

Sveučilište u Splitu
Prirodoslovno – matematički fakultet

**Simulacija molekularne dinamike molekule
1-propanol**

Seminarski rad

Mijo Matković

Split, veljača 2021.

Sadržaj

1	Uvod	1
2	Simulacija molekule 1-propanol	3
2.1	Postavljanje simulacijske kutije	3
2.2	Ekvilibriranje sustava	4
3	Analiza rezultata	8
3.1	Radikalna distribucijska funkcija	8
3.2	Autokorelacijska funkcija	11
3.3	Spektralna gustoća	12
4	Zaključak	15

1 Uvod

Računalne simulacije molekularne dinamike važan su alat u proučavanju kompleksnijih fizikalnih sustava. U slučajevima višestetičnih sustava, kada Newtonove jednačbe gibanja nisu prikladne za proučavanje konfiguracija sustava u proizvoljnom vremenskom trenutku, računalne simulacije jedini su način njegove analize. Štoviše, čak za $n = 3$ tijela u sustavu, problem nije analitički rješiv. Taj poznati problem kojim su se bavili fizičari još od srednjeg vijeka (uključujući i samog Newtona) savršen je primjer koji ukazuje na nužnost numeričkih metoda. I za razmjerno jednostavne probleme poput gravitacijske interakcije tri planeta, numeričke metode su, u nedostatku analitičkog rješenja, jedina opcija.

U ovom radu, uz pomoć metoda računalne fizike i molekularne dinamike, proučavamo sustav od 500 molekula propanola. 1-propanol jedan je od alkohola, dan formulom $CH_3CH_2CH_2OH$. Iako se razlikuje od poznatijeg alkohola etanola (koji ima jedan CH_2 lanac manje), koji je primjenu našao u alkoholnim pićima, propanol određenu ulogu ima u farmaceutskoj industriji, te je stoga zanimljivo promatrati njegove karakteristike u određenim uvjetima.

Na početku simulacije određujemo domen problema, tzv. simulacijsku kutiju. Veličinu simulacijske kutije odabirimo se u pažljive proračune na način da je gustoća molekula propanola u simulacijskoj kutiji točno jednaka analitički poznatoj gustoći vode. Nakon postavljanja molekula 1-propanola u simulacijsku kutiju, sustav puštamo do stanja ekvilibracije. Kako bi sustav bio u idealnom stanju za proučavanje njegovih svojstava, potrebno je minimizirati njegovu energiju. Također, potrebno je da sustav dođe u stanje ravnoteže temperature i tlaka. Jednom kada je sustav uravnotežen potrebno je pokrenuti produkcijski *run*, odnosno "*pravu*" simulaciju koja će odrediti sve vrijednosti fizikalnih veličina koje vrijede za uravnoteženi sustav.

Nakon što je produkcijski run izvršen, potrebno je analizirati rezultate. U zasebnom dijelu seminara analiziramo i grafički prikazujemo proizvoljne fizikalne vrijednosti sustava. Te vrijednosti i grafove možemo potom usporediti sa poznatim rezultatima simulacija molekule propanola iz literature, te utvrditi postoje li (i kakva) odstupanja u našem radu od traženih vrijednosti.

Simulaciju u ovom seminarskom radu izvodimo uz pomoć simulacijskog paketa *Gromacs* [1]. Također, seminarski rad je većim dijelom baziran na pomoćnoj skripti *Simulacije molekularne dinamike u programskom paketu Gromacs* ([2]) i *Simulacija sustava u tekućem stanju* ([3]).

U sljedećem odjeljku (**Simulacija molekule 1-propanol**) predstavlja se postavljanje problema. Objašnjen je račun kojim je dobivena veličina sustava koji promatramo (simulacijska kutija) te je objašnjen postupak ekvilibracije sustava u odnosu na temperaturu. Zatim, u odjeljku **Analiza rezultata** grafički prikazujemo rezultate dobivene metodama molekularne dinamike. Posebno prikazujemo rezultate za različite zanimljive fizikalne parametre - radijalnu distribuci-

jsku funkciju, spektralnu gustoću i autokorelacijsku funkciju brzine. Naposljetku, u završnom odjeljku (**Zaključak**) sažeto je rekapituliran seminarski rad. U odjeljku **Literatura** nabrojana je sva literatura korištena u izradi ovog seminarskog rada.

2 Simulacija molekule 1-propanol

2.1 Postavljanje simulacijske kutije

Simulaciju počinjemo sa datotekom 1propUA.pdb. Ta datoteka (koju nisam osobno izradio već je preuzeta kao gotova) sadrži podatke o geometriji molekule, te je kao takva ishodište za ikakav daljni rad na simulaciji molekule. Nakon što je navedena datoteka preuzeta, koristimo je za generiranje topologije molekule. Koristeći *Gromacs* naredbu, uz pomoć navedene datoteke, generirana je datoteka propanol.gro koja sadrži topologiju molekule 1-propanola. Nakon što je generirana molekula propanola, potrebno je odrediti dimenzije simulacijske kutije, odnosno domene našeg prostora.

Neka je x dimenzija brida simulacijske kutije (kocke). Znamo da vrijede relacije

$$\frac{V}{V_m} = \frac{N}{N_a} \quad (2.1)$$

gdje je V volumen prostora, V_m je konstanta koja označava molarni volumen, N broj čestica u volumenu V te N_a Avogadrova konstanta. Budući je u našem slučaju V dan relacijom

$$V = x^3, \quad (2.2)$$

jednadžba (2.1) se može zapisati i u obliku

$$\frac{x^3}{V_m} = \frac{N}{N_a}. \quad (2.3)$$

Sređivanjem prethodne jednadžbe dolazimo do izraza za veličinu brida simulacijske kutije

$$x = \sqrt[3]{\frac{N \cdot V_m}{N_a}} \quad (2.4)$$

Jednadžba (2.4) sadrži sve vrijednosti potrebne za izračun duljine brida simulacijske kutije, osim vrijednosti molarnog volumena. Molarni volumen se računa prema formuli

$$V_m = \frac{M_{1prop}}{\rho_{1prop}} \quad (2.5)$$

gdje su M i ρ molarna masa i gustoća 1-propanola. Uvrštavanjem (2.5) u (2.4) dobivamo

$$x = \sqrt[3]{\frac{N \cdot M_{1prop}}{N_a \cdot \rho_{1prop}}} \quad (2.6)$$

Jednadžbu (2.6) koristimo za računanje veličine x . Broj molekula N je zadan kao 500, a N_a je poznata konstanta. Vrijednosti molarne mase i gustoće 1-propanola pri atmosferskim uvjetima

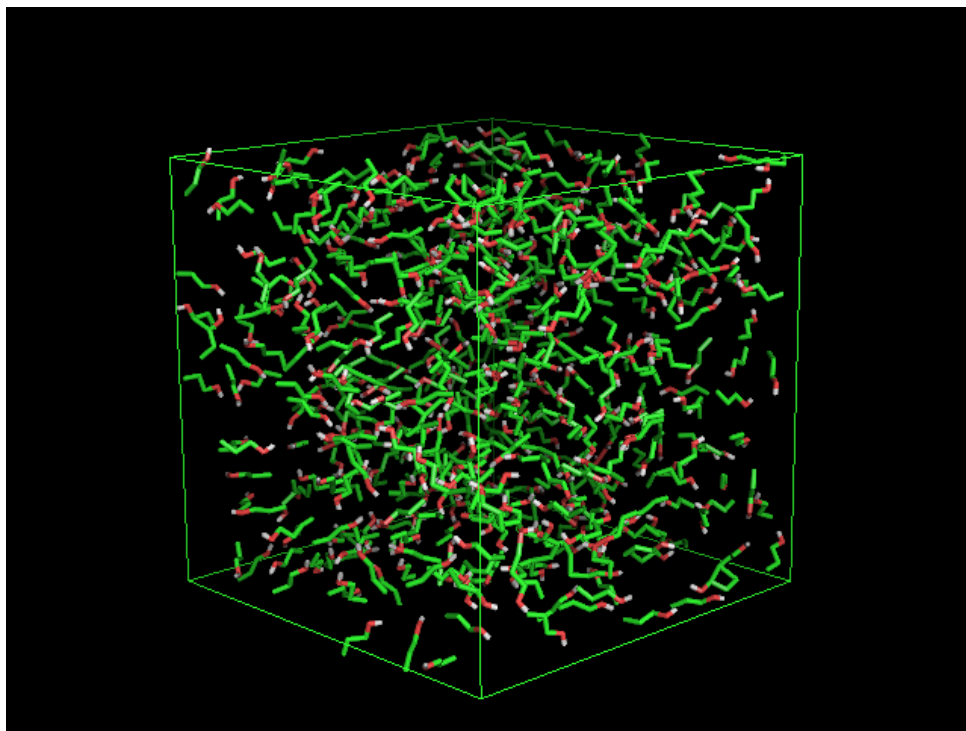
preuzimamo iz [4], te u jednadžbu (2.6) upisujemo vrijednosti

$$x = \sqrt[3]{\frac{500 \cdot 60.0896 \cdot g \cdot \text{mol}^{-1}}{6.022 \cdot 10^{23} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot 0.803 \frac{g}{\text{cm}^3}}}. \quad (2.7)$$

Odnosno, vrijednost veličine x je

$$x = 3.91 \cdot 10^{-9} \text{m} = 3.91 \text{nm} \quad (2.8)$$

Nakon što je određena veličina simulacijske kutije, naredbom "insert molecules" u *Gromacsu* postavljamo njenu dimenziju i punimo je sa 500 molekula 1-propanola. Izlazna (engl. *output*) datoteka je naziva start.gro. Ona sadrži konfiguraciju našeg sustava od 500 molekula 1-propanola. Zanimljivo je vizualizirati kako izgleda naš sustav. Korištenjem programskog paketa *Pymol* dobivamo lijepi izgled simulacijske kutije, prikazan na sl.1 :



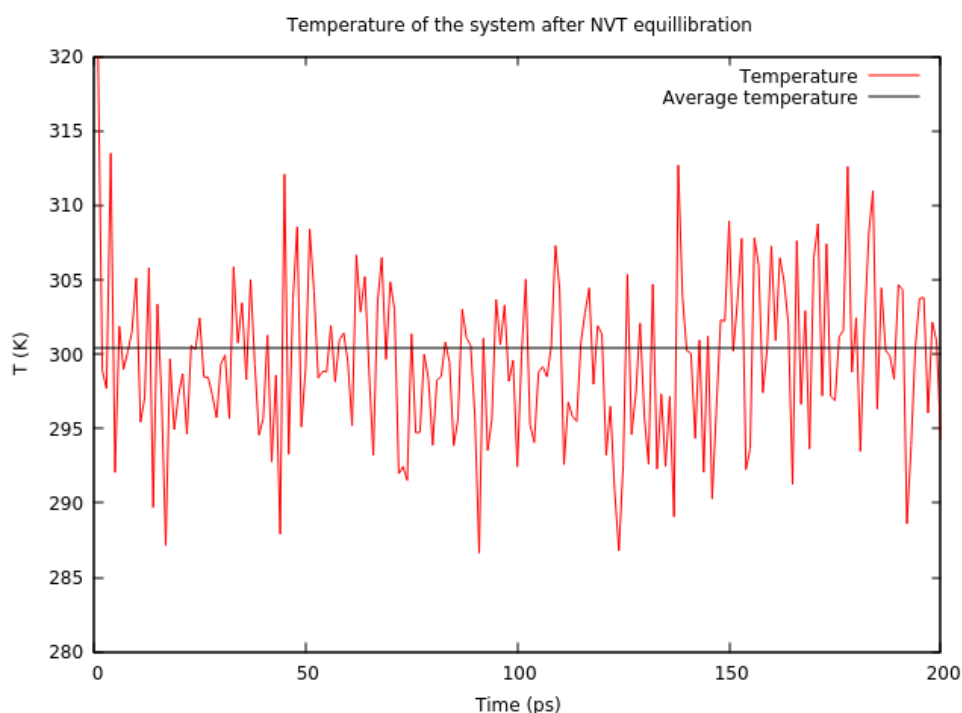
Slika 1: Molekule 1-propanola u simulacijskoj kutiji

2.2 Ekvilibriranje sustava

Iako je sustav uspješno "izgrađen", još uvijek postoje određeni problemi. Naime, sustav u početnom stanju (start.gro konfiguracija) nije energetski uravnotežen (ekvilibriran). Potrebno je stoga, za početak, odraditi energijsku ekvilibraciju sustava. Znamo da je ekvilibracija zapravo drugi naziv za globalni ekstrem energijske funkcije. Budući je najpovoljnije energijsko

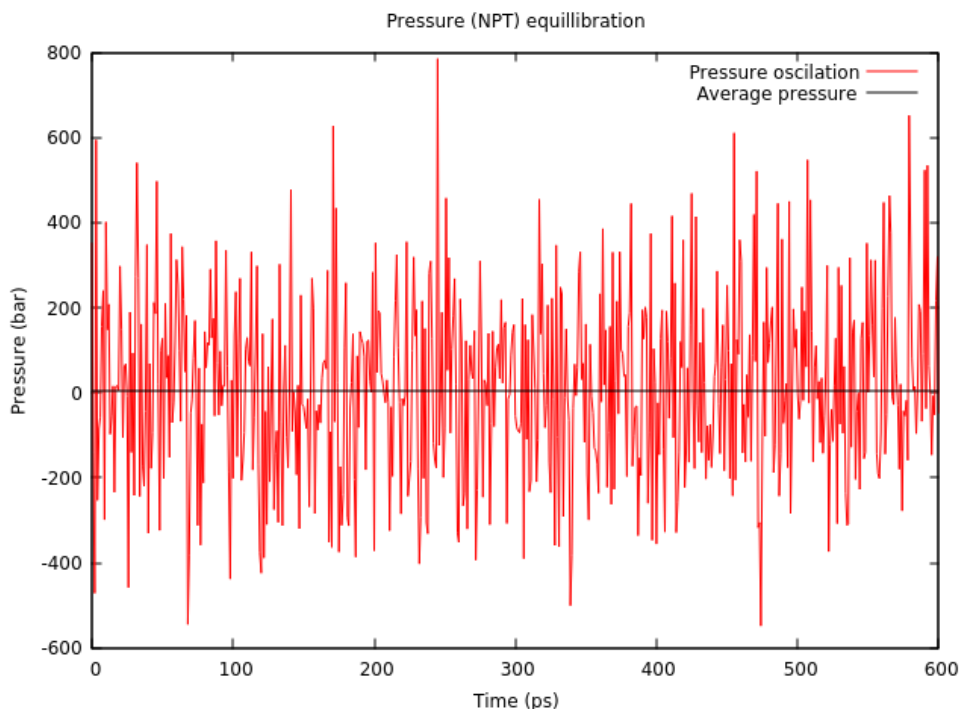
stanje one najniže energije, naš sustav i konfiguraciju start.gro uravnotežavamo pomičući sustav na najniže energijsko stanje. *Gromacs* naredbama "grompp" ([3]) i korištenjem ulaznih datoteka start.gro, topol.top i em.mdp minimiziramo energiju sustava. Valja uočiti kako su ulazne datoteke već poznate start.gro i topol.top, ali i nepoznata em.mdp. Navedena datoteka je, kao i 1propUA.pdb preuzeta sa stranice kolegija. Osim nje, još su preuzete datoteke nvt.mdp, npt.mdp i prod.mdp. Navedene datoteke u sebi sadrže parametre simulacije te ih možemo shvatiti kao nužan paket koji omogućava izvođenje simulacije.

Minimizacija energije tek je prvi korak u ekvilibriranju sustava. Potrebno je ekvilibrirati sustav u NVT i u NpT ansamblu - odnosno, drugim riječima, dovesti sustav na željeni tlak i gustoću (1 atmosfera) i željenu temperaturu (sobna temperatura). Naredbe za izvršavanje ekvibracije u NVT i NpT ansamblu su u potpunosti iste kao naredba prethodna naredba za minimizaciju energije, s jedinom razlikom da sada koristimo datoteke nvt.mdp i npt.mdp a ne em.mdp, te su izlazne datoteke nvt.tpr i npt.tpr. Iako ove *Gromacs* naredbe i datoteke same za sebe ne govore puno, ekvibraciju možemo i lijepo vizualizirati pomoću grafova. Naime, *Gromacs* u posebne datoteke nvt.edr i npt.edr sprema podatke o fizikalnim vrijednostima sustava tokom ekvibracije, te nam time omogućuje da vizualiziramo kretanje veličina koje nas zanimaju. Korištenjem programskog paketa *Gnuplot* podatke koje je *Gromacs* spremio prikazujemo grafički. Tako je kretanje temperature za vrijeme NVT (temperатурne) ekvibracije prikazano na sl.2, dok je o-



Slika 2: Temperатурne oscilacije tijekom NVT ekvibracije

visnost tlaka o vremenu za vrijeme NpT ekvibracije prikazano na sl.3. Na slikama valja uočiti 2 stvari. Prvo - odstupanja od ravnotežnih vrijednosti (300K, 1 atmosfera) su uistinu golemi. Razlog za to je dimenzija sustava. Naime, sustav koji u sebi ima samo 500 molekula izuzetno

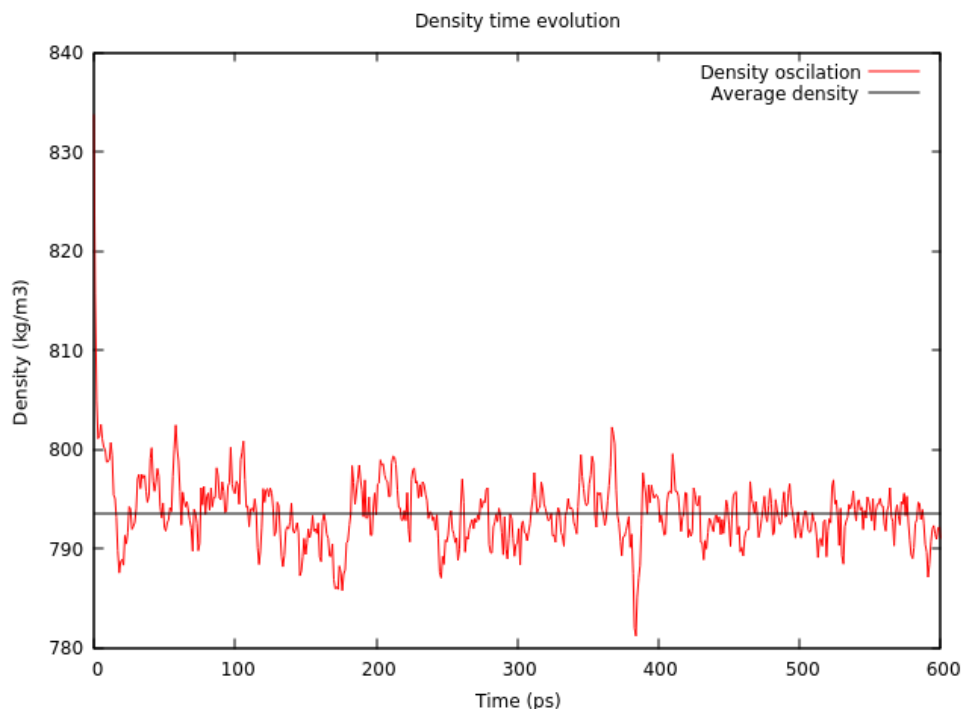


Slika 3: Oscilacije tlaka tijekom NpT ekvibracije

je osjetljiv i pogodan velikim oscilacijama, za razliku od većeg sustava (od primjerice 1 mola materije) koji svojom dimenzijom sprječava ikakve veće oscilacije. Druga bitna stvar za uočiti je "konstanta osciliranja", odnosno konstantna amplituda osciliranja oko ravnotežne vrijednosti. Naime, za očekivati je, kada radimo određene simulacije, da će sustav nakon određenog vremena sve manje oscilirati i "plesati" oko ravnotežne vrijednosti. Ovdje takvo što nije slučaj - sustav jednako oscilira i na početku i na kraju simulacije. To upućuje na zaključak kako je vrijeme trajanja simulacije moglo biti i dosta manje, te da se time ne bi postigli mnogo drukčiji rezultati. U ovom slučaju duljina trajanja simulacije nas nije pretjerano zamarala budući promatramo jednostavan sustav, no u puno većim sustavima kada je trošenje računalnih resursa mnogo veće, na ovakve rezultate je potrebno obratiti pažnju, te voditi računa o optimizaciji resursa.

Također, možemo promotriti i vremensku evoluciju gustoće tijekom NpT ekvibracije. Na sl. 1.4 vidimo graf ovisnosti gustoće o vremenu. Uočljiva je razlika između grafa koji prikazuje oscilaciju gustoće i prethodna dva grafa. Na grafu gustoće vidljivo je kako ona sa početne vrijednosti vrlo brzo pada na ravnotežnu gdje ima manje oscilacije. Možemo rezultate srednje gustoće (prikazane crnom linijom na sl.4) usporediti sa vrijednostima gustoće 1-propanola iz literature. Literatura ([4]) sugerira da je vrijednost $\rho_{1prop} = 803 \frac{kg}{m^3}$, dok je vrijednost dobivena u simulaciji $\rho_{1prop} \approx 793 \frac{kg}{m^3}$. Računanjem relativne greške formulom

$$X_{greska} = \frac{|X_{mjerena} - X_{literatura}|}{X_{literatura}} \cdot 100\% \quad (2.9)$$

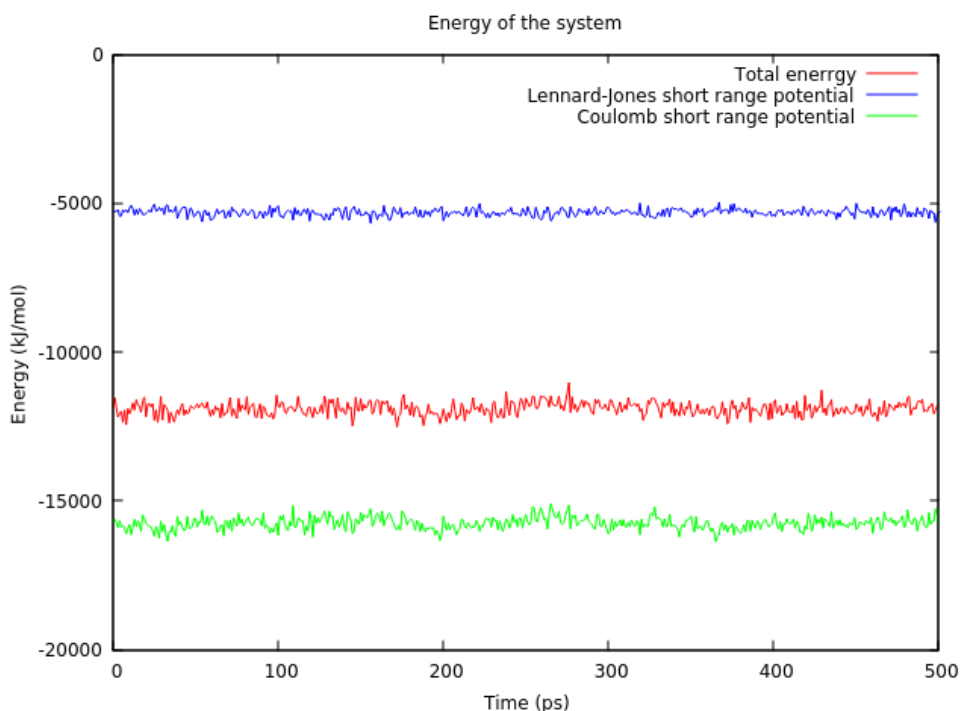


Slika 4: Oscilacije gustoće tijekom NpT ekvibracije

dobivamo vrijednost odstupanja od $\rho_{\text{greska}} \approx 1.25\%$. Tako malo odstupanje je izvrsno, te je potvrda da je sustav uspješno konfiguriran.

Nakon uspješne konfiguracije sustava, možemo krenuti u produkcijski *run*. *Gromacs* naredbama "grompp" ([3]), te korištenjem preuzete datoteke prod.mdp pokrećemo simulaciju sustava, odnosno pokrećemo računalnu analizu energijski uravnoteženog sustava 500 molekula 1-propanola. Nakon što računalno obradi podatke, grafički možemo prikazati energijske doprinose različitih interakcija koje postoje u sustavu. Tako primjerice, sl.5 prikazuje energijske doprinose Coulombovog i kratkodosežnog Lennard-Jones potencijala, te ukupnu energiju. Vidljivo je kako se vrijednost ukupne energije nalazi između vrijednosti energijskih doprinosa Lennard-Jones kratkodosežnog i Coulombovog kratkodosežnog potencijala. Nažalost, ove podatke ne možemo detaljnije analizirati budući ne znamo koliki su energijski doprinosi ostalih tipova interakcija, ali je zgodno i zanimljivo promotriti međusobne odnose ove 3 vrijednosti.

Nakon što smo napravili produkcijski run, vrijeme je za najbitniji dio - interpretiranje podataka i analizu dobivenih rezultata.



Slika 5: Energijski doprinosi molekularnih interakcija sustava

3 Analiza rezultata

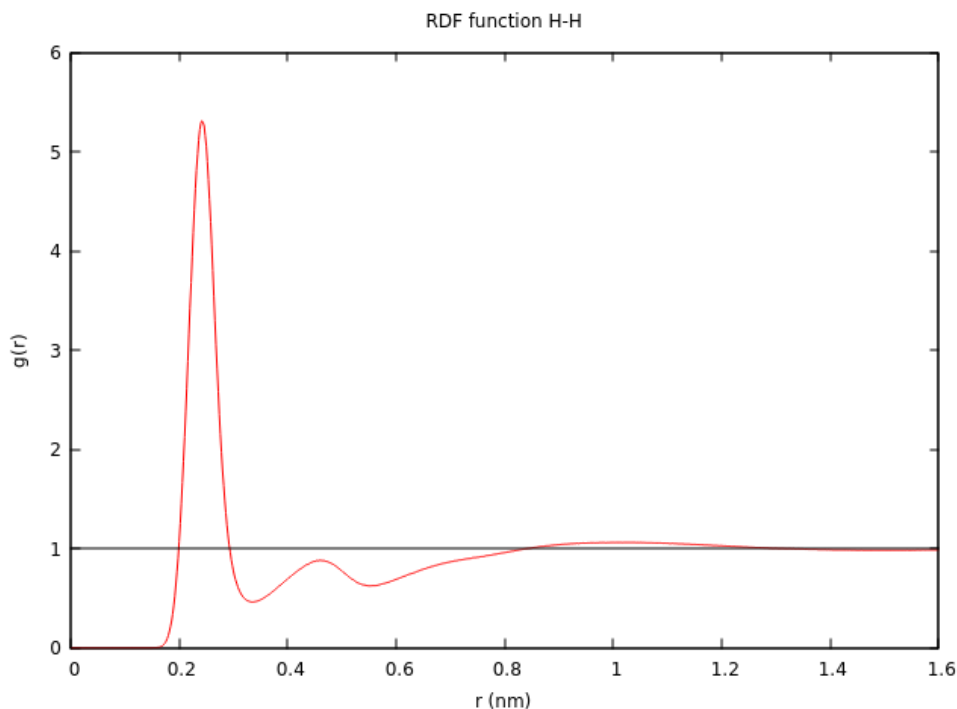
3.1 Radijalna distribucijska funkcija

Analizu rada započinjemo promatranjem veličine radijalne distribucijske funkcije (engl. *Radial distribution function*). Koristeći *Gromax* naredbu "index", indeksiramo sve molekule i atome sustava (numeriramo ih) a zatim koristeći naredbu *rdf* (kratica engleskog naziva) generiramo datoteke koje sadrže vrijednosti radijalne distribucijske funkcije za proizvoljno odabrane parove atoma. Koristeći programski paket *Gnuplot*, uz pomoć datoteka *Gromacs* datoteka generiramo grafove ovisnost $g(r)$ (tj radijalne distribucijske funkcije) o r . Rezultati su dani na sljedećim grafovima. Na sl.6 je dana RDF za 2 atoma vodika, na sl.7 RDF između atoma i kisika, a na sl.8 RDF između 2 atoma ugljika. Grafove je potrebno analizirati i procijeniti njihovu ispravnost. Naime, radijalna distribucijska funkcija je zapravo mjera vjerojatnosti da se atom X nalazi na udaljenosti r od atoma Y. Dakle, funkcija RDF približno opisuje razdiobu atoma u sustavu, tj relativne prostorne odnose.

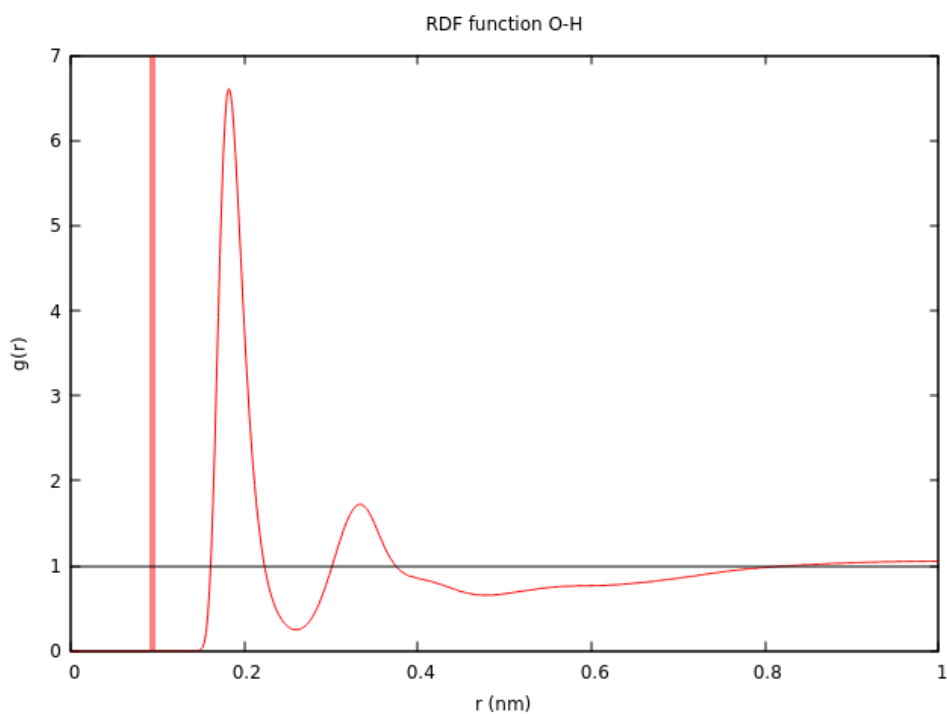
Kako bi provjerili ispravnost grafova potrebno je vizualizirati izgled molekule 1-propanola. Molekula 1-propanola je dana kao



Odnosno, molekula 1-propanola se sastoji od lanca 3 atoma ugljika (sa popratnim vodicima) na čijem jednom rubu se nalazi OH član. Znajući to, možemo promotriti sl.6-8. Promotrimo

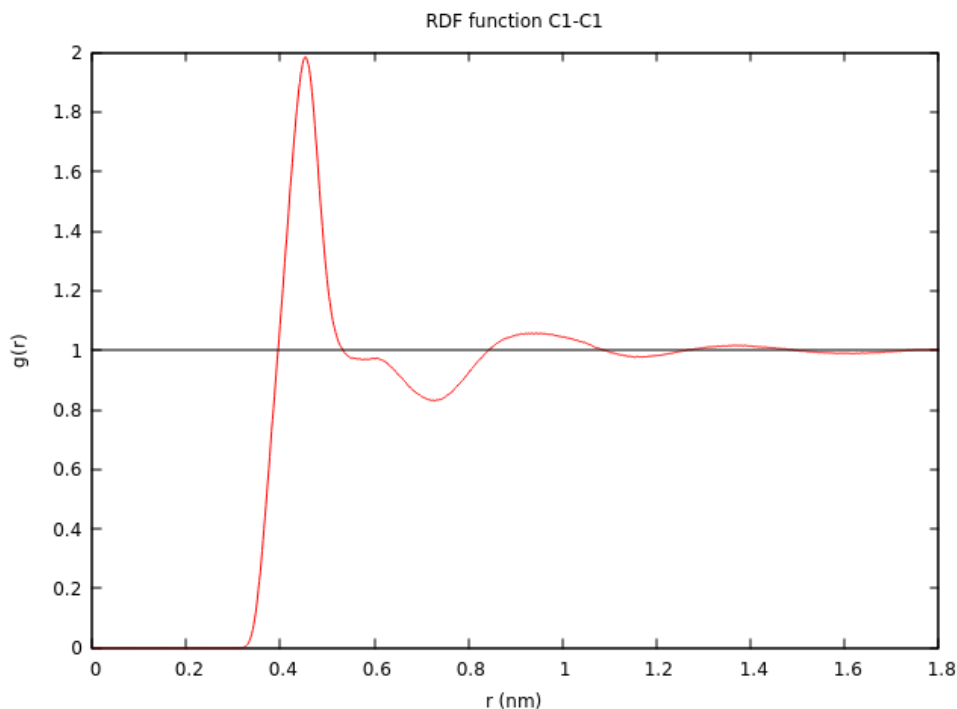


Slika 6: Radijalna distribucijska funkcija - 2 atoma vodika



Slika 7: Radijalna distribucijska funkcija - atom kisika i vodika

prvo sl.7 (atom kisika i vodika). Vidimo da RDF gotovo pa divergira za vrijednost r od približno jednog angstrema (1 angstrom = 0.1 nm). To tumačimo kao vrijednost para OH u samoj molekuli propanola. Iako molekule mogu biti podvrgnute određenoj distorziji u sustavu, sama udaljenost između atoma vodika i kisika na kraju lanca ima vrlo mala odstupanja od ravnotežne



Slika 8: Radijalna distribucijska funkcija - 2 atoma ugljika

udaljenosti. Zbog toga funkcija $g(r)$ "divergira" na udaljenosti od 1 angstrema - vjerojatnost da atom kisika na udaljenosti od 1 angstrom "vidi" atom kisika je gotovo pa jednaka 100% - što je upravo razlog tog uskog visokog *peak-a* na toj udaljenosti. Funkcija dalje postiže (manji) maksimum na vrijednosti $r \approx 2$ angstrema - možemo to tumačiti kao udaljenost atoma O od bližih atoma vodika u samoj molekuli propanola, zatim opet (još manji) maksimum na $r = 3$ te lagano trne... To tumačimo na način da atom kisika ima gotovo stopostotnu vjerojatnost da naiđe na molekulu kisika na $r = 1$ angstrom - tj na samom kraju lanca, te se zatim vjerojatnosti smanjuju i "šire" - distribucija je raširenija. Nakon što prijeđemo na udaljenosti veće od dimenzije molekule 1-propanola, $g(r)$ trne na jedinicu - vjerojatnost je svugdje jednaka, tj molekule su nasumično raspoređene u kutiji i nema preferiranog smjera i udaljenosti gdje se nalazi veći broj atoma H.

Na sl.8 prikazana je RDF između 2 atoma ugljika C. Vidljivo je da vrijednost radijalne distribucijske funkcije postiže maksimum za vrijednosti od $r = 4$ angstrema, te zatim ima manje ekstreme na približno $r = 1$ angstrom. To ponovo, kao u prethodnom primjeru, tumačimo kao veću vjerojatnost da se atomi ugljika nalaze međusobno udaljeni za ravnotežne vrijednosti, te da na većim, vanmolekularnim udaljenostima, nema preferiranog smjera s većom distribucijom molekula ugljika C.

Potpuno ista analiza kao za sl.7 i sl.8 vrijedi i za sl.6, za atome vodika.

Ove rezultate osim kvalitativne analize, je potrebno usporediti s rezultatima iz literature. Simulacija molekularne dinamike propanola je izvršena od strane mnogih znanstvenika, te je zanimljivo provjeriti kolika su odstupanja naših rezultata od potvrđenih rezultata. U literaturi ([5]),

na slici 1. vidljivo je kako su rezultati japanskih znanstvenika gotovo u potpunosti jednaki našima, dobivenim *Gromacs* simulacijom. Naime, za analizu RDF funkcije C-C uočava se ([5]) kako je prvi maksimum na vrijednosti 4 angstrema, a drugi 9 - vrlo slično onome što je dobiveno u našoj analizi (sl.7). Također, prvi maksimum RDF funkcije O-H ([5]) u radu japanskih znanstvenika je na 2 a drugi na 3 angstrema - gotovo u potpunosti jednako onome što imamo na našem grafu (sl.8), zanemarimo li prvi ekstrem koji "divergira". Sve ovo upućuje da su naši rezultati ispravni.

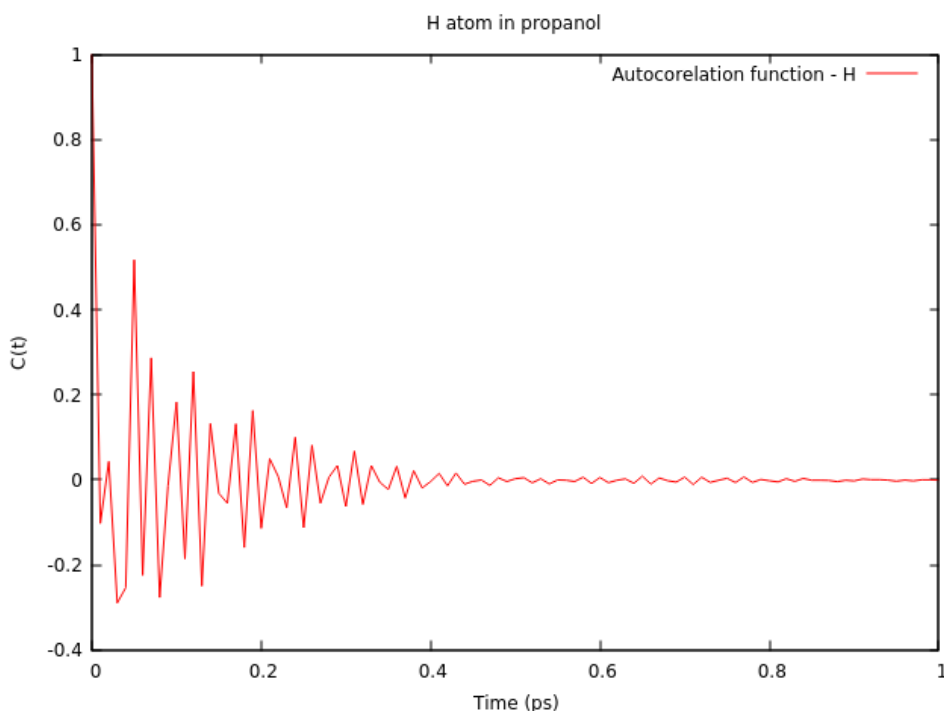
(Napomena: zbog nepoznatog copyright statusa slika koje se nalaze u navedenom radu, slike nisam kopirao u vlastiti seminar. Vrlo lako ih je moguće naći na [5].)

3.2 Autokorelacijska funkcija

Nakon određenih grafova RDF-a, slijedeće što analiziramo je autokorelacijska funkcija za naš sustav. Konkretno, zanima nas autokorelacijska funkcija brzine za dane parove atoma. Autokorelacijska funkcija za sustav N atoma je dana kao ([3])

$$C(t) = \frac{1}{N} \sum_{i=0}^N v_i(t_0)v_i(t_0 + t) \quad (3.2)$$

Korištenjem *Gromacs* naredbe "velacc" generira se datoteka koja sadrži podatke o vremenskoj ovisnosti autokorelacijske funkcije brzine ($C(t)$) o vremenu t . Korištenjem programskog paketa *Gnuplot*, na sl.9 grafički prikazujemo dobivene rezultate. Na slici je prikazana autokorelacijs-

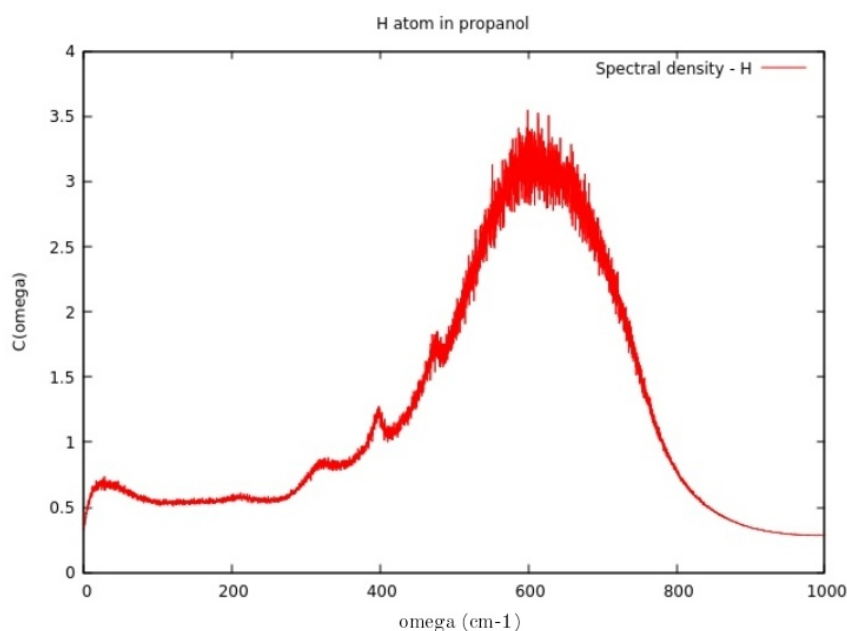


Slika 9: Autokorelacijska funkcija brzine, atom vodika

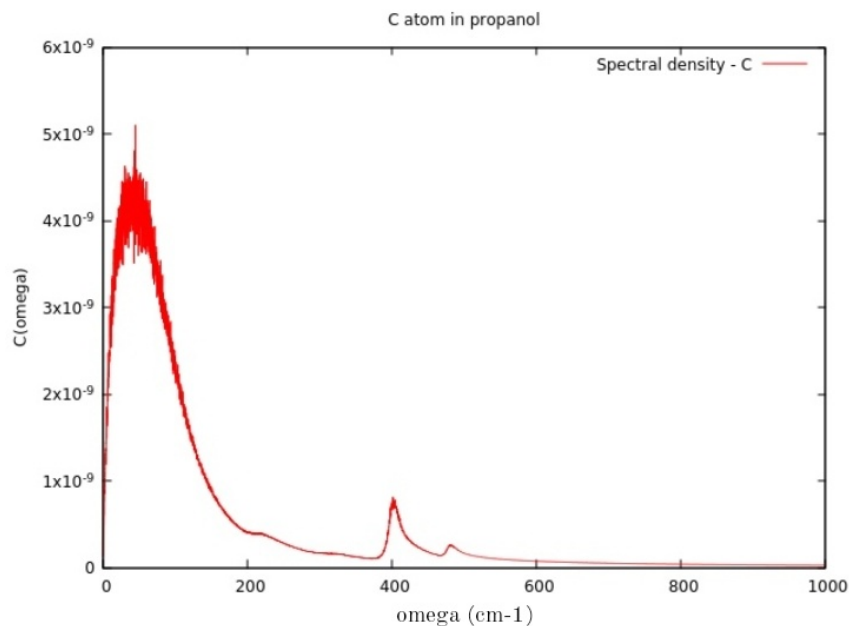
ka funkcija brzine samo za atom vodika. Za ostale atome nije bilo moguće dobiti rezultate (zbog zastarjele verzije *Gromacs*a korištene na vježbama, koja nije bila u mogućnosti generirati ispravne podatke za autokorelacijske funkcije brzina drugih atoma). Autokorelacijska funkcija brzine za atom vodika u molekuli 1-propanola slična je istoj funkciji za atom kisika u sustavu molekula vode ([3]), koji je obrađen na vježbama. Funkcija počinje na jedinici, no protekom vremena (poslije pola pikosekunde) pada na nulu). Graf je, može se reći, očekivan. Naime, autokorelacijsku funkciju možemo zamisliti kao mjeru identičnosti početnog i vremenskog pomaknutog sustava i vremena. Kada sustav vremenski translatiramo za približno 0.5 pikosekundi, sustav više nema nikakvu memoriju o vlastitoj početnoj konfiguraciji. Konfiguracija sustava poslije 0.5 pikosekundi je u potpunosti drukčija od početne konfiguracije sustava. Takav rezultat za naš sustav je stoga očekivan.

3.3 Spektralna gustoća

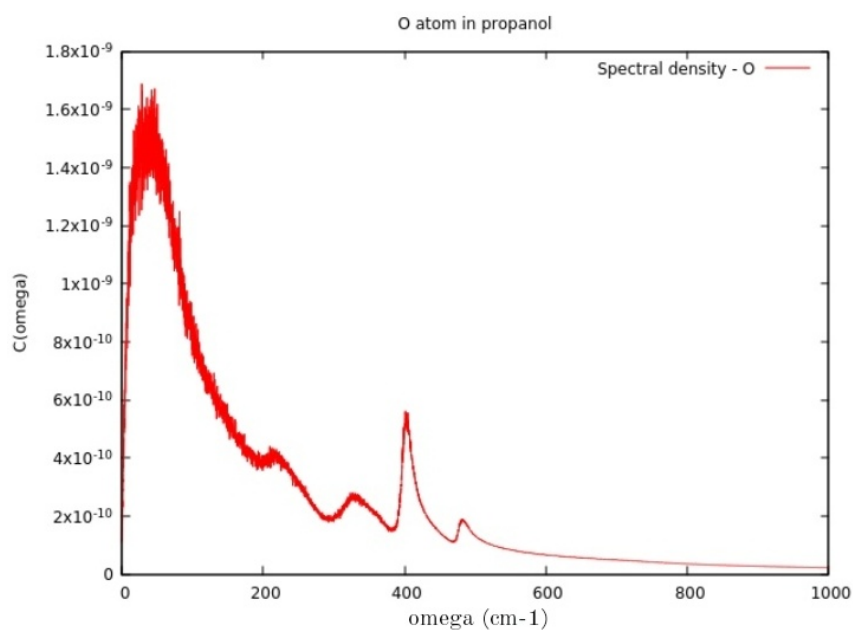
U prethodnom pododjeljku spomenuto je kako je naredbom "velacc" u *Gromacsu* generirana datoteka za autokorelacijsku funkciju. No uz datoteku koja sadrži podatke vezane za autokorelacijsku funkciju, generirana je i jedna "bonus" datoteka - datoteka koja sadrži podatke o vibracijskom spektru atoma (zapravo Fourier transformu autokorelacijske brzine). Korištenjem paketa *Gnuplot* grafički prikazujemo dobivene rezultate za spektralne gustoće. Na sl.10 prikazana je spektralna gustoća atoma vodika, na sl.11 za atom ugljika, a na sl.12 za atom kisika.



Slika 10: Spektralna gustoća atoma *H* u propanolu



Slika 11: Spektralna gustoća atoma C u propanolu



Slika 12: Spektralna gustoća atoma O u propanolu

Dobivene rezultate donekle možemo usporediti sa poznatim vrijednostima spektralne gustoće za molekulu vode. Naime, u skripti ([3]) dana je spektralna gustoća atoma vodika i kisika u vodi. I dok spektralne gustoće u ovom slučaju (molekula 1-propanola) i u slučaju vode nisu skroz iste, određene sličnosti su na prvi pogled i više nego uočljive. Naime, primjerice usporedimo li sl.12

sa spektralnom gustoćom atoma kisika u [3], uočljivo je kako su prvi i najizraženiji maksimumi u oba slučaja za vrlo male vrijednosti omega (oko 50 cm⁻¹). S druge strane, usporedimo li sl.10 (spektralnu gustoću atoma vodika) sa sl.9 u [3] uočljivo je kako su maksimumi u oba slučaja nešto širi i kako su u oba slučaja za vrijednosti omega oko 600 cm⁻¹. Također, valja uočiti kako su vrijednosti na y osi za atom H reda veličine 1-10, dok su vrijednosti na y osi za atom O desetak redova manji u oba slučaja (red veličine 10⁻⁹). Sličnost je više nego očita.

Grafovi naravno nisu u potpunosti isti, to nije ni moguće budući su sustavi različitih molekula, ali određena razina sličnosti je vrlo dobar indikator ispravnosti simulacije izvršene na vježbama. Također, usporedbom sl.11 i sl.12 (a i sl.10) vizualno možemo opaziti kako graf izgleda kao da se povećanjem atomskog broja atoma, maksimumi miču prema manjim frekvencijama, te se vrijednosti maksimuma smanjuju povećanjem atomskog broja. Valjalo bi provjeriti je li ovo zanimljivo opažanje rezultat puke slučajnosti i malog uzorka atoma (3) ili uistinu postoji fizikalni razlog za ovakvo što. Istraživanje te pojave moguća je tema nekog novog seminara.

4 Zaključak

Simulacije molekularne dinamike uistinu su zanimljiv način analize višestrukih sustava. U situacijama kada analitičko rješavanje sustava nije moguće, a kada eksperimentalne metode nisu dostupne, numeričke simulacije jedina su opcija. Poznavanje osnova numeričke analize tako omogućuje opažanje čitavog niza zanimljivih fizikalnih sustava.

U ovom radu proučavan je sustav 500 molekula poznatog alkohola 1-propanola. Takav relativno jednostavan sustav generiran je i analiziran korištenjem programskog paketa *Gromacs*. Jedini dio koji je riješen "olovkom i papirom" bilo je računanje dimenzija kutije u kojoj vršimo simulaciju. Nakon što je dimenzija sustava izračunata, računalo je za nas odradilo ostatak računanja. Prvo smo sustav doveli ("relaksirali") u ravnotežno stanje, odnosno u energijski najniže stanje. Također, sustav je doveden i u traženo stanje tlaka i temperature (atmosferski tlak i sobna temperatura). Uočeno je da je vrijeme trajanja simulacije puno duže od potrebnog vremena da sustav dođe u ravnotežno stanje. U retrospektivi, to je znak da toliko trošenje računalnih resursa (vremena i radne memorije računala) nije bilo potrebno u ovoj simulaciji, te je simulacija mogla trajati i kraće. Pri budućim simulacijama na takvo što treba obratiti pažnju.

Nakon što je sustav doveden u energijski povoljno stanje, započeli smo analizu sustava. Za različite atome propanola (C, H, O) proučavali smo različite veličine - radijalnu distribucijsku funkciju, autokorelacijsku brzinu i spektralnu gustoću. Grafove radijalne distribucijske funkcije za atome C H i O usporedili smo sa literaturom ([5]) i uočili veliku korelaciju između naših vrijednosti i vrijednosti iz literature. Zatim smo analizirali autokorelacijsku funkciju za atom vodika i ustvrdili kako je rezultat očekivan - sustav gubi informaciju o početnom stanju već nakon nekoliko sekundi. Nažalost, zbog tehničkih poteškoća, nismo bili u mogućnosti usporediti rezultate s atomima C i O. Na koncu, grafički smo prikazali funkcije spektralne gustoće za atome C H i O. Uočena je određena korelacija sa rezultatima iz [3], što je indikacija kako su rezultati i tu ispravni. Vizualnom analizom uočen je određeni "trend" (*pattern*) ovisnosti izgleda grafa o atomskom broju atoma. To zanimljivo opažanje bi bilo interesantno u nekom novom radu detaljnije proučiti.

5 Literatura

- [1] <https://en.wikipedia.org/wiki/GROMACS> (31. 1. 2021.)
- [2] B. Lovrinčević, M. Požar, *Simulacije molekularne dinamike u programskom paketu Gromacs*, 2020.
- [3] B. Lovrinčević, M. Požar, *Simulacija sustava u tekućem stanju*, 2020.
- [4] <https://en.wikipedia.org/wiki/1-Propanol> (31.1.2021)
- [5] Isao Akiyama, Masaya Ogawa, Keiichi Takase, Toshiyuki Takamuku, Toshio Yamaguchi, Norikazu Ohtori, *Liquid Structure of 1-Propanol by Molecular Dynamics and X-Ray Scattering*, 2004