

Simulace methanu ve vodě

Vojtěch Stránský

FJFI

20. dubna 2023

Co potřebujeme k simulaci?

- .pdb methanu
- .rtp methanu
- trochu znalostí
- hodně štěstí

.rtp methanu

```
[ bondedtypes ]
; bonds   angles   dihedrals   impropers   all_dihedrals   nrexcl   HH14   RemoveDih
   1       1       3           1           1               3       1       0

; Methane
[ CH4 ]
[ atoms ]
  C      opls_138    -0.240      1
  H1     opls_140     0.060      1
  H2     opls_140     0.060      1
  H3     opls_140     0.060      1
  H4     opls_140     0.060      1
[ bonds ]
  C      H1
  C      H2
  C      H3
  C      H4
```

.pdb methanu

```
COMPND      METHANE
AUTHOR      GENERATED BY OPEN BABEL 2.3.2
HETATM      1  C   CH4      1      -0.370    0.900    0.000    1.00    0.00      C
HETATM      2  H1  CH4      1       0.700    0.900    0.000    1.00    0.00      H
HETATM      3  H2  CH4      1      -0.727    0.122    0.643    1.00    0.00      H
HETATM      4  H3  CH4      1      -0.727    0.731   -0.995    1.00    0.00      H
HETATM      5  H4  CH4      1      -0.727    1.845    0.351    1.00    0.00      H
END
```

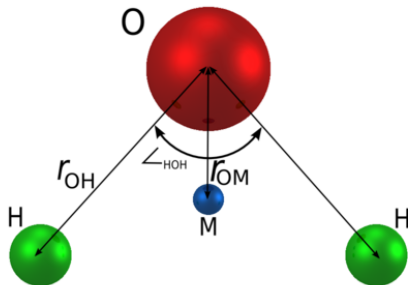
Příprava systému

- `gmx pdb2gmx -f methane.pdb`
- `gmx solvate -cp conf.gro -o conf.gro -cs tip4p -p topol.top -box 2.3 2.3 2.3`

Silové pole a model vody

`pdb2gmx` se ptá na silové pole a model vody. Bylo vybrání pole OPLS a model `tip4pew`.

- čtyřstranný model
- přeparametrizovaný tip4p
- určený pro Evaldovy techniky, proto -Ew



Běh simulace

```
$ gmx grompp -f mdp/min.mdp -o min -pp min -po min
$ gmx mdrun -deffnm min
$ gmx grompp -f mdp/min2.mdp -o min2 -pp min2 -po min2 -c min -t min
$ gmx mdrun -deffnm min2
$ gmx grompp -f mdp/eql.mdp -o eql -pp eql -po eql -c min2 -t min2
$ gmx mdrun -deffnm eql
$ gmx grompp -f mdp/eql2.mdp -o eql2 -pp eql2 -po eql2 -c eql -t eql
$ gmx mdrun -deffnm eql2
$ gmx grompp -f mdp/prd.mdp -o prd -pp prd -po prd -c eql2 -t eql2
$ gmx mdrun -deffnm prd
```

Výsledek

