

分子动力学模拟建模

建模主要分为两步

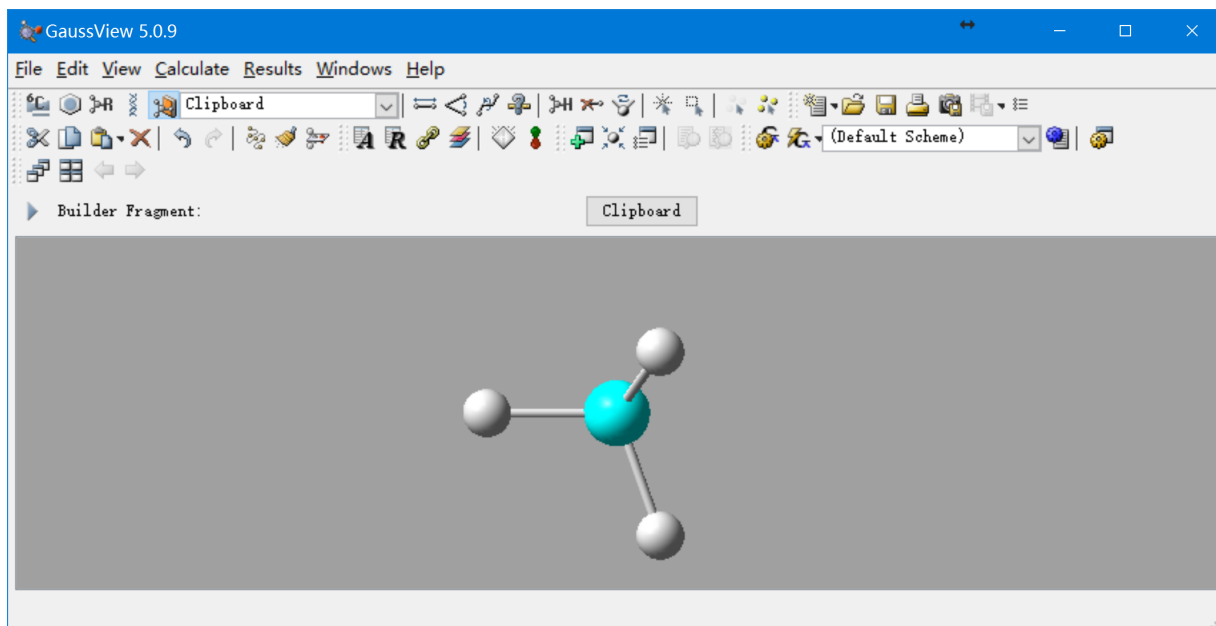
- 建立分子模型
- 建立box，投入分子

分子坐标文件

分子坐标文件主要由组成分子的每个原子的属性定义，包括原子类型、坐标、电荷等等，常用的分子坐标文件的格式有xyz、pdb、tinker等，不同格式之间稍加修改即可进行转换。

常见的小分子可以通过gaussview、lammps等建立，生物大分子和复杂有机物有专门的数据库，如[RCSB Protein Data Bank](#)

我使用gaussview建模，导出为ch4.pdb和o2.pdb



以下是o2.pdb 文件的内容

```
TITLE                               Required
REMARK      1  File created by GaussView 5.0.9
HETATM       1    0                      0      -0.874      1.505      0.000
HETATM       2    0                      0      -2.035      1.505      0.000
END
CONNECT       1      2
CONNECT       2      1
```

建立box，投入分子

这一步通常是在给定大小的box中放入所需要数目的原子，通常根据需要计算出来。通常体系密度 $\rho = \frac{\sum M N}{V}$ ，其中M是原子质量，N为原子数目，V是box的体积

PACKMOL 通过在定义的空间区域中堆积分子，为分子动力学模拟创建所需的初始构型。

PACKMOL需要上文建立的分子坐标文件（**ch4.pdb**和**o2.pdb**）以及一个输入文件

mixture.inp

输入文件mixture.inp如下

```
tolerance 2.0                #规定原子间最小距离
filetype pdb                 #确定输出文件类型
output me.pdb                #输出文件名

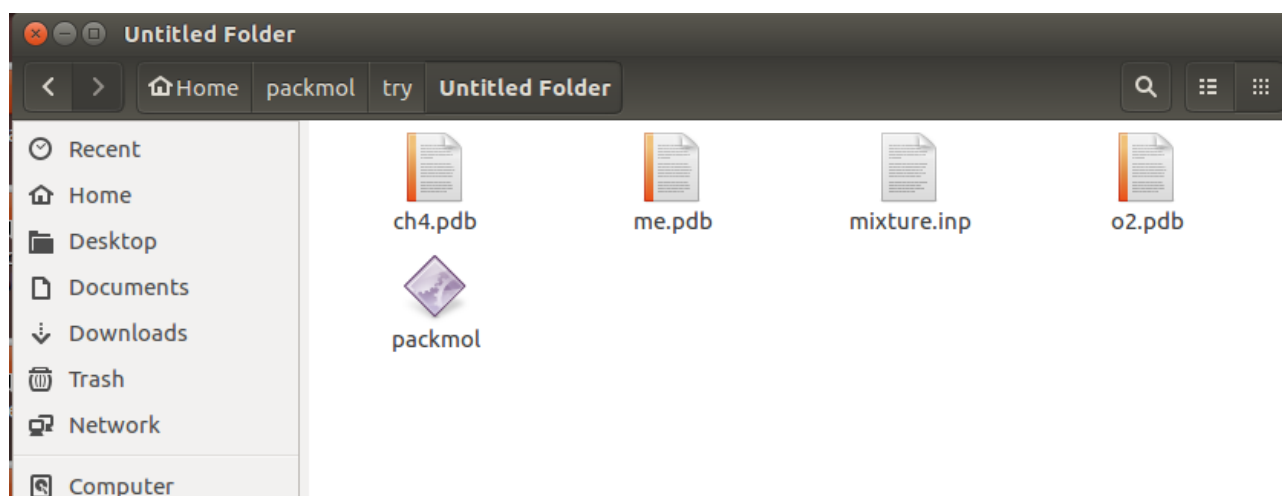
structure ch4.pdb            #ch4
    number 20                 #甲烷分子数
    inside box 0. 0. 0. 19.66 19.66 19.66    #甲烷分子的空间分布 x=0-19.
end structure

structure o2.pdb             #氧气
    number 40                 #氧气分子数
    inside box 0. 0. 0. 19.66 19.66 19.66    #氧气分子的空间分布 x=0-19.
end structure
```

随后在命令行中执行

```
./packmol < mixture.inp
```

注意执行时需要保证packmol、mixture.inp、ch4.pdb和o2.pdb在同一目录下

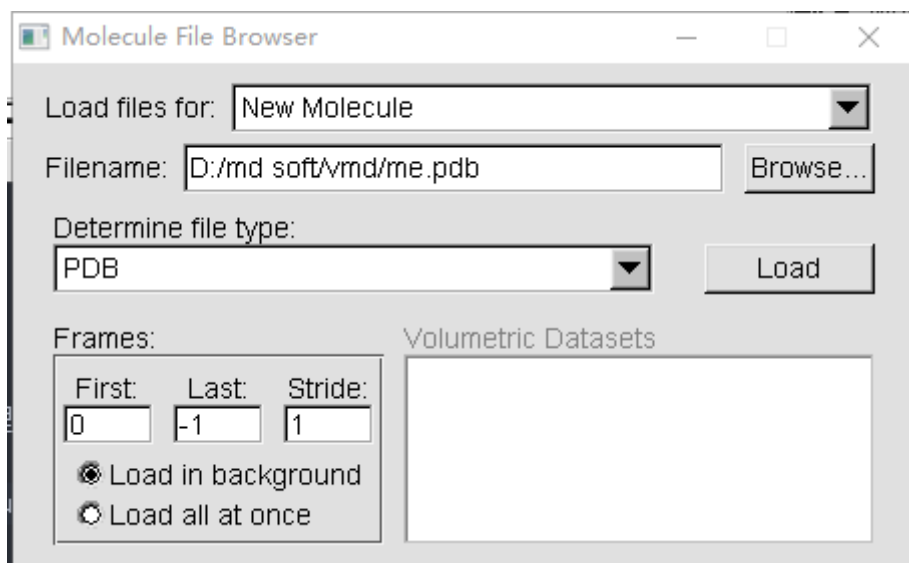
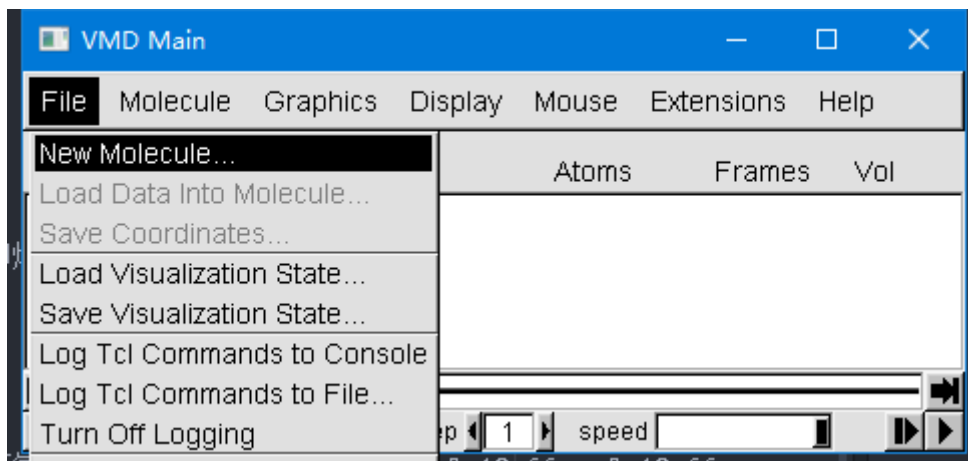


```
c@ubuntu:~/packmol/try/Untitled Folder$ ./packmol < mixture.inp
```

生成模型，建立好的模型为.pdb格式，可以直接载入VMD，查看模型是否合理。

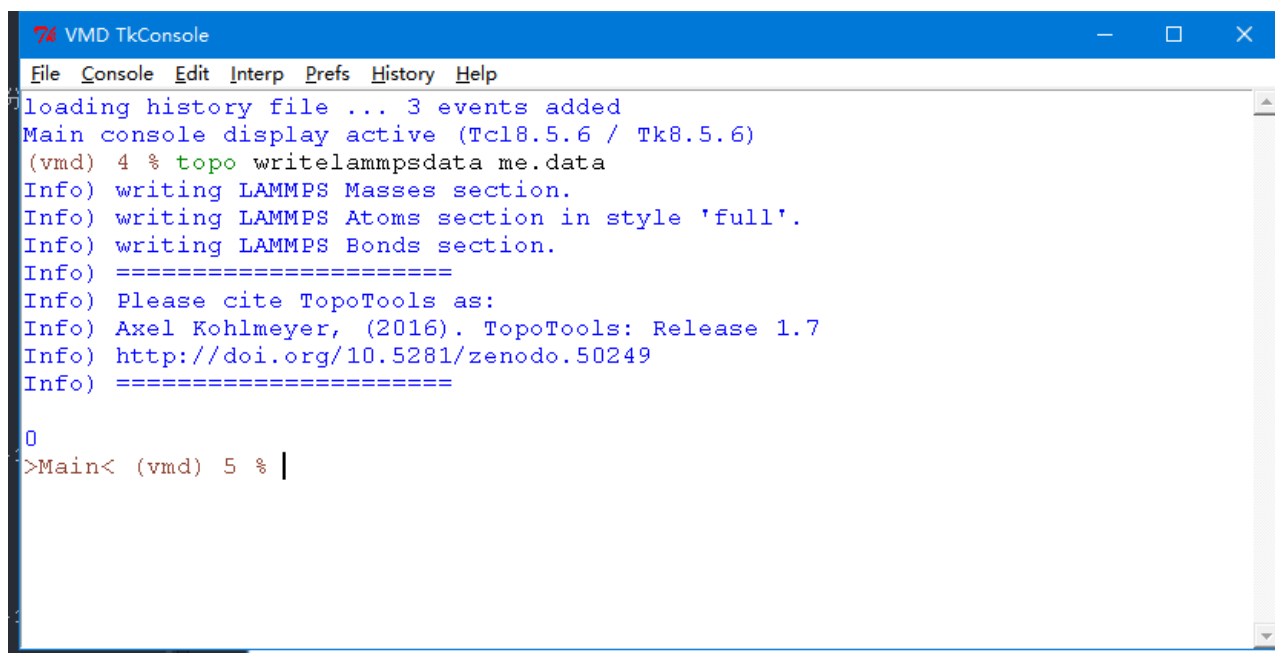
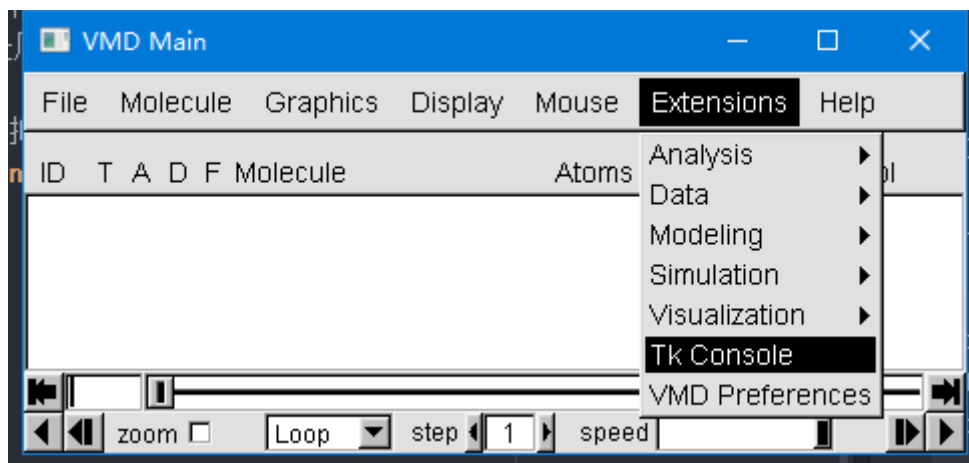
VMD 读取模型步骤

1. 将me.pdb放到VMD的安装目录下，打开vmd，File => New Molecule,打开me.pdb



2. 打开Tk Console：Extensions => Tk COnsole，输入一下命令，将pdb文件转化为lammps的数据文件

```
topo writelammpsdata me.data
```



这个data文件就是lammps所需要的模型文件。