

Praktikum: Struktur und Dynamik in mesoporösen Poren

Theoretische Chemie - Instrumentelles Praktikum - SommerSemester 2022

31. Mai, 2022

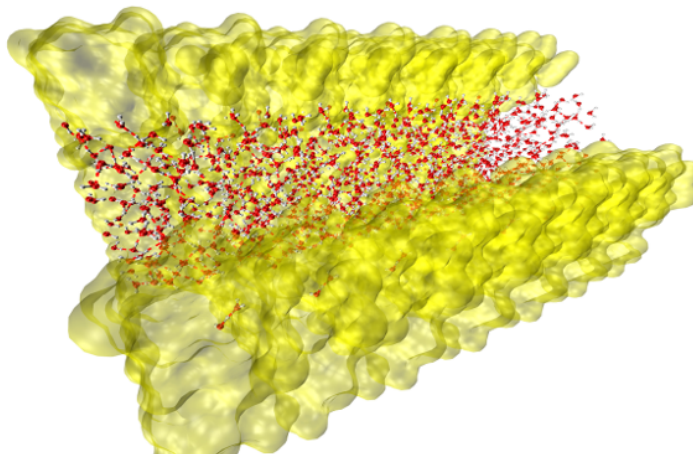
Übung 1: Visualisierung des Systems

In dieser Übung untersuchen wir die strukturellen und dynamischen Eigenschaften von Wasser in einer Siliciumoxid Pore. Lade den Ordner "SiliciumPore2022" von antares:/upb/groups/ak-kuehne/public/share into your home directory. To copy it to your home directory use the following command in your home directory: `scp -r antares:/upb/groups/ak-kuehne/public/share/SiliciumPore2022 .`

In der folgen Übung sollten Sie versuchen ihre Ordner und Dateien in sinnvoller Weise zu organisieren. Geben sie Ihren Daten und Ordners passende Namen um den Überblick zu behalten.

Geometrien haben meistens ".xyz" Endungen, während Input Dateien ".inp" und Output Dateien mit ".out" enden. Relativ einfach kann man die Geometriedateien mit dem Programm vmd visualisieren. Benutzen sie vmd um die Datei Siliciumtrocken.xyz zu visualisieren. Aus Zeitgrnden wurde das Ausgangssystem bereits modulliert. Es handelt sich um das Modell einer Siliciumoxidpore in einem periodischen System. Wie im VMD Tutorial beschrieben gibt es eine Vielzahl von Möglichkeiten zur Visualisierung. Unter "Graphics" und "Representations" können sie z.B. unterschiedliche "Drawing Methods" wählen. Rendern Sie ein Bild des Systems und speichern Sie es für den Report ab.

Es ist wichtig zu wissen welche Eigenschaften das Ausgangssystem hat und dafür werden wir bestimmte Eigenschaften des Systems analysieren. Bestimmen Sie nährungsweise die Dichte des amorphen Siliciumoxids und die Größe des Systems in allen Dimensionen. Bestimmen sie auch den Durchmesser der Pore in diesem Fall und beschreiben Sie warum sie den Durchmesser so bestimmt haben. Welche Probleme



könnten bei der Bestimmung auftreten?

Schauen sie sich die Silanolgruppen an der Oberfläche an. Interessant ist hier die Anzahl der Hydroxylgruppen an einem Silicium. Berechnen sie die Radial Distribution Function für Silicium und Sauerstoff (und/oder andere Kombinationen) und interpretieren Sie die Ergebnisse wenn möglich im Bezug zu der Häufigkeit der verschiedenen Silanole.

Tipp: mit "vi Siliciumtrocken.xyz" können sie die Datei mit den Geometriedaten des Systems öffnen.

Tipp: Distanzen lassen sich z.B. in vmd bestimmen wenn Sie eine Bindung zwischen zwei Atomen deklarieren (*Mouse > Label > Bonds*).

Übung 2:Wasser in Siliciumporen

Im Ordner Übung 2 befindet sich die Datei wasserbulk.xyz. Es handelt sich um ein equilibriertes System von reinem Wasser. Bestimmen Sie die O-O und O-H RDF von reinem Wasser und bestimmen Sie die Dichte des Wassers. Benutzen Sie das Skript wasser.py um Wasser in die Pore einzufügen. Hierbei müssen Sie nur noch im Skript den Radius bis zu dem Sie Wasser in die Pore einfügen wollen angeben. Benutzen Sie hierfür den Porendurchmesser den Sie in Übung 1 bestimmt haben. Das Skript öffnen Sie wie gewohnt via "vi wasser.py".

Führen Sie das Skript mit "python wasser.py" aus. Es entsteht eine neue Datei new.xyz, die die ausgewählten Wassermoleküle enthält. Fügen Sie diese nun der trockenen Pore hinzu. Sie können "cat new.xyz >>Siliciumtrocken.xyz" verwenden. Ändern Sie nun die Anzahl der Atome in der Datei zu dem neuen richtigen Wert und geben Sie dem System einen neuen Namen z.B. Porewater.xyz.

Kontrollieren Sie ob das neue System realistisch aussieht und Wasser nur in der Pore zu finden ist. Machen Sie ein weiteres Bild von der gefüllten Pore um den aktuellen Status beschreiben zu können. Das System ist nun fertig prepariert. Leider können so noch keine Daten über das Verhalten von Wasser in Nanoporen gewonnen werden. Dafür ist noch eine Molekulardynamik-Simulation notwendig. Führen Sie aus warum dies der Fall ist.

Übung 3: Molekulardynamiksimulation

Kopieren Sie die Datei Porewater.xyz in den Ordner von Übung 3. Wir wollen nun eine MD Simulation (Experiment) durchführen um statische und dynamische Eigenschaften des Systems zu bestimmen.

Starten sie hierfür eine semi-empirische (PM6) MD Simulation. Da diese Simulationen einen hohen Rechenaufwand benötigen benutzen wir den Großrechner der Uni Paderborn (noctua1).

Öffnen Sie die Pore.inp Datei und füllen Sie die Lücken im Input Skript. Es gibt dem Program die Methoden und Rahmenbedingungen an die bei der Simulation verwendet werden sollen. Schauen Sie sich das Skript an. Welche Bedingungen werden für die Simulation verwendet und was könnten Auswirkungen mancher der Bedingungen sein? Beschreiben sie diese in Ihrem Bericht.

Tipp: Das cp2k Input Manual ist hier zu finden: <https://manual.cp2k.org/#gsc.tab=0>

Kopieren Sie ihren Ordner Übung 3 in ihr Arbeitsverzeichnis auf noctua1. Zur Erinnerung: generell gilt scp -r Pfad zum Ordner Pfad zum Ziel. z.B. scp -r Übung3 imt-Name@fe.noctua.pc2.uni-paderborn.de:/scratch/hpc-prf-instpra/IhrArbeitsverzeichnis/

Um die Simulation zu starten benutzen Sie das Arbeitsskript submit.sh. Geben Sie im Skript die Namen der Input und Output Datei an und starten Sie die Simulation mit "sbatch submit.sh". Zum Testen sollten Sie erst eine kurze Simulation starten. Das Skript ist bereits so geschrieben, dass die maximale Dauer 10 Minuten beträgt aber wir werden es später ändern. Kontrollieren Sie ob die Simulation wirklich gestartet wurde und in der Queue des Großrechners ist indem sie "squeue -u" gefolgt von Ihrem IMT Namen verwenden. Öffnen sie die Output Datei um zu Kontrollieren ob die Simulation ohne Fehler abläuft.

Sollte alles funktionieren, starten Sie bitte nun die volle Simulation indem Sie im submit.sh Skript die Zeit zu 12h und die Partition zu "batch" ändern. Starten Sie nun die Simulation wie zuvor. Die Simulation sollte nun nach einer Wartezeit für 12 Stunden laufen. In diesem Fall schreiben wir nur jeden hundersten Schritt der Trajektorie aus, da die Datei sonst zu groß werden würde. Aber alle Schritte werden intern berechnet. Die Ergebnisse sind in der "*-pos.xyz" Datei. Kopieren sie diese Datei und die "*-ener" Datei nach Abschluss der Rechnung auf ihren Rechner. * wird hier als Platzhalter für jede mögliche Kombination verwendet. Der Name hängt von ihrer Wahl in der Input Datei ab. Kontrollieren sie die *-ener Datei auf Änderungen in der Energie über den Verlauf der Simulation. Was können Sie erkennen und was würden Sie erwarten?

Öffnen sie die Trajektorie mit vmd und erstellen sie z.B. RDFs und berechnen Sie Diffusionskoeffizienten mit Travis. Travis gibt nur Dateien mit Daten für Diffusion (Dichte) aus. Nutzen sie die Daten um mit Gnuplot Diagramme zu diesen zu erstellen.

Tipp: Um eine Datei mit travis zu öffnen verwenden Sie einfach "travis Dateiname". Travis führt Sie durch ein Menü und speichert Ihre Wahl in der input.txt Datei. Wenn Sie eine Auswahl ändern möchten können Sie die Input Datei ändern und dann neu ausführen mit: travis -p Dateiname -i input.txt. Beschreiben Sie die wichtigsten der ausgewählten Einstellungen und warum Sie diese verwenden.

Mit den Struktur und Dynamikdaten, die Sie von den verschiedenen System gesammelt haben sind Sie in der Lage das Anfangssystem zu beschreiben und Änderungen der Wasserstruktur und Dynamik zu analysieren. Wie groß z.B. ist die Dichte von Wasser in der Pore nach der Simulation und weicht sie von der reinen Wasserdichte ab? Wie groß ist die Wasserdiffusion in der Simulation und wie lassen sich die Werte erklären? Diskutieren Sie hier auch die Art der Diffusionsberechnung im Hinblick auf die Abhängigkeit zu den Raumrichtungen.