Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche, Curriculum "Struttura, dinamica e reattività chimica"

Struttura e Dinamica Molecolare di Sistemi Biologici - 2009/2010

Laboratorio 3 - (20 novembre 2009)

---

1 simulazione di chignolina a 300 K nel vuoto (E,V=cost).

1. portarsi in `~/orac/data`; creare un input di ORAC (es. `chigno.in`) per una simulazione:

   (a) nel potenziale si omette il cutoff (è definito nel blocco `&INTEGRATOR`), e si levano i C-H, N-H, O-H stretch

   ```
   &POTENTIAL
      [...]
      #  CUTOFF 100.
      STRETCHING HEAVY
   &END
   ```

   (b) inserire il blocco &INTEGRATOR e modificare il blocco &SIMULATION

   ```
   &SIMULATION
      MDSIM
      TEMPERATURE 300.0 40.0
   &END
   &INTEGRATOR
      TIMESTEP 2.0
      MTS_RESPA
        step intra 2
        step intra 2
        step nonbond 1 100.
        test_times OPEN energie
      END
   &END
   ```

   (c) modificare il blocco &RUN inserendo un ciclo di equilibratura appropriato:

   ```
   &RUN
      CONTROL 0
      REJECT 50000.0
      TIME 30000.0
      PRINT 100.0
      PROPERTY 1000.0
   &END
   ```

2. lanciare il programma con output sullo schermo

   orac < chigno.in

3. lanciare il programma con output su file

   orac < chigno.in > chigno.out

---

2 Chignolina: simulazione (N,V,T) nel vuoto

1. preparazione dell'input; si deve solo modificare il blocco `&SIMULATION`

```
&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