    0.03168760
:
6      -0.00368874   -0.00081811    0.00014653

Program      SCFGrad finish. Total CPU time :      1.45 seconds
=====
    
```

点電荷として考慮した
MM原子に対する
エネルギー微分寄与

QM原子に対する
エネルギー微分寄与

注: ECPでエラーが出ますが、これは今回の計算ではECPを用いていないためです
ECPを用いた計算でも利用できるようにテンプレートにはECP計算の実行が含まれています

• アウトプットファイルの見方

– QMMM: 全系インプット

```

=====
Program          QMMM start

o vdWIndex = TYPE
o Total QM energy          = -169.757027083224
o Total MM energy          = -8.05125049086700
o van der Waals interaction energy = -7.639704629173005E-003
o Total QM/MM energy       = -177.815917278720

++++ van der Waals contribution for gradient (QM atom) ++++
  1  -0.000240519800    0.000372351480    -0.000109179105
  :
  6   0.000000000000    0.000000000000    0.000000000000
++++ van der Waals contribution for gradient (MM atom) ++++
  1  -0.000000321234   -0.000000430712   -0.000000785486
  :
 1356  0.000000000000    0.000000000000    0.000000000000
+++++ Total QM/MM energy gradient +++++
  0.004858379229    0.005585500187    0.031574859821
  :
  0.000020580765    0.000005604561    0.000011871658

Program          QMMM finish. Total CPU time :          0.06 seconds
=====
    
```

各部分系のエネルギー
QM-MM間のvdW相互作用
全QM/MMエネルギー

vdWエネルギー微分

全エネルギー微分

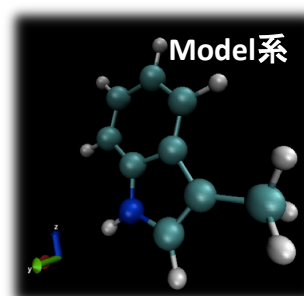
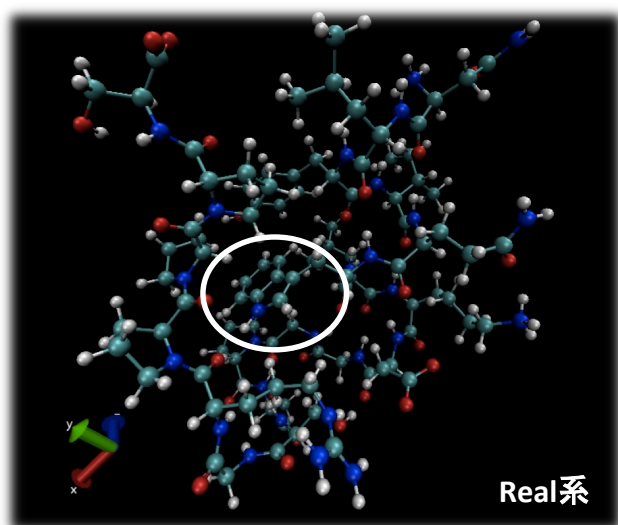
• 構造最適化

- 準備するインプットファイルは一点計算と同じ
- スクリプトはQMMM_Opt.bashを書き換え
 - 書き換える部分は一点計算の場合と同じ
- DLFindは全系のgradientを受け取り、全系構造を動かす
 - プログラムDLFindからQMMM_grad.bashが呼び出される
 - QMMM_grad.bashの中では以下の処理が行われる
 - 全系構造からプログラムQMMMPrepでQM構造とMM構造を作成
 - 部分系の計算で各系のエネルギー、gradientを計算
 - プログラムQMMMで全系のQM/MMエネルギー、gradientを作成

- QM/MMハイブリッド法の概要
- NTChemにおける実装・計算手順
- QM/MM法の演習
- **ONIOM(QM/MM)法の演習**

ONIOM(QM/MM)法の演習:概要

- トリプトファンケージ(PDB記号:1L2Y)
 - トリプトファン部をモデル系として外側の影響を考慮



• 利用するファイルの確認

- /home1/glez/share/training/QMMMlecture/以下
- ディレクトリ:Exam02
 - Tinkerインプット : TrCage_1L2Y.tin
 - XMolファイル : TrCage_1L2Y.xmol.xyz
- ディレクトリ:TEMPLATE/ONIOM
 - インプット・スクリプトのテンプレート群
- ディレクトリ:TEMPLATE/Param
 - MMパラメータ : oplsa.prm
- 作業用ディレクトリを作成・ファイルをコピー

```
>$ mkdir Exam02_mine
>$ cd Exam02_mine
>$ cp /home1/glez/share/training/QMMMlecture/Exam02/* ./
>$ cp /home1/glez/share/training/QMMMlecture/TEMPLATE/ONIOM/* ./
>$ cp /home1/glez/share/training/QMMMlecture/TEMPLATE/Param/oplsaa.prm ./
```

37

• 使用するパラメータに不備がないか確認

- Tinkerの**analyze**を実行してみる

Tinkerディレクトリのanalyzeを実行

```
>$ /home1/glez/share/tinker/6.2.05/bin/analyze
#####
#####
###
###          TINKER  ---  Software Tools for Molecular Design          ###
###
###                      Version 6.2  February 2013                      ###
###
###          Copyright (c) Jay William Ponder  1990-2013          ###
###                      All Rights Reserved                      ###
###
#####
#####
Enter Cartesian Coordinate File Name :  TrCage_1L2Y.tin
Enter Potential Parameter File Name :  oplsa.prm

The TINKER Analysis Facility can Provide :

General System and Force Field Information [G]
Force Field Parameters for Interactions [P]
Total Potential Energy and its Components [E]
Energy Breakdown over Each of the Atoms [A]
List of the Large Individual Interactions [L]
Details for All Individual Interactions [D]
Electrostatic, Inertial & Virial Properties [M]
Connectivity Lists for Each of the Atoms [C]
```

対話形式でTinkerインプット・パラメータファイルを入力

ここまで出れば確認はOK、適当なものを選んでEnter

38

• MM計算で構造の修正

– Tinkerの**Minimize**を実行

```
>$ /home1/glez/share/tinker/6.2.05/bin/minimize
Enter Cartesian Coordinate File Name : TrCage.tin
Enter Potential Parameter File Name : oplsa.prm
Enter RMS Gradient per Atom Criterion [0.01] : (Enterを押す)
Limited Memory BFGS Quasi-Newton Optimization :
QN Iter   F Value      G RMS      F Move     X Move     Angle  FG Call  Comment
   0       -507.1418    8.8280     0.0000     0.0001    85.70   1859    SmallGrad
   :
  1857     -722.9407    0.0097     0.0000     0.0001    85.70   1859    SmallGrad

LBFGS -- Normal Termination due to SmallGrad

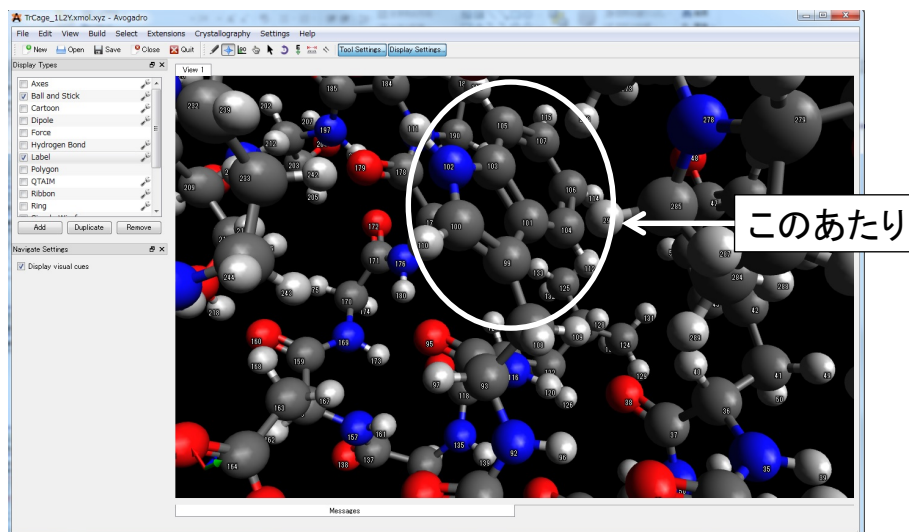
Final Function Value :      -722.9407
Final RMS Gradient :       0.0097
Final Gradient Norm :      0.1685
```

– 最適化された .xyz ファイルを拡張子.tinにリネーム

• QM指定する部分の確認

– ビューアでトリプトファン部分の番号を確認

• 番号が0から始まることに注意する



• ユーティリティプログラムを用いて部分構造準備

– Tin2QMMM.exeを実行

Tin2QMMM.exeを実行
今回はONIOM(QM/MM)なので1を選択
パラメータファイルを指定
Tinkerインプットを指定
原子数は304原子
1分子(全て結合している)

99番~116番までをQM領域に指定
モデルとその他の間に結合がある

モデル内の原子99番と
モデル外の原子94番の間に結合あり
このQM指定を採用
出力のベースネームを指定
link atomに関する注意

できたファイルを確認
水色部分が新しくできたファイル

```
>$ /home1/glez/share/training/QMMMlecture/bin/Tin2QMMM.exe
Select calculation type [ 1:ONIOM(QM/MM) 2:QM/MM ] >> 1
Enter tinker param file >> oplsa.prm
Enter tinker input file >> TrCage_1L2Y.tin
NAtom = 304
NFrag = 1
>> Press enter to continue (Press Y to show fragment information)
(Enterを押す)
Input QM atom list:
  Enter '-I J' to set sequential atoms from I to J
  Enter '0' to terminate input
-99 116 0
* Caution! Fragment          1 has partial QM attribute

Fragment          1
(Fragment1に属する原子の番号が列挙)
QM-MM connect    99[CT ] -    94[CT ]
Accept this QM/MM division ? (Y: Accept / Q: Quit / other: Redo)
y
Enter output base name >> exam02
NOTICE!: Please change hydrogen atom type manually

>$ ls
DLFindFixXYZ.txt ONIOM.inp0 ONIOM_G1.inp0 ONIOM_LM.inp0 ONIOM_LR.inp0
ONIOM_Opt.bash ONIOM_SP.bash ONIOM_grad.bash TrCage_1L2Y.tin
TrCage_1L2Y.xmol.xyz exam02.ONIOM.G1 exam02.ONIOM.HM exam02.ONIOM.HM.Model.xyz
exam02.ONIOM.LM exam02.ONIOM.LR oplsa.prm
```

41

ONIOM(QM/MM)法の演習(6)

• 生成されたファイルの内容

– exam02.ONIOM.G1

- ONIOM計算全体用の構造指定:Geom

– exam02.ONIOM.HM

- High-Model系用の構造指定:Geom_ONIOM

– exam02.ONIOM.HM.Model.xyz

- モデル系の構造を含むXMol XYZファイル

– exam02.ONIOM.LM

- Low-Model系用の構造指定:Geom_ONIOM + TinXYZ

– exam02.ONIOM.LR

- Low-Real系用の構造指定:Geom + TinXYZ

– DLFindFixXYZ.txt

42

• 全体インプットファイルの作成

- テンプレート(ONIOM_GI.inp0)を加工
 - ネームリスト (&Control) の編集
 - Name='exam02', NCorePerIO=40,
 - ネームリスト (&ONIOM) の編集
 - NameHM='exam02.HM', NameLM='exam02.LM', NameLR='exam02.LR',
 - 分子座標(Geomカード)の追加
 - exam02.ONIOM.GI の内容を挿入
- “exam02.inp”として保存

• High-Modelインプットファイルの作成

- exam02.ONIOM.HM.Model.xyzファイルを元にNTPrep実行
 - /home1/share/NTChem/ntchem2013.4.0/scripts/ntprep
 - ベースネームは”exam02.HM”とする
 - タスクタイプは 2 番 (gradient) を選択
- NTPrepで生成されたインプットファイルを加工
 - exam02.HM.inp
 - Geomカードを削除
 - exam02.ONIOM.HMファイルの内容を追加 (ファイル全体を挿入)
 - “exam02.HM.inp”として上書き保存
 - exam02.HM_guess.inp
 - Geomカード・Basisカードを削除
 - “exam02.HM_guess.inp”として上書き保存

• Low-Model入力ファイルの作成

- テンプレート(ONIOM_LM.inp0)を加工
 - ネームリスト (&Control) の編集
 - Name='exam02.LM', NCorePerIO=40, を追加
 - ネームリスト (&Tinker) の編集
 - param='oplsaa.prm' (今回使用するパラメータファイル)とする
 - 分子座標の追加
 - exam02.ONIOM.LMの挿入
 - TinXYZの最終ライン、Cap atom部の修正
 - » "ChangeToH"となっている部分を"82"(Alkane H-C)に
- "exam02.LM.inp"として保存

• Low-Real入力ファイルの作成

- テンプレート(ONIOM_LR.inp0)を加工
 - ネームリスト (&Control) の編集
 - Name='exam02.LR', NCorePerIO=40, を追加
 - ネームリスト (&Tinker) の編集
 - param='oplsaa.prm' (今回使用するパラメータファイル)とする
 - 分子座標の追加
 - exam02.ONIOM.LRの挿入
- "exam02.LR.inp"として保存

• スクリプトファイルの作成

– テンプレート(ONIOM_SP.bash)を編集

- ヘッダ部分の修正 (l.8-10)
 - 必要に応じてアウトプットファイル名などの修正
 - » #SBATCH -o exam02_SP_%j.o
- 使用するファイル名の変更 (l.43, 49)
 - “export MOL=CHANGEME” → “export MOL=exam02”
 - “export MPMRM=CHANGEME” → “export MPMRM=oplsaa.prm”

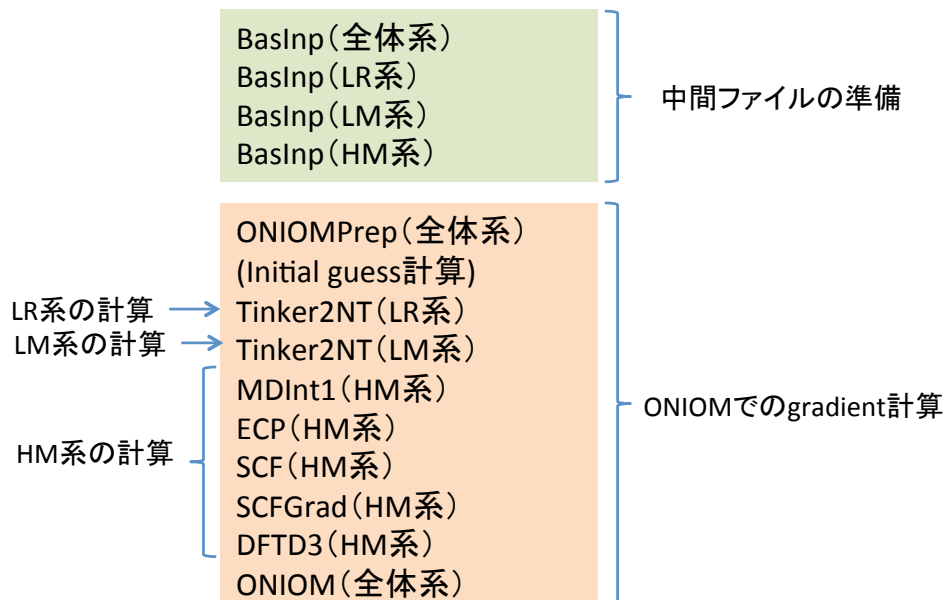
- “exam02_SP.bash”として保存

• ジョブの実行

- >\$ sbatch exam02_SP.bash

• アウトプットファイルの見方

– 順番に以下の内容がアウトプットファイルに記述



• アウトプットファイルの見方

– ONIOMPrep: 全系インプット

```

=====
Program      ONIOMPrep start

o NameLR = exam02.LR
o NameHM = exam02.HM
o NameLM = exam02.LM
o Set geometry based on exam02.Geom
  --- exam02.LR.Geom file is generated
  --- exam02.HM.Geom file is generated
  --- exam02.LM.Geom file is generated

Program      ONIOMPrep finish. Total CPU time :      0.00 seconds
=====
    
```

ONIOMPrepの仕事:

全系の座標(exam02.Geom)から部分系(LR系、LM系、HM系)の座標を生成

• アウトプットファイルの見方

– Tinker2NT:LRインプット

```

=====
Program      Tinker2NT start

o Parameter file = oplsaa.prm
  -- Tinker input file exam02.LR.TinkerInp is generated
  -- Execute Tinker program "testgrad"
  -- Output is written to exam02.LR.TinkerOut file
o Total energy =   -1.15207921595570
+++++ Total energy gradient +++++
1      0.000000927627   -0.000002529892   -0.000001939584
2      -0.000005059785    0.000004132158    0.000001096287
:
303    0.000004638136    0.000001855254   -0.000002698552
304    0.000004638136   -0.000004806796   -0.000003035871

Program      Tinker2NT finish. Total CPU time :      0.00 seconds
=====
    
```

全系(Real系)の
MMで計算した
全エネルギーと
エネルギー微分

• アウトプットファイルの見方

– Tinker2NT:LMインプット

```

=====
Program      Tinker2NT start

o Parameter file = oplsaa.prm
  -- Tinker input file exam02.LM.TinkerInp is generated
  -- Execute Tinker program "testgrad"
  -- Output is written to exam02.LM.TinkerOut file
o Total energy =    4.946219614531726E-003
+++++ Total energy gradient +++++
1      -0.004390965596   -0.012589503599   -0.013691777722
2      -0.002780689077    0.006093751848    0.005654140877
:
19     0.000036093132    0.000039129003    0.000151877874

Program      Tinker2NT finish. Total CPU time :      0.00 seconds
=====
    
```

モデル系(19原子)の
MMで計算した
全エネルギーと
エネルギー微分

• アウトプットファイルの見方

– ONIOM: 全体インプット

```
=====
Program          ONIOM start

o NameLR = exam02.LR
o NameHM = exam02.HM
o NameLM = exam02.LM
o Low - Real energy =          -1.152079215956
o High - Model energy =        -402.709755692910
o Low - Model energy =           0.004946219615
o ONIOM energy =                -403.866781128481
+++++ ONIOM gradient +++++
  1   0.00000093  -0.00000253  -0.00000194
  2  -0.00000506   0.00000413   0.00000110
  :
 304  0.00000464  -0.00000481  -0.00000304

Program          ONIOM finish. Total CPU time :          0.00 seconds
=====
```

53

ONIOM(QM/MM)法の演習(Ex.1)

• 構造最適化

- 準備するインプットファイルは一点計算と同じ
- スクリプトはONIOM_Opt.bashを書き換え
 - 書き換える部分は一点計算の場合と同じ
- DLFindは全系のgradientを受け取り、全系構造を動かす
 - プログラムDLFindからONIOM_grad.bashが呼び出される
 - ONIOM_grad.bashの中では以下の処理が行われる
 - 全系構造からプログラムONIOMPrepでReal構造とModel構造を作成
 - 部分系の計算で各系のエネルギー、gradientを計算
 - プログラムONIOMで全系のONIOMエネルギー、gradientを作成

54

- 切断部分の変更

- 適当な切断箇所を考え、Model領域を変えてみる
 - 切断箇所によってMMのパラメータがない場合が多いので注意