

# Construcción de un sistema bifásico usando el programa Gromacs 4.5.4.

Prof. José G. Parra F.

17 de Abril del 2014

En este tutorial vamos a construir un sistema n-heptano/agua usando las herramientas genbox, editconf y *g\_x2top* del programa Gromacs 4.5.5. Usaremos las coordenadas xyz de las moléculas agua y n-heptano construídas con el programa avogadro y la convertiremos en el formato \*.gro usando el programa openbabel.

## 1. Construcción de las moléculas de agua y n-heptano usando Avogadro.

Con el programa Avogadro podemos construir las moléculas de agua y n-heptano las cuales sus geometrías pueden ser optimizadas usando el modelo de energía potencial mmff94. A continuación se muestran las coordenadas de estas moléculas:

a) molécula de agua.

3

O	-0.00232	1.98208	0.01651
H	0.96557	1.95596	-0.02187
H	-0.28117	1.45993	-0.75067

b) molécula de n-heptano

23

C	-7.43671	-0.76413	-0.00572
C	-6.13259	0.01608	0.03968

C	-4.92119	-0.91386	-0.02316
C	-3.61138	-0.12665	0.04273
C	-2.39908	-1.05688	-0.02542
C	-1.09026	-0.27083	0.04764
C	0.11724	-1.19284	-0.01035
H	-8.28963	-0.07935	0.03314
H	-7.51288	-1.44982	0.84427
H	-7.51237	-1.34947	-0.92761
H	-6.10057	0.60891	0.96115
H	-6.10498	0.72001	-0.80028
H	-4.95384	-1.49688	-0.95159
H	-4.96232	-1.62805	0.80836
H	-3.57799	0.45242	0.97359
H	-3.57117	0.59072	-0.78604
H	-2.42993	-1.63316	-0.95811
H	-2.44169	-1.77707	0.80083
H	-1.05519	0.30903	0.97724
H	-1.03790	0.44326	-0.78251
H	0.11194	-1.89901	0.82614
H	1.04209	-0.61000	0.04323
H	0.12968	-1.76507	-0.94342

Luego usando el programa openbabel podemos obtener las coordenadas en el formato de gro-macs. Para ello usamos las siguientes líneas de comandos en un terminal:

Para el agua:

```
$ obabel agua.xyz -O agua.gro
```

Para el n-heptano:

```
$ obabel heptano.xyz -O heptano.gro
```

Los archivos \*.gro tienen la siguiente forma luego de haber sido modificado:

a) Para la molécula del agua:

```
agua
```

3

1HOH	O	1	-0.000	0.198	0.002
1HOH	H	2	0.097	0.196	-0.002
1HOH	H	3	-0.028	0.146	-0.075
0.00000	0.00000	0.00000			

b) Para el n-heptano:

heptano

23

1LIG	C	1	-0.744	-0.076	-0.001
1LIG	C	2	-0.613	0.002	0.004
1LIG	C	3	-0.492	-0.091	-0.002
1LIG	C	4	-0.361	-0.013	0.004
1LIG	C	5	-0.240	-0.106	-0.003
1LIG	C	6	-0.109	-0.027	0.005
1LIG	C	7	0.012	-0.119	-0.001
1LIG	H	8	-0.829	-0.008	0.003
1LIG	H	9	-0.751	-0.145	0.084
1LIG	H	10	-0.751	-0.135	-0.093
1LIG	H	11	-0.610	0.061	0.096
1LIG	H	12	-0.610	0.072	-0.080
1LIG	H	13	-0.495	-0.150	-0.095
1LIG	H	14	-0.496	-0.163	0.081
1LIG	H	15	-0.358	0.045	0.097
1LIG	H	16	-0.357	0.059	-0.079
1LIG	H	17	-0.243	-0.163	-0.096
1LIG	H	18	-0.244	-0.178	0.080
1LIG	H	19	-0.106	0.031	0.098
1LIG	H	20	-0.104	0.044	-0.078
1LIG	H	21	0.011	-0.190	0.083
1LIG	H	22	0.104	-0.061	0.004
1LIG	H	23	0.013	-0.177	-0.094
0.00000	0.00000	0.00000			

Con estos dos archivos procedemos a construir los sistemas de agua y n-heptano.

## 2. Construcción de las celdas de agua y n-heptano usando la herramienta genbox.

Vamos a construir dos celdas de dimensiones  $3 \times 3 \times 3 \text{ nm}^3$  usando las densidades del agua y del n-heptano, respectivamente. La densidad que vamos a utilizar para el agua es  $0.997 \text{ g/cm}^3$  y la del n-heptano es  $0,682 \text{ g/cm}^3$ .

Para la construcción de la celda del agua usamos el siguiente comando:

```
$ genbox -ci agua.gro -nmol 900 -box 3 3 3 -o aguabox.gro
```

La celda contiene un total de 900 moléculas de agua distribuidas de manera aleatoria. La salida final de gromacs en el terminal expresa lo siguiente:

```
Output configuration contains 2700 atoms in 900 residues
Volume           :           27 (nm^3)
Density          :       997.165 (g/l)
Number of SOL molecules:    900
```

Para la celda de n-heptano debemos modificar un archivo denominado vdwradii.dat contenido en la carpeta top de gromacs. Este archivo contiene los radios de vdw de diferentes átomos utilizados para construir las celdas con moléculas usando la herramienta genbox. En este caso, el radio de vdw para el carbono es 0.15 y lo reduciremos hasta 0.08 y para el hidrógeno el radio de vdw es 0.04 y lo reducimos hasta 0.02.

Para una celda de  $3 \times 3 \times 3 \text{ nm}^3$  se necesitan de 111 moléculas de n-heptano para obtener la densidad de este compuesto. Usamos el siguiente comando:

```
$ genbox -ci heptano.gro -nmol 111 -box 3 3 3 -o heptanobox.gro
```

La salida final de gromacs en el terminal expresa lo siguiente:

```
Output configuration contains 2553 atoms in 111 residues
Volume           :           27 (nm^3)
Density          :       684.041 (g/l)
Number of SOL molecules:    0
```

En las figuras 1, se muestran las celdas de los disolventes utilizados:

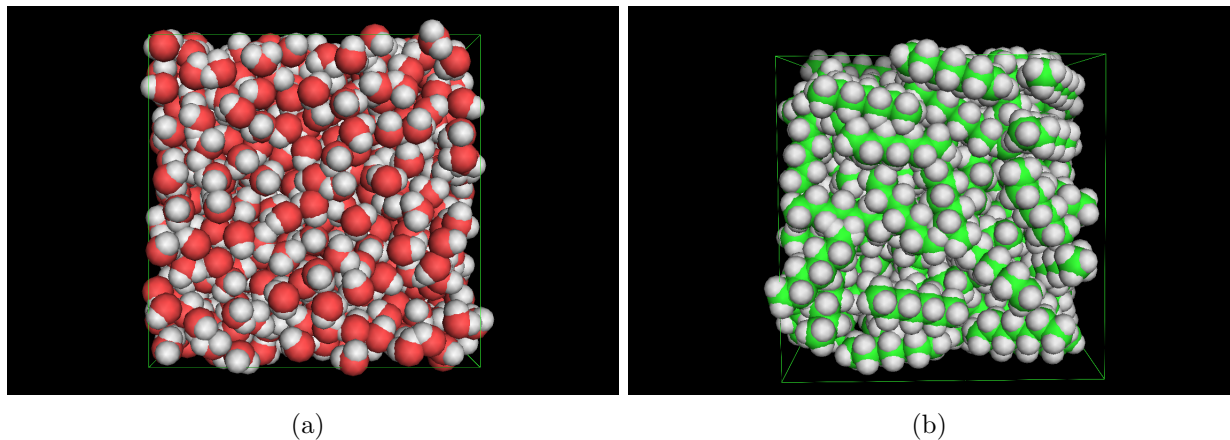


Figura 1: (a) Caja de agua obtenida usando el comando `-ci` de la herramienta `genbox`. (b) Caja de n-heptano obtenida usando el comando `-ci` de la herramienta `genbox`. Las imágenes fueron hechas con `pymol`.

### 3. Construcción del sistema bifásico agua/n-heptano usando la herramienta `genbox` y `editconf`.

Inicialmente, se deben modificar las cajas de agua y de n-heptano a lo largo del eje  $z$ . Vamos a considerar que las nuevas dimensiones  $xyz$  de la celda del sistema bifásico serán  $3 \times 3 \times 6.2 \text{ nm}^3$ . Usando la herramienta `editconf` modificamos las cajas de agua y de n-heptano que vamos a unir.

El comando para modificar la caja de agua es el siguiente:

```
$ editconf -f aguabox.gro -box 3 3 6.2 -center 1.5 1.5 1.5 -o aguabox1.gro
```

Como las dimensiones de la caja de agua es  $3 \times 3 \times 3 \text{ nm}^3$ , el centro en los ejes  $xy$  debe ser 1.5, que es la mitad de la longitud en dichos ejes. El desplazamiento a lo largo del eje  $z$  es 1.5.

Para el caso de la celda de n-heptano usamos el siguiente comando:

```
$ editconf -f heptanobox.gro -box 3 3 6.2 -center 1.5 1.5 3.1 -o heptanobox1.gro
```

De la misma forma, la caja de n-heptano es centrada en los ejes  $xy$  y desplazada a lo largo del eje  $z$  en la posición 4.6 nm. En la figura 2, se muestran las celdas de agua y n-heptano modificadas.

Ahora en el siguiente paso vamos a unir ambas celdas para que tengan las capas de agua y n-heptano.

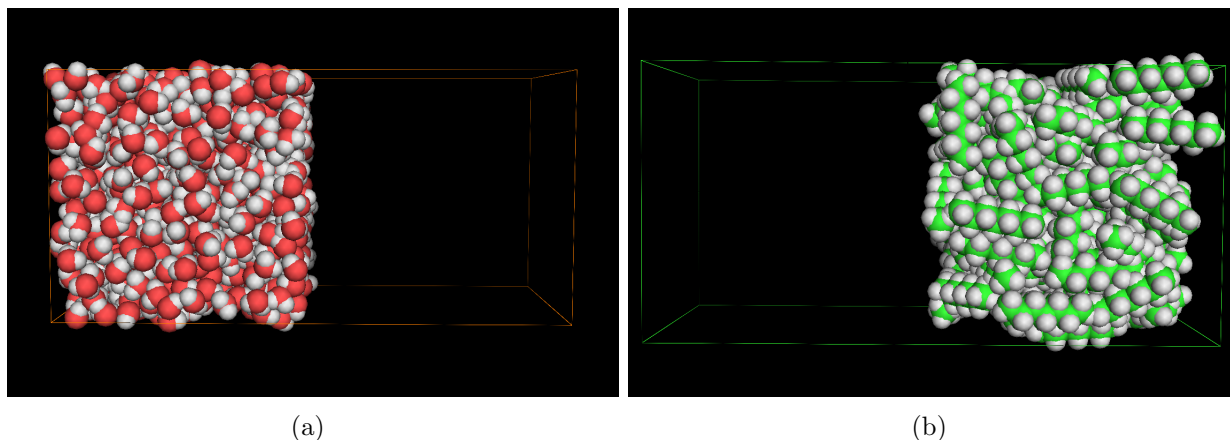


Figura 2: (a) Capa de agua obtenida usando la herramienta editconf. (b) Capa de n-heptano obtenida usando la herramienta editconf. La imagenes fueron hechas con pymol.

El siguiente comando permite unir ambas celdas y formar el sistema bifásico:

```
$ genbox -cp heptanobox1.gro -cs aguabox1.gro -o sistemabifasico.gro
```

La salida en el terminal imprime la siguiente información:

```
Added 900 molecules
Generated solvent containing 2700 atoms in 900 residues
Writing generated configuration to sistemabifasico.gro
heptano

Output configuration contains 5253 atoms in 1011 residues
Volume           :      55.8 (nm^3)
Density          :      813.487 (g/l)
Number of SOL molecules:    900
```

En este caso el soluto es la celda de n-heptano y se identifica con el comando -cp. La celda de agua es identificada como el disolvente y se identifica con el comando -cs. El comando -o imprime el archivo de configuración en el formato de gromacs.

Este sistema contiene 111 moléculas de n-heptano y 900 moléculas de agua dentro de la celda. En la figura 3, se muestra el sistema bifásico construido usando las herramientas editconf y genbox.

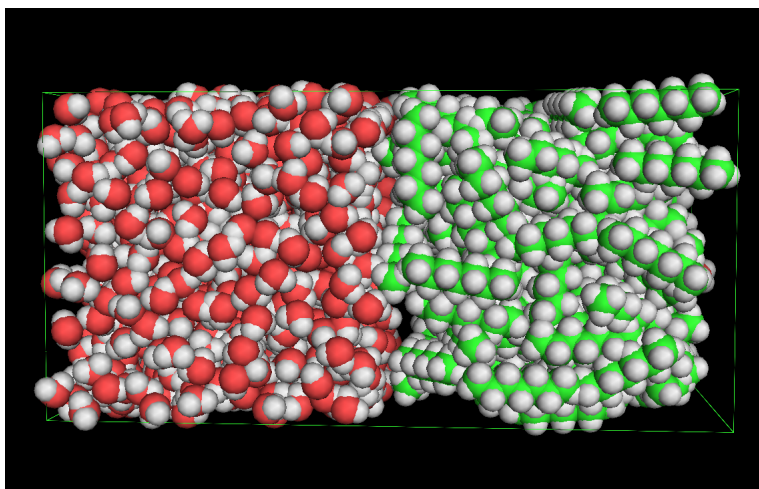


Figura 3: Sistema bifásico resultante. La imagen fue hecha con pymol.

#### 4. Construcción de un archivo de topología para el sistema bifásico agua/n-heptano usando la herramienta *g\_x2top*.

El archivo de topología contiene la información molecular de las especies en estudio. En otras palabras, los parámetros asociados al modelo de energía potencial que se utiliza para describir la molécula.

Aquí, vamos a utilizar la herramienta *g\_x2top* para construir la topología de una molécula simple como el n-heptano. El forcefield a utilizar es el OPLS-AA que describe muy bien a hidrocarburos y alcoholes. Este modelo fue propuesto por Jorgensen y colaboradores.

Usaremos el archivo heptano.gro para construir la topología de esta molécula. La siguiente línea de comando indica como generar la topología:

```
$ g_x2top -f heptano.gro -ff oplsa -name heptano -pairs -o heptano.top
```

En el terminal, el programa gromacs imprime la siguiente información la cual indica que el comando fue bien ejecutado:

```
Opening force field file /usr/share/gromacs/top/oplsaa.ff/atomname2type.n2t
There are 23 name to type translations in file oplsa.ff
Generating bonds from distances...
atom 23
```

There are 3 different atom types in your sample  
 Generating angles and dihedrals from bonds...  
 Before cleaning: 54 pairs  
 Before cleaning: 54 dihedrals  
 There are 6 Ryckaert-Bellemans dihedrals, 0 impropers, 42 angles  
 54 pairs, 22 bonds and 23 atoms  
 Total charge is -7.45058e-09, total mass is 100.205

WARNING: topologies generated by g\_x2top can not be trusted at face value.  
 Please verify atomtypes and charges by comparison to other  
 topologies.

Con el comando -f leemos el archivo de configuración heptano.gro, con -ff seleccionamos el  
 forcefield a utilizar y con el comando -name indicamos el nombre del sistema diseñado.  
 La información que contiene el archivo heptano.top es la siguiente:

```
; This is a include topology file
; It was generated using program:
; Generated by x2top
; Command line was:
; g_x2top -f heptano.gro -ff oplsa -name heptano -pairs -o heptano.top
; Force field was read from the standard Gromacs share directory.
;
; Include forcefield parameters
#include "oplsaa.ff/forcefield.itp"

[ moleculetype ]
; Name          nrexcl
heptano         3

[ atoms ]
;  nr          type  resnr  residue  atom  cgnr    charge    mass  typeB    chargeB
   1  opl_157    1    LIG     C     1     -0.18    12.011 ; qtot -0.18
   2  opl_158    1    LIG     C     1     -0.12    12.011 ; qtot -0.3
```



3	opls_158	1	LIG	C	1	-0.12	12.011	; qtot -0.42
4	opls_158	1	LIG	C	1	-0.12	12.011	; qtot -0.54
5	opls_158	1	LIG	C	1	-0.12	12.011	; qtot -0.66
6	opls_158	1	LIG	C	1	-0.12	12.011	; qtot -0.78
7	opls_157	1	LIG	C	1	-0.18	12.011	; qtot -0.96
8	opls_140	1	LIG	H	1	0.06	1.008	; qtot -0.9
9	opls_140	1	LIG	H	1	0.06	1.008	; qtot -0.84
10	opls_140	1	LIG	H	1	0.06	1.008	; qtot -0.78
11	opls_140	1	LIG	H	1	0.06	1.008	; qtot -0.72
12	opls_140	1	LIG	H	1	0.06	1.008	; qtot -0.66
13	opls_140	1	LIG	H	1	0.06	1.008	; qtot -0.6
14	opls_140	1	LIG	H	1	0.06	1.008	; qtot -0.54
15	opls_140	1	LIG	H	1	0.06	1.008	; qtot -0.48
16	opls_140	1	LIG	H	1	0.06	1.008	; qtot -0.42
17	opls_140	1	LIG	H	1	0.06	1.008	; qtot -0.36
18	opls_140	1	LIG	H	1	0.06	1.008	; qtot -0.3
19	opls_140	1	LIG	H	1	0.06	1.008	; qtot -0.24
20	opls_140	1	LIG	H	1	0.06	1.008	; qtot -0.18
21	opls_140	1	LIG	H	1	0.06	1.008	; qtot -0.12
22	opls_140	1	LIG	H	1	0.06	1.008	; qtot -0.06
23	opls_140	1	LIG	H	1	0.06	1.008	; qtot 0

[ bonds ]

; ai	aj	funct	c0	c1	c2	c3
1	2	1	1.530000e-01	4.000000e+05	1.530000e-01	4.000000e+05
1	8	1	1.090000e-01	4.000000e+05	1.090000e-01	4.000000e+05
1	9	1	1.100000e-01	4.000000e+05	1.100000e-01	4.000000e+05
1	10	1	1.100000e-01	4.000000e+05	1.100000e-01	4.000000e+05
2	3	1	1.530000e-01	4.000000e+05	1.530000e-01	4.000000e+05
2	11	1	1.090000e-01	4.000000e+05	1.090000e-01	4.000000e+05
2	12	1	1.090000e-01	4.000000e+05	1.090000e-01	4.000000e+05
3	4	1	1.530000e-01	4.000000e+05	1.530000e-01	4.000000e+05
3	13	1	1.100000e-01	4.000000e+05	1.100000e-01	4.000000e+05

3	14	1	1.100000e-01	4.000000e+05	1.100000e-01	4.000000e+05
4	5	1	1.530000e-01	4.000000e+05	1.530000e-01	4.000000e+05
4	15	1	1.100000e-01	4.000000e+05	1.100000e-01	4.000000e+05
4	16	1	1.100000e-01	4.000000e+05	1.100000e-01	4.000000e+05
5	6	1	1.530000e-01	4.000000e+05	1.530000e-01	4.000000e+05
5	17	1	1.090000e-01	4.000000e+05	1.090000e-01	4.000000e+05
5	18	1	1.100000e-01	4.000000e+05	1.100000e-01	4.000000e+05
6	7	1	1.520000e-01	4.000000e+05	1.520000e-01	4.000000e+05
6	19	1	1.100000e-01	4.000000e+05	1.100000e-01	4.000000e+05
6	20	1	1.090000e-01	4.000000e+05	1.090000e-01	4.000000e+05
7	21	1	1.100000e-01	4.000000e+05	1.100000e-01	4.000000e+05
7	22	1	1.090000e-01	4.000000e+05	1.090000e-01	4.000000e+05
7	23	1	1.100000e-01	4.000000e+05	1.100000e-01	4.000000e+05

[ pairs ]

;	ai	aj	funct	c0	c1	c2	c3
	1	4	1				
	1	13	1				
	1	14	1				
	2	5	1				
	2	15	1				
	2	16	1				
	3	6	1				
	3	8	1				
	3	9	1				
	3	10	1				
	3	17	1				
	3	18	1				
	4	7	1				
	4	11	1				
	4	12	1				
	4	19	1				
	4	20	1				

5	13	1
5	14	1
5	21	1
5	22	1
5	23	1
6	15	1
6	16	1
7	17	1
7	18	1
8	11	1
8	12	1
9	11	1
9	12	1
10	11	1
10	12	1
11	13	1
11	14	1
12	13	1
12	14	1
13	15	1
13	16	1
14	15	1
14	16	1
15	17	1
15	18	1
16	17	1
16	18	1
17	19	1
17	20	1
18	19	1
18	20	1
19	21	1
19	22	1

19	23	1
20	21	1
20	22	1
20	23	1

[ angles ]

;	ai	aj	ak	funct	c0	c1	c2	c3
	2	1	8	1	1.100000e+02	4.000000e+02	1.100000e+02	4.000000e+02
	2	1	9	1	1.110000e+02	4.000000e+02	1.110000e+02	4.000000e+02
	2	1	10	1	1.110000e+02	4.000000e+02	1.110000e+02	4.000000e+02
	8	1	9	1	1.080000e+02	4.000000e+02	1.080000e+02	4.000000e+02
	8	1	10	1	1.080000e+02	4.000000e+02	1.080000e+02	4.000000e+02
	9	1	10	1	1.080000e+02	4.000000e+02	1.080000e+02	4.000000e+02
	1	2	3	1	1.120000e+02	4.000000e+02	1.120000e+02	4.000000e+02
	1	2	11	1	1.090000e+02	4.000000e+02	1.090000e+02	4.000000e+02
	1	2	12	1	1.090000e+02	4.000000e+02	1.090000e+02	4.000000e+02
	3	2	11	1	1.100000e+02	4.000000e+02	1.100000e+02	4.000000e+02
	3	2	12	1	1.100000e+02	4.000000e+02	1.100000e+02	4.000000e+02
	11	2	12	1	1.070000e+02	4.000000e+02	1.070000e+02	4.000000e+02
	2	3	4	1	1.120000e+02	4.000000e+02	1.120000e+02	4.000000e+02
	2	3	13	1	1.100000e+02	4.000000e+02	1.100000e+02	4.000000e+02
	2	3	14	1	1.100000e+02	4.000000e+02	1.100000e+02	4.000000e+02
	4	3	13	1	1.090000e+02	4.000000e+02	1.090000e+02	4.000000e+02
	4	3	14	1	1.100000e+02	4.000000e+02	1.100000e+02	4.000000e+02
	13	3	14	1	1.070000e+02	4.000000e+02	1.070000e+02	4.000000e+02
	3	4	5	1	1.120000e+02	4.000000e+02	1.120000e+02	4.000000e+02
	3	4	15	1	1.090000e+02	4.000000e+02	1.090000e+02	4.000000e+02
	3	4	16	1	1.100000e+02	4.000000e+02	1.100000e+02	4.000000e+02
	5	4	15	1	1.100000e+02	4.000000e+02	1.100000e+02	4.000000e+02
	5	4	16	1	1.100000e+02	4.000000e+02	1.100000e+02	4.000000e+02
	15	4	16	1	1.070000e+02	4.000000e+02	1.070000e+02	4.000000e+02
	4	5	6	1	1.110000e+02	4.000000e+02	1.110000e+02	4.000000e+02
	4	5	17	1	1.100000e+02	4.000000e+02	1.100000e+02	4.000000e+02

4	5	18	1	1.100000e+02	4.000000e+02	1.100000e+02	4.000000e+02
6	5	17	1	1.100000e+02	4.000000e+02	1.100000e+02	4.000000e+02
6	5	18	1	1.090000e+02	4.000000e+02	1.090000e+02	4.000000e+02
17	5	18	1	1.070000e+02	4.000000e+02	1.070000e+02	4.000000e+02
5	6	7	1	1.110000e+02	4.000000e+02	1.110000e+02	4.000000e+02
5	6	19	1	1.100000e+02	4.000000e+02	1.100000e+02	4.000000e+02
5	6	20	1	1.100000e+02	4.000000e+02	1.100000e+02	4.000000e+02
7	6	19	1	1.090000e+02	4.000000e+02	1.090000e+02	4.000000e+02
7	6	20	1	1.090000e+02	4.000000e+02	1.090000e+02	4.000000e+02
19	6	20	1	1.070000e+02	4.000000e+02	1.070000e+02	4.000000e+02
6	7	21	1	1.110000e+02	4.000000e+02	1.110000e+02	4.000000e+02
6	7	22	1	1.100000e+02	4.000000e+02	1.100000e+02	4.000000e+02
6	7	23	1	1.110000e+02	4.000000e+02	1.110000e+02	4.000000e+02
21	7	22	1	1.080000e+02	4.000000e+02	1.080000e+02	4.000000e+02
21	7	23	1	1.080000e+02	4.000000e+02	1.080000e+02	4.000000e+02
22	7	23	1	1.080000e+02	4.000000e+02	1.080000e+02	4.000000e+02

[ dihedrals ]

;	ai	aj	ak	al	funct	c0	c1	c2	c3	c4	c5
	8	1	2	3	3	3.6e+02	5.0e+00	3.0e+00	3.6e+02	5.0e+00	3.0e+00
	1	2	3	4	3	3.6e+02	5.0e+00	3.0e+00	3.6e+02	5.0e+00	3.0e+00
	2	3	4	5	3	3.6e+02	5.0e+00	3.0e+00	3.6e+02	5.0e+00	3.0e+00
	3	4	5	6	3	3.0e+00	5.0e+00	3.0e+00	3.0e+00	5.0e+00	3.0e+00
	4	5	6	7	3	3.6e+02	5.0e+00	3.0e+00	3.6e+02	5.0e+00	3.0e+00
	5	6	7	21	3	3.58e+02	5.0e+00	3.0e+00	3.58e+02	5.0e+00	3.0e+00

[ system ]

; Name  
heptano

[ molecules ]

; Compound            #mols  
heptano                1

Con el agua usaremos la información del archivo spc.itp para describir a las moléculas del agua con el modelo single point center. El archivo spc.itp tiene la siguiente información:

```
[ moleculetype ]
; molname nrexcl
    SOL    2

[ atoms ]
;   nr   type  resnr residue  atom   cgnr   charge   mass
    1  opls_116  1    SOL    OW     1     -0.82
    2  opls_117  1    SOL    HW1    1      0.41
    3  opls_117  1    SOL    HW2    1      0.41

#ifdef FLEXIBLE
[ settles ]
; OW funct doh dhh
1 1  0.1 0.16330

[ exclusions ]
1 2 3
2 1 3
3 1 2
#else
[ bonds ]
; i j funct length force.c.
1 2 1 0.1 345000 0.1    345000
1 3 1 0.1 345000 0.1    345000

[ angles ]
; i j k funct angle force.c.
2 1 3 1 109.47 383 109.47 383
#endif
```

Vamos a modificar esta información de la siguiente forma:

```

[ moleculetype ]
; molname nrexcl
  agua  3

[ atoms ]
;  nr  type  resnr  residue  atom  cgnr  charge  mass
   1  opls_116  1    HOH    O    1    -0.82
   2  opls_117  1    HOH    H    1     0.41
   3  opls_117  1    HOH    H    1     0.41

#ifdef FLEXIBLE
[ settles ]
; OW funct doh dhh
1 1  0.1 0.16330

[ exclusions ]
1 2 3
2 1 3
3 1 2
#else
[ bonds ]
; i j funct length force.c.
1 2 1 0.1 345000 0.1    345000
1 3 1 0.1 345000 0.1    345000

[ angles ]
; i j k funct angle force.c.
2 1 3 1 109.47 383 109.47 383
#endif

```

Abrimos el archivo heptano.top y agregamos la información anterior donde termina la información de la topología del n-heptano.

Esto debe quedar de la siguiente forma:

```

...
  21    7    22    1  1.080000e+02  4.000000e+02  1.080000e+02  4.000000e+02
  21    7    23    1  1.080000e+02  4.000000e+02  1.080000e+02  4.000000e+02
  22    7    23    1  1.080000e+02  4.000000e+02  1.080000e+02  4.000000e+02

```

[ dihedrals ]

```

; ai    aj    ak    al funct    c0      c1      c2      c3      c4      c5
  8     1     2     3     3  3.6e+02  5.0e+00  3.0e+00  3.6e+02  5.0e+00  3.0e+00
  1     2     3     4     3  3.6e+02  5.0e+00  3.0e+00  3.6e+02  5.0e+00  3.0e+00
  2     3     4     5     3  3.6e+02  5.0e+00  3.0e+00  3.6e+02  5.0e+00  3.0e+00
  3     4     5     6     3  3.0e+00  5.0e+00  3.0e+00  3.0e+00  5.0e+00  3.0e+00
  4     5     6     7     3  3.6e+02  5.0e+00  3.0e+00  3.6e+02  5.0e+00  3.0e+00
  5     6     7    21     3  3.58e+02  5.0e+00  3.0e+00  3.58e+02  5.0e+00  3.0e+00

```

[ moleculetype ]

```

; molname nrexcl
  agua    3

```

[ atoms ]

```

; nr  type  resnr  residue  atom  cgnr  charge  mass
  1  opls_116  1    HOH     O     1    -0.82
  2  opls_117  1    HOH     H     1     0.41
  3  opls_117  1    HOH     H     1     0.41

```

```

#ifdef FLEXIBLE

```

[ settles ]

```

; OW funct doh dhh
1 1 0.1 0.16330

```

[ exclusions ]

```

1 2 3
2 1 3
3 1 2

```



```

#else
[ bonds ]
; i j funct length force.c.
1 2 1 0.1 345000 0.1      345000
1 3 1 0.1 345000 0.1      345000

[ angles ]
; i j k funct angle force.c.
2 1 3 1 109.47 383 109.47 383

[ system ]
; Name
heptano

[ molecules ]
; Compound      #mols
heptano         111
agua           900

```

Con esta modificación ya tenemos la información de las dos moléculas en la topología. A su vez, se introduce la cantidad de moléculas presentes en el archivo de configuración. Guarden este archivo y ya tenemos una topología para simular dicho sistema bifásico.

#### 4. Minimización del sistema bifásico agua/n-heptano.

Para realizar la minimización de la energía del sistema bifásico agua/n-heptano se requiere de un tercer archivo que contenga la información de los parámetros para realizar la simulación. Este archivo tiene la extensión \*.mdp.

Gromacs requiere de tres archivos en total para poder realizar una simulación como tal. Los archivos son \*.gro, \*.top y \*.mdp. Es decir, configuración, topología y condiciones de la simulación.

El archivo de minimización ejemplo, contiene la siguiente información:

```

define                = -DFLEXIBLE
integrator            = steep

```

```
tinit          = 0.0
dt             = 0.001
nsteps        = 100000
nstcomm       = 1
nstxout       = 100
nstvout       = 100
nstfout       = 100
nstlog        = 100
nstenergy     = 100
nstlist       = 5
energygrps    = system
ns_type       = grid
pbc           = xyz

; Constraints
constraints    = none
constraint_algorithm = lincs

;Treatment of Vdw and Elctrostatics
vdwtype        = cut-off
rlist          = 1.30
rvdw           = 1.40
coulombtype    = PME
rcoulomb       = 1.30
fourierspacing = 0.10
pme_order      = 6
ewald_rtol     = 1e-06
optimize_fft   = yes
DispCorr       = EnerPres

; Temperature coupling is on
Tcoupl         = berendsen
```

```

tau_t           = 0.1
tc-grps        = system
ref_t          = 300
V-rescale

; Pressure coupling is on
Pcoupl         = no
pcoupltype     = isotropic
tau_p          = 2
compressibility = 4.5e-5
ref_p          = 1.0

; Generate velocities is on at 298K
gen_vel        = yes
gen_temp       = 298.15
gen_seed       = 173529

```

En este procedimiento haremos una minimización con el método steep descent. Luego en un terminal procedemos de la siguiente forma usando la herramienta grompp que es un preprocesador que permite verificar todos los parámetros de la simulación (configuración, topología y comandos de simulación):

```
$ grompp -f minimizacion.mdp -p sistemabifasico.top -c sistemabifasico.gro
```

En el terminal se imprime la siguiente información:

```

Generated 332520 of the 332520 non-bonded parameter combinations
Generating 1-4 interactions: fudge = 0.5
Generated 332520 of the 332520 1-4 parameter combinations
Excluding 3 bonded neighbours molecule type 'hept'
Excluding 3 bonded neighbours molecule type 'agua'
Analysing residue names:
There are:  111      Other residues
There are:  900      Water residues
Analysing residues not classified as Protein/DNA/RNA/Water and splitting into groups...

```

Number of degrees of freedom in T-Coupling group System is 15756.00  
Largest charge group radii for Van der Waals: 0.103, 0.103 nm  
Largest charge group radii for Coulomb: 0.103, 0.103 nm  
Calculating fourier grid dimensions for X Y Z  
Using a fourier grid of 30x30x64, spacing 0.100 0.100 0.097  
Estimate for the relative computational load of the PME mesh part: 0.30  
This run will generate roughly 184 Mb of data

Ahora para correr el cálculo se puede escribir en el terminal, el siguiente comando:

```
$ mdrun -np 1 -nt 4 -v
```

Esta línea de comandos expresa el número de procesadores a utilizar que es uno con cuatro thread.