

SIMULATION OF WATER PERMEATION IN A CNT MEMBRANE

8/May/2025

The objective is to perform an MD simulation of water permeation across a CNT membrane, starting from a given initial configuration.

NOTES:

1 - Començeu creant un **Repository** al vostre Github, per aquesta pràctica no us serà suficient amb una carpeta dins del repositori que ja heu fet servir al llarg del curs. Pujeu tots els vostres fitxers obtinguts avui, endreçats en carpetes al repositori.

2.- **Utilitzeu el full de resum/esquema** que heu preparat per aquesta sessió per a guiar-vos en com preparar i executar simulacions amb NAMD.

Tasques a realitzar durant la sessió:1. Preparació:

- Descarregueu els fitxers amb l'estructura inicial amb aigua i una membrana de CNTs de la carpeta "Exercise" disponible aquí:

https://github.com/jfaraudo/Water_in_CNTs_Exercises

- Obriu l'estructura amb VMD per visualitzar quin aspecte té i assegureu-vos que enteneu què conté. Comproveu que les dimensions del sistema en x,y i z corresponen amb la descripció que es dona al GitHub.

- Obriu el fitxer pdb amb un editor de text. Veureu que hi ha una columna (l'anomenat camp "beta") que és sempre zero per l'aigua i 1 pels carbonis. Recordeu per a què servia? (pista: sessió de simulació interactiva d'aigua en un nanotub). Al VMD el valor de "beta" es pot visualitzar fàcilment anant a Graphics – Representations (finestra Graphical Representations) i per la selecció que tingueu (per exemple, tot el sistema) seleccioneu "beta" pel coloring method.

2. Minimització d'energia i Equilibrat

Feu una minimització d'energia **sense deixar res d'espai buit al sistema**, que la caixa de simulació contingui exactament les coordenades inicials del sistema. **Assegureu-vos de mantenir fixos els àtoms de carboni dels CNTs tant a la minimització d'energia com a totes les simulacions.**

La minimització d'energia serà relativament ràpida. Comproveu que no teniu errors. Si acaba sense errors, prepareu ja l'equilibrat sense analitzar encara el resultat de la minimització (com l'equilibrat pot trigar uns 15-20 minuts, ja analitzareu els resultats de la minimització mentre es fa l'equilibrat). En aquest cas, feu una simulació d'equilibrat **a una temperatura de 300 K i fixant una pressió de 1 atm només en la direcció z** (*perquè no volem aplicar pressió en x e y??*). Un temps de simulació de 1 nanosegon com en l'exemple de la proteïna serà suficient.

3. Anàlisi de resultats

Mentre s'executa l'equilibrat, podeu començar a analitzar els resultats de la minimització d'energia.

- Representeu l'energia potencial i comproveu que efectivament es redueix. Podeu extreure l'energia utilitzant VMD com aquests dies o bé extreure les dades del fitxer .log mitjançant el programa python extract_log.py (disponible a https://github.com/jfaraudo/Running_NAMD) que extreu les dades més importants del fitxer .log a un fitxer de dades representable amb gnuplot, excel, etc.

- Visualitzeu els canvis de coordenades durant la minimització amb VMD. Què ha passat exactament? El sistema encaixa correctament amb les mides de la caixa de simulació que heu especificat (pista: a la pantalla de Graphical representations hi ha la pestanya “Periodic” que us pot ser útil).

- Analitzeu els resultats de l'equilibrat. Si no ha acabat, podeu començar l'anàlisi igualment i recarregar posteriorment les dades actualitzades per a completar-lo. Comenceu per a visualitzar la trajectòria de la simulació amb VMD. Quines particularitats veieu? Intenteu representar de forma diferent alguna molècula d'aigua en concret per a poder veure què fa.

- Per a comprovar que el sistema s'ha estabilitzat, representeu la temperatura i l'energia potencial (**perquè no ens interessa l'energia total??**). Com abans, les podeu extreure amb VMD o python.

- Com hem fixat també la pressió en la direcció z, el sistema haurà canviat de mida en aquesta direcció però no en les altres. L'evolució de la mida del sistema la teniu al fitxer amb extensió .xst (graficable amb gnuplot) i la mida final al fitxer .xsc. Comproveu que la mida del sistema s'ha estabilitzat.

- Haureu vist que han entrat molècules d'aigua dins dels nanotubs. Per a comprovar que efectivament el nombre de molècules s'ha estabilitzat, adapteu el programa python que vam utilitzar en el seu moment per a comptar molècules d'aigua dins de nanotubs. Representeu el resultat i comproveu que durant aquest temps s'ha estabilitzat.

4. Simulació de No Equilibri

En equilibri, no hi ha flux global d'aigua. Per a poder tenir un cabal d'aigua creuant, cal aplicar una diferència de pressions. Per a poder fer aquesta mena de simulacions de no-equilibri, podem partir del sistema equilibrat a T,p i aplicar-hi una diferència de pressions entre les dues bandes de la membrana aplicant una força externa. Entre els scripts de producció de NAMD a https://github.com/jfaraudo/Running_NAMD trobareu un que permet aplicar forces externes, aplicant una força sobre les molècules d'aigua que estiguin en una regió donada.

Assegureu-vos de manetnir fixos els àtoms de carboni dels CNTs.

Baixeu-lo, reviseu el seu contingut i adapteu-lo per a continuar la simulació equilibrada aplicant una força sobre les molècules d'aigua. Executeu una simulació curta de no-equilibri (100 ps o 200 ps).

Anàlisi:

- Visualitzar la trajectòria amb VMD. Es veuen creuar molècules en ambdós sentits o només en un?
- Calcular el flux d'aigua que creua en cada sentit la membrana. Comparar-lo amb el que s'obté en el cas d'equilibri.