

1 Simulazione (N,V,T) in solvente

1. preparazione dell'input

```
&SIMULATION
...
THERMOS
  cofm 30.0
  solute 30.0
  solvent 30.0
  temp_limit 1000.
END
&END
```

2. verifica delle proprietà del sistema

(a) energie

- i. L'energia del sistema, $EREAL$, non è costante; è costante l'Hamiltoniano di Nosé-Hoover $ETOT = EREAL + KINH + HPOT$

$$H_{NH} = \sum \frac{p_i^2}{2m_i} + U(\mathbf{r}) + \frac{p_\eta^2}{2Q} + \frac{L}{\beta}\eta \quad (1)$$

$$EREAL = \sum \frac{p_i^2}{2m_i} + U(\mathbf{r}) \quad (2)$$

$$KINH = \frac{p_\eta^2}{2Q} \quad (3)$$

$$HPOT = \frac{L}{\beta}\eta \quad (4)$$

- ii. confrontare l'andamento e soprattutto le fluttuazioni dell'energia totale nell'insieme NVT con quella dell'insieme NVE con medesimo input
- iii. vedere la dipendenza del risultato dal valore delle "masse" del termostato
- iv. verificare l'entità delle fluttuazioni dell'energia cinetica

(b) RMSD

confrontare l'andamento e il valore finale di RMSD nell'insieme NVT con quelle dell'insieme NVE con medesimo input

2 Simulazione di Dinamica Molecolare Guidata: chignolina in acqua nell'insieme (N,V,T).

2.1 collegarsi all'host

ssh -X guest@clxx.sm.chim.unifi.it

con $xx = 11, \dots, 18$

2.2 copiare i file

- creare una directory di lavoro (es. ~/orac/) e portarcisi sopra.

```
mkdir ~/orac/  
cd ~/orac/
```

- cp -R ~signo/orac/chigno-eze .
- cp -R ~signo/orac/lib .
- copiare le configurazioni di partenza:

```
- cd chigno-eze;  
- cp ~signo/orac/chigno/lms/???yy . (yy=11,22, ...,88)
```

2.3 lanciare una serie di simulazioni di test:

```
master.sh &
```

lancia una serie di simulazioni in cascata; la durata di ciascuna simulazione è molto piccola, per fare un primo test

finita la serie, verificare che sono state eseguite le dinamiche guidate, ad es:
plot xx*.wrk -2,7

2.4 editare il file modello m_.in e lanciare la serie di simulazioni finale:

Modificare i tempi di equilibrizzazione e di acquisizione in m_.in