

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