Struktura vody okolo kulatého rozpuštěnce

Úkol:

Studujte strukturu vody okolo sféricky symetrického rozpuštěnce

Modely:

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

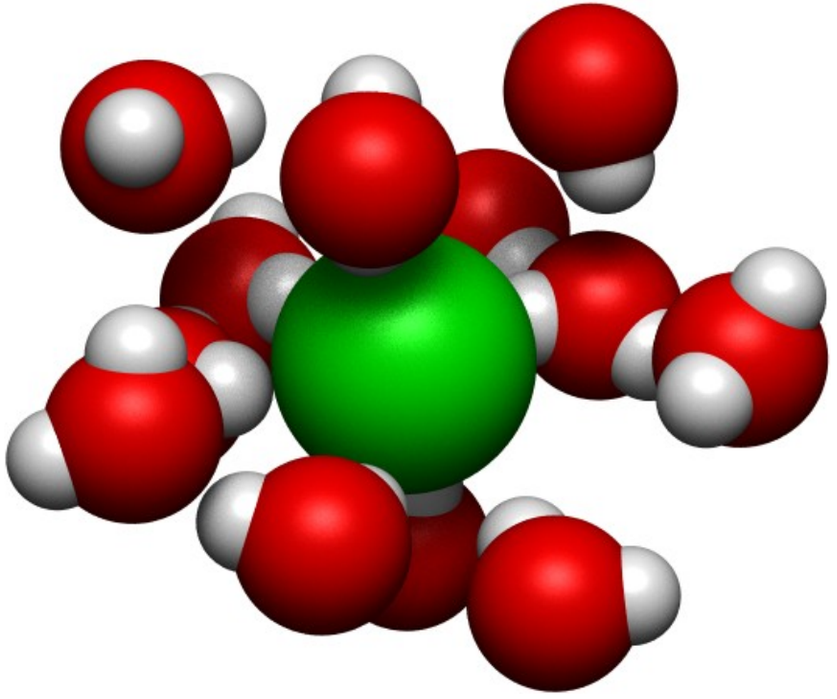
rozpuštěnec: vzácné plyny: Lennard-Jones
ionty: Lennard-Jones + náboj
fulleren: CHARMM21

Evropský sociální fond
„Praha & EU: Investujeme do vaší budoucnosti“

Inovace předmětu 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
- zrovnovážněte
- simulujte za konstantní teploty a tlaku
- zobrazte radiální distribuční funkce
- pozorujte orientaci molekul okolo rozpuštěnce
- pozorujte síť vodíkových vazeb



B01-NVT-start.sh

- 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 konstata 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

Poté, co se v kroku `B01-NVT-start.sh` odstranily překryvy molekul, možno přepnout na NPT a zrovnovážnit 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

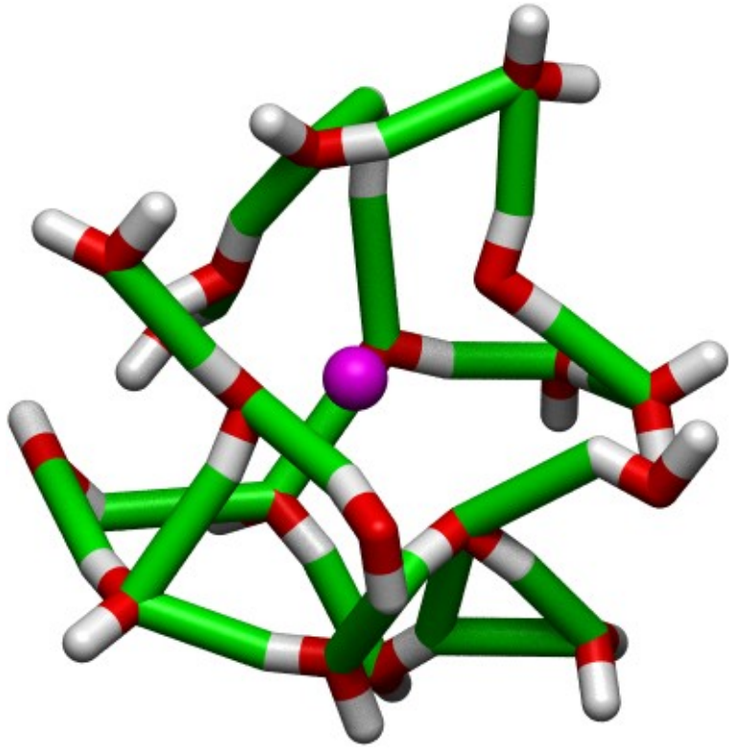
Popis grafů se zobrazí kliknutím pravou myší. Levou myší si lze zvětšit část grafu, číslo se vypíše do okna terminálu po kliknutí levou myší.

- 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

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)