

Laboratorio 5 - (24 aprile 2007)

1 Simulazione (N,V,E) in solvente partendo da configurazione elongata

- Ricordare che *nel vuoto* la molecola, a partire da una configurazione elongata ($L = 20$; file `../pdb/a1a20.pdb`), si elicizza in $\simeq 30 ps$
- Vogliamo vedere che in solvente che l'elicizzazione è più lenta
- Lanciamo la simulazione in solvente e verifichiamo la variazione di struttura con `vmd`

2 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. adesso `EREAL` non è costante; è costante $ETOT = EREAL + HPOT$ (`HPOT`=energia del termostato)
- ii. infatti `EREAL` oscilla un po'

3 Simulazione (N,p,T) in solvente

1. preparazione dell'input

```
&SIMULATION
...
THERMOS
  cofm 30.0
  solute 30.0
  solvent 30.0
  temp_limit 1000.
END
ISOSTRESS PRESS-EXT 0.1 BARO-MASS 10.0 COMPR 5.3e-4
&END
```

2. verifica delle energie

la quantità conservata adesso è $ETOT = EREAL + HPOT + PV$

3. verifica di altre proprietà

- (a) esaminare l'output; le proprietà istantanee e le medie (esclusa equilibrazione) sono stampate a intervalli regolari. Osservare
- i. Volume
 - ii. Pressione
- (b) si può creare un file con l'evoluzione di una proprietà come il volume con il comando
- ```
post-out P="Volume TotPre" Ala.out
```
- che può poi essere diagrammato con `gnuplot`