

University of Groningen

MD of H₂O. A molecular dynamics study of water

Postma, Johannes Petrus Maria

IMPORTANT NOTE: You are advised to consult the publisher's version (publisher's PDF) if you wish to cite from it. Please check the document version below.

Document Version

Publisher's PDF, also known as Version of record

Publication date:

1985

[Link to publication in University of Groningen/UMCG research database](#)

Citation for published version (APA):

Postma, J. P. M. (1985). *MD of H₂O. A molecular dynamics study of water*. s.n.

Copyright

Other than for strictly personal use, it is not permitted to download or to forward/distribute the text or part of it without the consent of the author(s) and/or copyright holder(s), unless the work is under an open content license (like Creative Commons).

The publication may also be distributed here under the terms of Article 25fa of the Dutch Copyright Act, indicated by the "Taverne" license. More information can be found on the University of Groningen website: <https://www.rug.nl/library/open-access/self-archiving-pure/taverne-amendment>.

Take-down policy

If you believe that this document breaches copyright please contact us providing details, and we will remove access to the work immediately and investigate your claim.

Downloaded from the University of Groningen/UMCG research database (Pure): <http://www.rug.nl/research/portal>. For technical reasons the number of authors shown on this cover page is limited to 10 maximum.

Samenvatting

Voor het uitvoeren van een Moleculaire Dynamica studie van grote moleculen, zoals eiwitten, in water is een simpel doch betrouwbaar interactiemodel voor water noodzakelijk. De ontwikkeling en het testen van zo'n interactiepotentiaal voor water (SPC - Simple Point Charge model) staat centraal in dit proefschrift.

Tevens wordt een isotherm-isobaar MD algoritme behandeld om gedurende een simulatie de temperatuur en druk van het bestudeerde systeem te kunnen reguleren.

Het bepalen van vrije energie, een grootte die niet direkt beschikbaar is in een Moleculaire Dynamica berekening, komt aan de orde in het kader van het oplossen van een deeltje in water.

Moleculaire Dynamica is in essentie een computer simulatie methode om de gekoppelde klassieke bewegingsvergelijkingen van een aantal deeltjes (atomen-moleculen), die interactie met elkaar hebben, op te lossen. Het aantal deeltjes varieert in de meeste gevallen van enkele honderden tot enkele duizenden. De interactie die de deeltjes onderling hebben wordt beschreven door een interactie potentiaal, die zo goed modelijk gedefinieerd moet worden, opdat het gesimuleerde systeem de werkelijke situatie nauwkeurig genoeg beschrijft. De Moleculaire Dynamica methode geeft de tijdsontwikkeling weer van een systeem van interagerende deeltjes. Op deze manier is het mogelijk om zowel structurele (statische) als dynamische eigenschappen van het systeem te bestuderen.

Na een inleidend hoofdstuk, waarin de alledaagse en wetenschappelijke kennis omtrent water zeer kort wordt beschreven, worden in hoofdstuk II enkele theoretische benaderingsmethoden beschreven en diverse typen interactie potentialen geïntroduceerd. Tevens wordt de Moleculaire Dynamica methode kort uiteengezet.

Hoofdstuk III bevat een overzicht waarin de meeste interactie potentialen, die tot nu toe voor water zijn ontwikkeld, worden behandeld.

In hoofdstuk IV komt de ontwikkeling van het SPC model uitvoerig aan de orde en worden enkele resultaten met een aantal veel gebruikte andere modellen vergeleken.

Structurele, dynamische en thermodynamische eigenschappen van een systeem van watermoleculen, berekend met behulp van het SPC model worden in het volgende hoofdstuk (hoofdstuk V) behandeld. Geconcludeerd mag worden

dat, gezien de eenvoud van het model, de meeste eigenschappen van water op bevredigende wijze worden beschreven.

In een Moleculaire Dynamica simulatie bestaat vaak de behoefte om de temperatuur en druk van het bestudeerde systeem binnen bepaalde grenzen constant te houden. In hoofdstuk VI wordt zo'n isotherm-isobaar MD algoritme beschreven en getest aan een systeem van water moleculen. Kortweg gezegd komt het algoritme erop neer dat het gesimuleerd systeem gekoppeld wordt aan een warmte en/of druk bad.

Hoofdstuk VII bevat een uitvoerige studie van de creatie van een cavity (holte) in water. Het vormen van een cavity in water kan beschouwd worden als een eerste stap in het oplossen van een deeltje (atoom of molecuul) in water. De interessante grootte, die hierbij van belang is, is de Gibbs vrije energie. Deze grootte is echter niet direkt toegankelijk in een Moleculaire Dynamica methode. In dit hoofdstuk worden twee manieren beschreven om deze vrije enthalpie te bepalen. Beide methoden worden vergeleken met de statistisch mechanische Scaled Particle Theory (SPT).

Ondanks het feit dat het SPC model een star model is, d.w.z. dat de bindingslengten en bindingshoek gedurende de simulatie constant gehouden worden kan toch iets gezegd worden over de storing op de intramoleculaire vibraties. In het laatste hoofdstuk (hoofdstuk VIII) wordt de storing op deze interne vibraties behandeld. Hierin worden vibratie spectra behandeld. De voornaamste conclusie is dat de verschuiving en verbreding van de fundamentele frequenties gerelateerd is aan het aantal en de sterkte van de intermoleculaire waterstof bindingen waarin een molecuul als een waterstof brug donor participeert.