Corso di Laurea Specialistica in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2007/2008

Laboratorio 6 - (19 maggio 2008)

---

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 $ETOT = EREAL + KINH + HPOT$

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

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

$$KINH = \frac{p_\eta^2}{2Q} \tag{3}$$

$$HPOT = \frac{L}{\beta}\eta \tag{4}$$

      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@cl*xx*.sm.chim.unifi.it

con $xx = 11, \ldots, 18$

2.2 copiare i file

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

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

- `cp -R ~signo/orac/chigno-ese .`
- `cp -R ~signo/orac/lib .`
- copiare le configurazioni di partenza:
  - `cd chigno-ese;`
  - `cp ~signo/orac/chigno/1ns/???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 equilibrazione e di acquisizione in m_.in