

Úkol:

Studujte strukturu vody okolo sféricky symetrického rozpuštěnce

Modely:

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

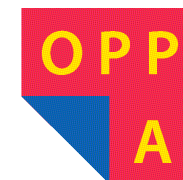
rozpuštěnec: vzácné plyny: Lennard-Jones

ionty: Lennard-Jones + náboj

fulleren: CHARMM21

Postup:

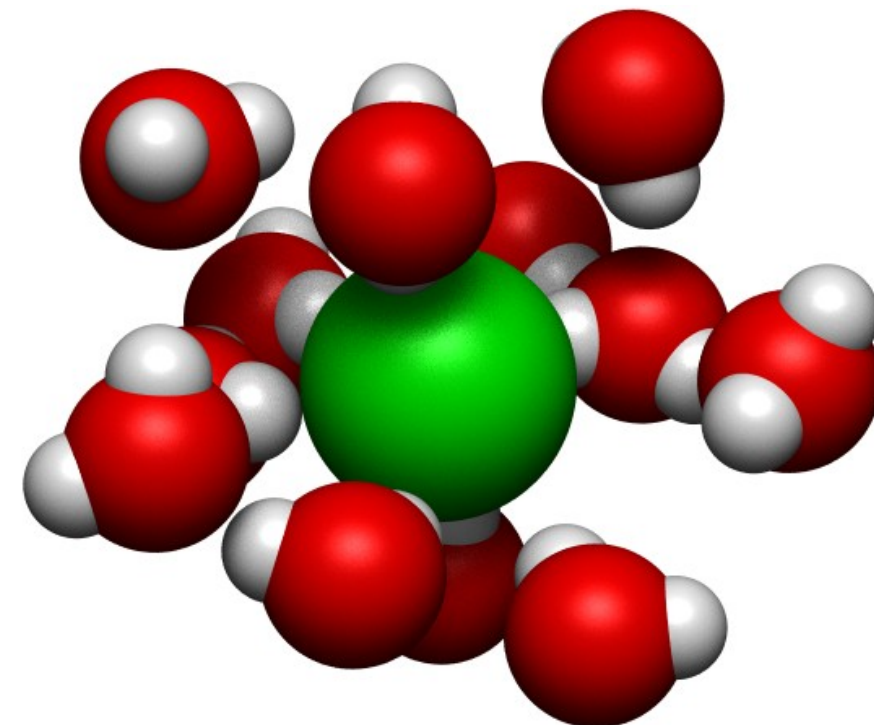
- připravte (metodou náhodného střílení) konfiguraci 1 molekuly rozpuštěnce v cca 200 molekulách vody
- zrovnovážíte
- simulujte za konstantní teploty a tlaku
- zobrazte radiální distribuční funkce
- pozorujte orientaci molekul okolo rozpuštěnce
- pozorujte síť vodíkových vazeb



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.



- 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.

Poté, co se v kroku `B01-NVT-start.sh` odstranily 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`).

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`.

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`)

