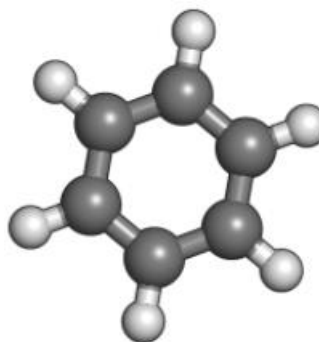


Exercicio 1

```

; GENERATED BY LigParGen Server
; Jorgensen Lab @ Yale University
;
[ atomtypes ]
opls_804 C804 12.0110 0.000 A 3.55000E-01 2.92800E-01
opls_803 C803 12.0110 0.000 A 3.55000E-01 2.92800E-01
opls_811 H811 1.0080 0.000 A 2.42000E-01 1.25520E-01
opls_809 H809 1.0080 0.000 A 2.42000E-01 1.25520E-01
opls_810 H810 1.0080 0.000 A 2.42000E-01 1.25520E-01
opls_805 C805 12.0110 0.000 A 3.55000E-01 2.92800E-01
opls_802 C802 12.0110 0.000 A 3.55000E-01 2.92800E-01
opls_806 H806 1.0080 0.000 A 2.42000E-01 1.25520E-01
opls_808 H808 1.0080 0.000 A 2.42000E-01 1.25520E-01
opls_800 C800 12.0110 0.000 A 3.55000E-01 2.92800E-01
opls_807 H807 1.0080 0.000 A 2.42000E-01 1.25520E-01
opls_801 C801 12.0110 0.000 A 3.55000E-01 2.92800E-01
[ moleculetype ]
; Name nrexcl
UNK 3
[ atoms ]
; nr type resnr resid atom gnrc charge mass
1 opls_800 1 UN C00 1 -0.1474 12.0110
2 opls_801 1 UN C01 1 -0.1476 12.0110
3 opls_802 1 UN C02 1 -0.1474 12.0110
4 opls_803 1 UN C03 1 -0.1472 12.0110
5 opls_804 1 UN C04 1 -0.1470 12.0110
6 opls_805 1 UN C05 1 -0.1478 12.0110
7 opls_806 1 UN H06 1 0.1474 1.0080
8 opls_807 1 UN H07 1 0.1474 1.0080
9 opls_808 1 UN H08 1 0.1474 1.0080
10 opls_809 1 UN H09 1 0.1474 1.0080
11 opls_810 1 UN H0A 1 0.1470 1.0080
12 opls_811 1 UN H0B 1 0.1470 1.0080
[ bonds ]
; nr type 1 2 3
2 1 1 0.1400 392459.200
3 2 1 0.1400 392459.200
4 3 1 0.1400 392459.200
5 4 1 0.1400 392459.200
6 1 1 0.1400 392459.200
7 1 1 0.1080 387105.600
8 2 1 0.1080 387105.600
9 3 1 0.1080 387105.600
10 4 1 0.1080 387105.600
11 5 1 0.1080 387105.600
12 6 1 0.1400 392459.200
6 5 1 0.1400 392459.200
[ angles ]
; ai aj ak funct c0 c1 c2 c3 c4 c5
1 2 3 1 120.000 527.184
2 3 4 1 120.000 527.184
3 4 5 1 120.000 527.184
2 1 6 1 120.000 527.184
2 1 7 1 120.000 292.880
1 2 8 1 120.000 292.880
2 3 9 1 120.000 292.880
3 4 10 1 120.000 292.880
4 5 11 1 120.000 292.880
1 6 12 1 120.000 292.880
6 5 11 1 120.000 292.880
6 1 7 1 120.000 292.880
5 6 12 1 120.000 292.880
5 4 10 1 120.000 292.880
1 8 5 1 120.000 527.184
4 3 9 1 120.000 292.880
4 5 6 1 120.000 527.184
3 2 8 1 120.000 292.880
[ dihedrals ]
; IMPROPER DIHEDRAL ANGLES
; ai aj ak al funct c0 c1 c2 c3 c4 c5
12 5 6 1 5 4 180.000 10.460 2
11 5 4 6 4 180.000 10.460 2
10 4 3 5 4 180.000 10.460 2
9 3 2 4 4 180.000 10.460 2
8 2 1 3 4 180.000 10.460 2
7 1 2 6 4 180.000 10.460 2
[ dihedrals ]
; PROPER DIHEDRAL ANGLES
; ai aj ak al funct c0 c1 c2 c3 c4 c5
4 3 2 1 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
5 4 3 2 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
6 1 2 3 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
4 5 6 1 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
6 5 4 3 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
5 6 1 2 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
12 6 1 2 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
7 1 6 5 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
11 5 6 1 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
10 4 5 6 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
11 5 4 3 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
12 6 5 4 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
9 3 2 1 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
7 1 2 3 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
8 2 1 6 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
10 4 3 2 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
8 2 3 4 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
9 3 4 5 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
12 6 1 7 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
12 6 5 11 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
9 3 2 8 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
8 2 1 7 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
11 5 4 10 3 30.334 0.000 -30.334 -0.000 -0.000 0.000
[ pairs ]
; ai aj 1
1 4 1
2 5 1
3 6 1
3 7 1
1 9 1
5 7 1
4 8 1
2 10 1
1 11 1
6 8 1
5 9 1
3 11 1
2 12 1
7 8 1
6 10 1
4 12 1
8 9 1
9 10 1
7 12 1
10 11 1
11 12 1

```



Podemos observar que são geradas 7 caracterizadores da topologia: atomtypes, moleculetype, atoms, bonds, angles, dihedrals (improper e proper angles) e os pairs.

Em “atomtypes” são declarados os tipos e atributos de todos os átomos presentes na molécula, massa molar de cada átomo, sigma e epsilon, onde parece não haver inconsistências.

Em “moleculetype” é declarado o nome da molécula e o parâmetro “nrexcl” que por esta molécula ser um diédrico que não devem ser distribuídos por “nonbonded interactions” está definido a 3. Não parece haver inconsistências.

Em “atoms” mais uma vez são associadas à massa, ao tipo e ao átomo a carga onde parece haver algum tipo de redundância, que poderia ser evitada por atribuir a carga apenas ao átomo, reduzindo assim o tamanho do ficheiro. Os átomos são numerados por tipo.

Em “bonds” é estabelecida as ligações entre átomos. Não parece haver inconsistências.

Em “angles” são definidos os ângulos entre 3 átomos diferentes. Parece haver inconsistência pois alguns ângulos em “c1” excedem os 360°.

Em “dihedral” são definidos os ângulos de torção pelos “Proper Dihedral Angles” e de “Improper Dihedral Angles” os ângulos de átomos fora do plano. Onde apresenta alguma inconsistência pois a molécula na visualização do LipParGen aparenta ter uma estrutura plana, no entanto os ângulos entre os mesmos são diferentes de 0.

Em “pairs” é apresentada as ligações entre pares de átomos. Não parece haver inconsistências.

Podemos então concluir que a representação final da molécula não apresenta inconsistências, relativamente a forma, no entanto estas existem e manifestam se a níveis como os descritos acima (Raio atômico, e ângulos dos Diedros, etc.).

Exercício 2

Definição do “oplsaa.ff/forcefield.itp”:

```
#define _FF_OPLS
#define _FF_OPLSAA

; This force field uses a format that requires Gromacs 3.1.4 or later.
;
; References for the OPLS-AA force field:
;
; MCC
; W. L. Jorgensen, D. S. Maxwell, and J. Tirado-Rives,
; J. Am. Chem. Soc. 118, 11225-11236 (1996).
; W. L. Jorgensen and N. A. McDonald, Theochem 424, 145-155 (1998).
; W. L. Jorgensen and N. A. McDonald, J. Phys. Chem. B 102, 8049-8059 (1998).
; R. C. Rizzo and W. L. Jorgensen, J. Am. Chem. Soc. 121, 4827-4836 (1999).
; M. L. Price, D. Ostrovsky, and W. L. Jorgensen, J. Comp. Chem. (2001).
; E. K. Watkins and W. L. Jorgensen, J. Phys. Chem. A 105, 4118-4125 (2001).
; G. A. Kaminski, R.A. Friesner, J. Tirado-Rives and W.L. Jorgensen, J. Phys. Chem. B 105, 6474 (2001).
;

[ defaults ]
; nbfunc comb-rule gen-pairs fudgeLJ fudgeQQ
1 3 yes 0.5 0.5

#include "ffnonbonded.itp"
#include "ffbonded.itp"
#include "gbsa.itp"
```

Exemplo da definição de um átomo (ffnonbonded.itp):

```
[ atomtypes ]
; full atom descriptions are available in ffoplsaa.atp
; name bond_type mass charge ptype sigma epsilon
opls 001 C 6 12.01100 0.500 A 3.75000e-01 4.39320e-01 ; SIG
```

Exemplo da definição de um átomo (benzeno.itp):

```
[ atomtypes ]
opls 804 C804 12.0110 0.000 A 3.55000E-01 2.92880E-01
```

Em comparação, à primeira vista, o “Force Field” do OPLS parece apenas ter em comum as configurações “default”, mas investigando mais um pouco o conteúdo

que queremos analisar encontra-se dentro dos ficheiros “*.itp” incluídos no script. Neste caso apenas queremos analisar o “nonbounded” dado que o “nrexcl” é 3.

Observamos então que este campo de forças contém várias moléculas já predefinidas as quais são caracterizadas pelos seguintes atributos:

- name
- bond_type
- mass
- charge
- ptype
- sigma
- epsilon

onde percebemos que todas estas definições também são feitas na tabela “atomtypes” gerada pelo LigParGen.

Exercício 3

```
Steepest Descents:
Tolerance (Fmax) = 1.00000e+01
Number of steps = 10000
Step= 0, Dmax= 1.0e-02 nm, Epot= 3.32958e+01 Fmax= 2.26666e+02, atom= 3
Step= 6, Dmax= 3.1e-04 nm, Epot= 3.31289e+01 Fmax= 1.02847e+02, atom= 6
Step= 8, Dmax= 1.9e-04 nm, Epot= 3.30973e+01 Fmax= 7.04686e+01, atom= 6
Step= 10, Dmax= 1.1e-04 nm, Epot= 3.30856e+01 Fmax= 5.52238e+01, atom= 2
Step= 12, Dmax= 6.7e-05 nm, Epot= 3.30788e+01 Fmax= 2.37724e+01, atom= 6
Step= 14, Dmax= 4.0e-05 nm, Epot= 3.30766e+01 Fmax= 2.07783e+01, atom= 2
Step= 16, Dmax= 2.4e-05 nm, Epot= 3.30749e+01 Fmax= 1.65470e+01, atom= 9
Step= 17, Dmax= 2.9e-05 nm, Epot= 3.30738e+01 Fmax= 1.62594e+01, atom= 3
Step= 18, Dmax= 3.5e-05 nm, Epot= 3.30735e+01 Fmax= 2.44177e+01, atom= 4
Step= 19, Dmax= 4.2e-05 nm, Epot= 3.30734e+01 Fmax= 3.00884e+01, atom= 5
Step= 21, Dmax= 2.5e-05 nm, Epot= 3.30716e+01 Fmax= 8.59737e+00, atom= 7

writing lowest energy coordinates.

Back Off! I just backed up benzeno.gro to ./#benzeno.gro.1#

Steepest Descents converged to Fmax < 10 in 22 steps
Potential Energy = 3.3071648e+01
Maximum force = 8.5973740e+00 on atom 7
Norm of force = 4.8059587e+00

gcq#208: "They're Red Hot" (Red Hot Chili Peppers)
```

A força máxima era 10 kJ/mol/nm, é importante observar que não atingiu os 10000 passo, terminou ao fim de 22 passos, no qual se conclui que a maior força estava no átomo 7 (hidrogénio) com uma força de 8.59737 kJ/mol/nm. Obtemos também o valor de Energia Potencial de 33.071648 kJ/mol, uma força máxima (átomo 7) de 8.597374 kJ/mol/nm e a norma da força de 4.8059587 kJ/mol/nm.