

Struktura vody okolo kulatého rozpuštěnce

1/5
pch05

Úkol:

Studujte strukturu vody okolo sféricky symetrického rozpuštěnce

Modely:

voda: SPC/E (klasický model, Simple Point Charge/Extended)

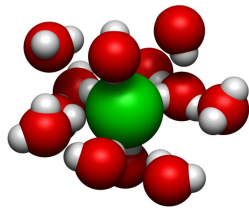
rozpuštěnec: vzácné plyny: Lennard-Jones

ionty: Lennard-Jones + náboj

fulleren: CHARMM21



Evropský sociální fond
„Praha & EU: Investujeme do vaší budoucnosti“
Inovace předemtu Počítačová chemie je podporována
projektem CHEMnote (Inovace bakalářského studijního
programu Chemie – moderní vzdělávání podpořené
použitím notebooků – CZ 2.17/3.1.00/33248)
v rámci Operačního programu PRAHA – ADAPTABILITA



Postup:

- připravte (metodou náhodného střílení) konfiguraci 1 molekuly rozpuštěnce v cca 200 molekulách vody
- zrovnovázněte
- simulujte za konstantní teploty a tlaku
- zobrazte radiální distribuční funkce
- pozorujte orientaci molekul okolo rozpuštěnce
- pozorujte síť vodíkových vazeb

B01-NVT-start.sh

2/5
pch05

- Nejprve si vyberte molekulu rozpuštěnce:
 - MobaXterm: označte levým tlačítkem myši (též doubleclick) a stiskněte kolečko
 - PuTTY: označte levým tlačítkem myši (též doubleclick) a stiskněte pravé tlačítko
 - Zkopírujte do clipboardu pomocí `[Ctrl-Shift-C]` a vložte pomocí `[Ctrl-Shift-V]` `[Ctrl-C]`, `[Ctrl-V]` v terminálu znamenají něco jiného!
 - Můžete také přesně opsat (bez mezer!)
- Odešlete ke zpracování pomocí `[Enter]`

Endofullereny jsou větší a bude použito víc molekul vody, simulace bude pomalejší.

Skript `B01-NVT-start.sh` provede následující akce:

1. Vygeneruje soubor se silovým polem `ff.ble`.
2. Vygeneruje počáteční konfiguraci náhodným střílením s omezením překryvů.
3. Rychle zrelaxuje (krátká konstanta termostatu) při nižší teplotě a NVT (pokud by se použilo NPT, box by se mohl příliš nafouknout).

Ignorujte `WARNING " *** A displacement in 1 MD step was reduced ..."`

- Podívejte se na soubory `solution.def` a `solution.get` (z `mc` pomocí `[F3]`)
- Po skončení simulace se zobrazí konvergenční profily. Koncová teplota by měla být pod 320 K.

B02-michani-NVT.sh

3/5
pch05

Poté, co se v kroku `B01-NVT-start.sh` odstraní překryvy molekul, možno přepnout na NPT a zrovnovážit systém. Vstupní data pro tento krok obsahují navíc parametr barostatu, `tau.P=2` (relaxační čas v ps).

Po skončení se zobrazí konvergenční profily. Podle jejich průběhu se rozhodnete, zda pokračovat v míchání.

B03-NPT-simulace.sh

Nastartuje delší simulaci (produktivní běh) s delší konstantou barostatu pro menší ovlivnění systému (`tau.P=5`).

B04-analyza-vysledku.sh

4/5
pch05

Popis grafů se zobrazí kliknutím pravou myší. Levou myší si lze zvětšit část grafu, číslo se vypíše do okna terminálu po kliknutí levou myší.

- Stanovte maxima na křivkách:
 - pro kation: rozpuštěnec-O
 - pro anion: rozpuštěnec-H.
- Stanovte minimum na křivce H-O RDF (budete potřebovat pro zobrazení solvatační slupky).
- Zobrazte running coordination number (cumulative radial distribution function) rozpuštěnec-O, příp. rozpuštěnec-H a stanovte počet molekul vody v první slupce.
Rada: Levou myší „vyříznete“ část pro zvětšení, zpátky se vrátíte pomocí `[init]` nebo `[k]`.

B05-solvatacni-slupka.sh

5/5
pch05

Zobrazí okolí rozpuštěnce. Pokud zadáte vzdálenost O-H, zobrazí se všechny vazby s touto vzdáleností nebo menší zeleně.

Lze také použít `H-bonds`, `+`, `-` nebo z klávesnice `[Ctrl-H]`, `[H]`, `[h]`

Po provedení všech cvičení: úklid

- Smažte svou složku pomocí `[F8]`
- **Pečlivě zkontrolujte, zda nemažete složku někoho jiného!**
- Vyskočte z Midnight Commanderu (`[F10]`) a shellu (exit `[Enter]`)

