



# Tin2QMMMマニュアル

version 2015/3/2

1

## Tin2QMMMの概要



### • Tin2QMMM.exeの機能

- QM/MM, ONIOM計算のNTChemインプット作成補助ツール
- 全系Tinkerインプット、全系XMol XYZファイル、MDパラメータをユーザで準備し、QM領域を指定してNTChemのインプットの一部を作成
- 対話形式で処理していくので、本マニュアル後半の例を参照
  
- スクリプトファイルに関してはQM/MM計算などのマニュアル参照

2

## 予備知識: QM/MM法

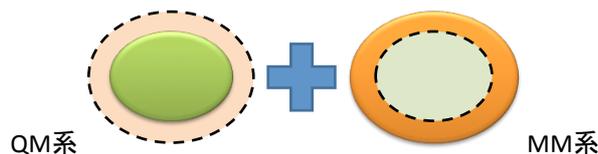


### • QM/MM法

- 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

**注: QM/MM法ではlink atomは非対応**

3

## 予備知識: ONIOM法

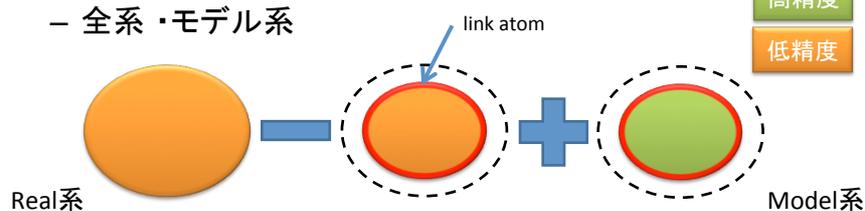


### • ONIOM法

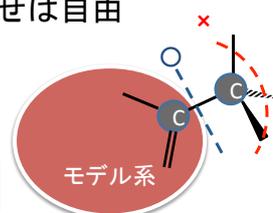
- 全系・モデル系

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
  - 水素で置換・結合長は元の何倍か指定



**注: モデル原子1つにつきlink atomは最大1個**

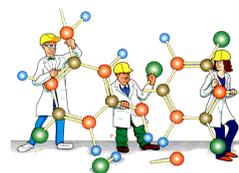
4

## 予備知識: NTChemでのハイブリッド法の実装



### • 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
- version 6.2を前提
- 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

5

## 予備知識: ファイルの種類と拡張子



### • Tinkerのインプットファイル

- Tinker内での標準拡張子 .xyz
- 本マニュアル内では拡張子 .tin とする

1362	...	原子数							
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	-3.944300	-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			
:									
	(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

6

## 予備知識: ファイルの種類と拡張子



### • 分子座標ファイル

- XMol XYZ file format
- 本マニュアル内では拡張子 .xyz として扱う

```

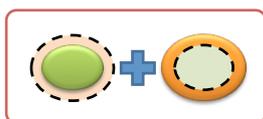
1362      ... 原子数
(コメント行)
C      -0.618857    0.280455    0.694444
H      -1.025636    0.601040    1.653358
O      -1.298259    0.066638   -0.305014
N      0.696627    0.165599    0.657239
H      1.166436   -0.119781   -0.198998
H      1.218847    0.419401    1.501609
O      -3.834754   -3.944380   -7.301575
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
  
```

7

## 予備知識: 各手法で必要なインプット



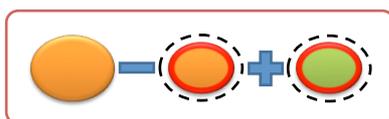
### • QM/MM法



\${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

8

## 予備知識: インプットの概要



NTPrepで作成  
Tin2QMMMで作成

- 全体インプットと個別インプット**

**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
```

```
&Control
Name='alice.MM',/

&Tinker
(計算条件)
/

Geom_ONIOM
(部分構造指定)
:
:
End

TinXYZ
(分子の結合情報指定)
:
:
End
```

9

## 概要: インプット作成手順



- 全系のTinkerインプットファイルを作成**
  - この部分は本マニュアルの範囲外
  - Tinkerマニュアル参照のこと
- 系、計算レベル毎のインプットの作成**
  - 計算条件などはNTPrepで作成
  - 構造指定は全系TinkerインプットからTin2QMMMで作成**
  - 上記二つを結合して各インプットファイルを作成

**赤字部分がTin2QMMM.exeの担当範囲**

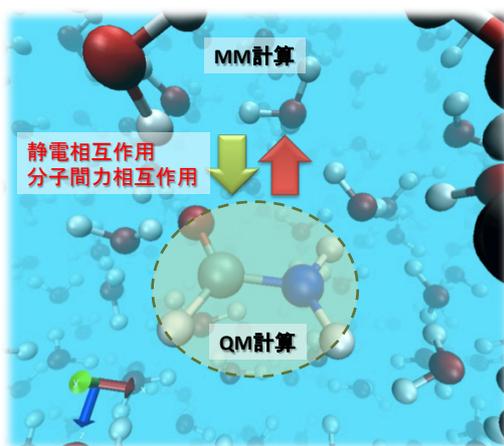
10

## 1. QM/MM法での使用例



### • 例: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



11

## QM/MM法の例(1)



### • 利用するファイルの準備

- 全系Tinkerインプット : formamide+water.tin
- 全系XMolファイル : formamide+water.xmol.xyz
- 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
- 作業用ディレクトリに移動

12

## QM/MM法の例(2)



### • 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  
 QM/MMでは 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  
 全系の原子数は1362原子  
 453分子(ホルムアミド+水452個)

(\*) ホルムアミドに対応する  
 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

```
>$ ${NTChem}/util/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 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)
```

(\*)番号指定は"1 2 3 4" などのように一つずつ指定可能。I~Jまでの範囲指定は"-I J"で指定。" 0"で終了

13

## QM/MM法の例(3)



### • 生成されるファイルの内容

赤字のベースネームは  
 ユーザ指定

#### – 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、NTPrepで利用

#### – DLFindFixXYZ.txt

- micro iterationを利用した最適化をする際に必要な情報

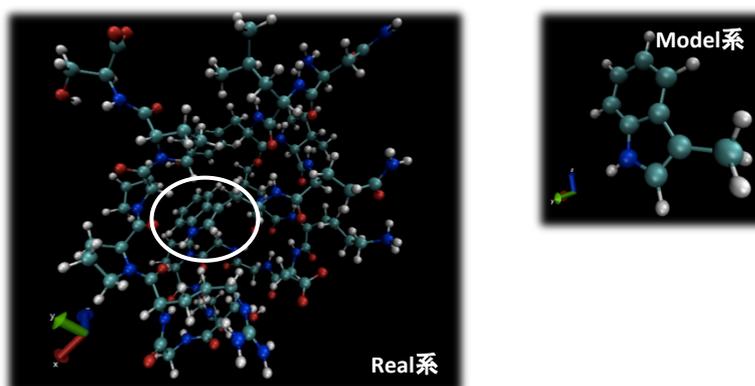
14

## 2. ONIOM(QM/MM)法での使用例



### • 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



15

## ONIOM(QM/MM)法の例(1)



### • 利用するファイルの準備

- 全系Tinkerインプット : TrCage\_1L2Y.tin
- 全系XMolファイル : TrCage\_1L2Y.xmol.xyz
- MMパラメータ : oplsaa.prm

- 作業用ディレクトリを作成・ファイルをコピー
- 作業用ディレクトリに移動

16

## ONIOM(QM/MM)法の例(2)



### • 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

<p>Tin2QMMM.exeを実行 ONIOM(QM/MM)では 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)</p> <p>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</p> <p>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</p> <p>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</p>	<pre>&gt;&gt; \${NTChem}/util/Tin2QMMM.exe Select calculation type [ 1:ONIOM(QM/MM) 2:QM/MM ] &gt;&gt; 1 Enter tinker param file &gt;&gt; opl1saa.prm Enter tinker input file &gt;&gt; TrCage_1L2Y.tin NAtom = 304 NFrag = 1 &gt;&gt; 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 &gt;&gt; exam02 NOTICE!: Please change hydrogen atom type manually  &gt;&gt; ls DLFindFixXYZ.txt TrCage_1L2Y.tin TrCage_1L2Y.xml.xyz exam02.ONIOM.G1 exam02.ONIOM.HM exam02.ONIOM.HM.Model1.xyz exam02.ONIOM.LM exam02.ONIOM.LR opl1saa.prm          (赤字部分を入力)</pre>
--	---

17

## ONIOM(QM/MM)法の演習(6)



### • 生成されるファイルの内容

赤字のベースネームは  
ユーザ指定

- 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.Model1.xyz
  - モデル系の構造を含むXMol XYZファイル、NTPrepで利用
- exam02.ONIOM.LM
  - Low-Model系用の構造指定: Geom\_ONIOM + TinXYZ
  - 挿入時は"ChangeToH"となっている部分を変更
- exam02.ONIOM.LR
  - Low-Real系用の構造指定: Geom + TinXYZ
- DLFindFixXYZ.txt

18