Molekulardynamik

AST Übung

Molekulardynamik

- Simulation atomarer / molekularer Systeme
- "Klassische" Mechanik:
- Iterativ:
  - Berechne auf Atome wirkende Kräfte
  - Bewege die Atome entsprechend

Anwendung

Bioinformatik

- "Refinement" von Strukturmodellen
- Konformationsänderungen, "docking"
- Faltung, Strukturvorhersage

MatWerk / Physik

- Agg. Materialeigenschaften
- Verhalten von Ionen

Klassische Mechanik

Gegeben: Position $\mathbf{x}_t$ und Geschwindigkeit $\mathbf{v}_t$ zu Zeitpunkt t

Gesucht: Position $\mathbf{x}_{t+\delta t}$ und Geschwindigkeit $\mathbf{v}_{t+\delta t}$ zu Zeitpunkt $t + \delta t$

(Starke) Approximation:

$$\mathbf{x}_{t+\delta t} \approx \mathbf{x}_t + \delta t \mathbf{v}_t$$

$$\mathbf{v}_{t+\delta t} \approx \mathbf{v}_t + \delta t \mathbf{a}_t$$

$\Rightarrow$ Entwicklungsverlauf des Systems, wenn $\mathbf{a}_t$ berechenbar

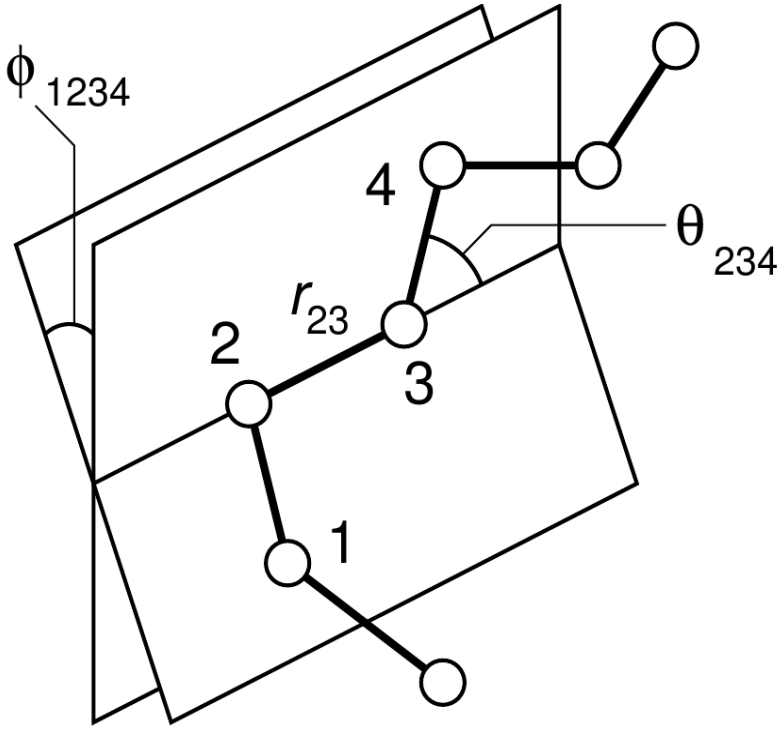
Beschleunigung

$$F = -\nabla U = ma$$

$$\Rightarrow \mathbf{a} = \frac{F(\mathbf{x})}{m} = \frac{-\nabla U(\mathbf{x})}{m}$$

$\Rightarrow$ Approximation der potentiellen Energie benötigt

Kovalente Potentiale



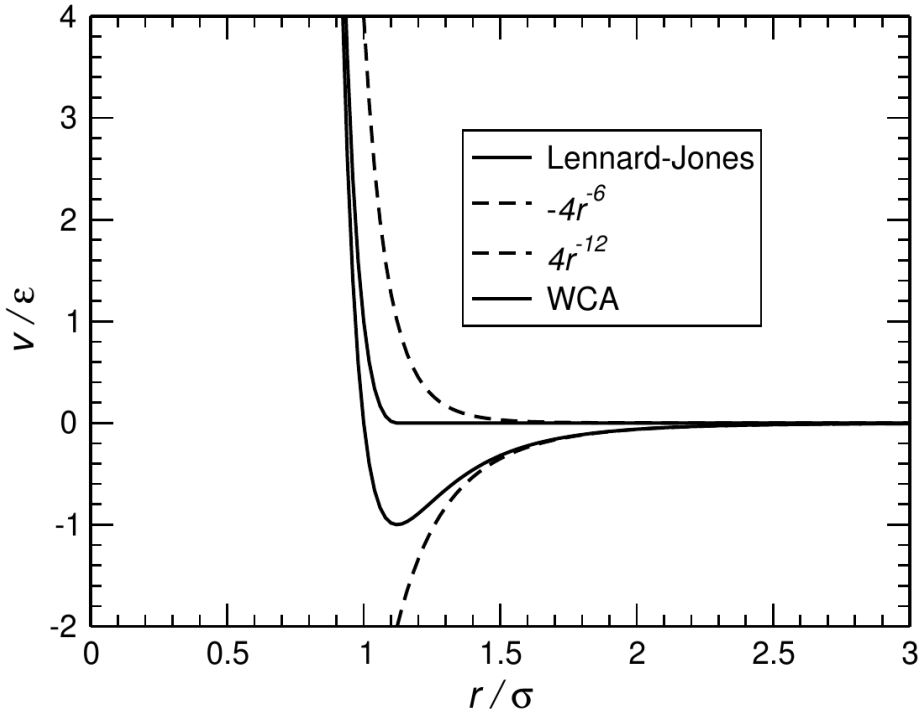
$$\mathcal{U}_{\text{intramolecular}} = \frac{1}{2}\sum_{\text{bonds}} k_{ij}^{r}\left(r_{ij} - r_{\text{eq}}\right)^2 + \frac{1}{2}\sum_{\substack{\text{bend}\\ \text{angles}}} k_{ijk}^{\theta}\left(\theta_{ijk} - \theta_{\text{eq}}\right)^2 + \frac{1}{2}\sum_{\substack{\text{torsion}\\ \text{angles}}}\sum_{m} k_{ijkl}^{\phi,m}\left(1 + \cos(m\phi_{ijkl} - \gamma_m)\right)$$

Michael P Allen et al. "Introduction to molecular dynamics simulation". In: *Computational soft matter: from synthetic polymers to proteins* 23 (2004), pp. 1–28.

Elektrostatik

$$v^{\text{Coulomb}}(r) = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

Lennard-Jones



$$v^{\mathrm{LJ}}(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r}\right)^{6} \right]$$

Michael P Allen et al. "Introduction to molecular dynamics simulation". In: *Computational soft matter: from synthetic polymers to proteins* 23 (2004), pp. 1–28.

Algorithmus

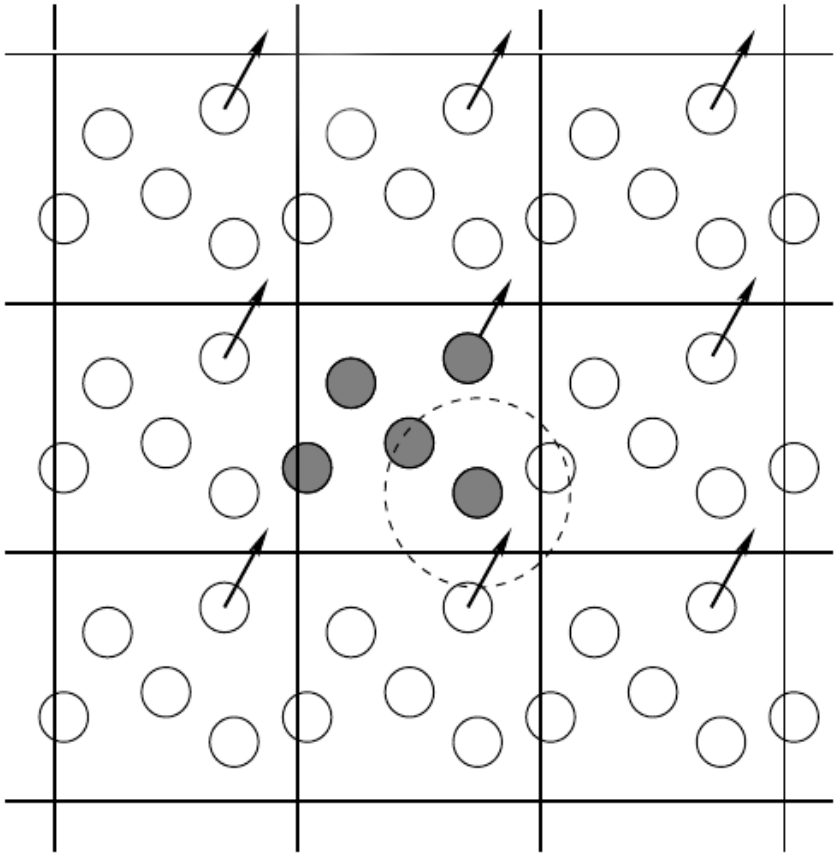
Iterationen (feste Anzahl):

1. Berechne potentielle Energie und wirkende Kräfte
2. Berechne neue Positionen und Geschwindigkeiten
3. Aktualisiere Zeit

Phasen

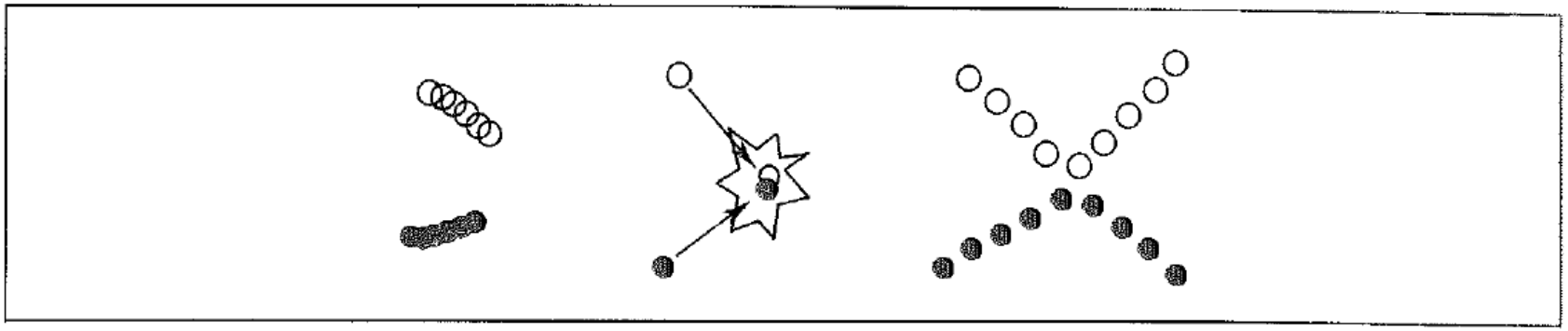
1. Strukturvorbereitung
   - Struktur "aufräumen"
   - Wasser und Ionen entfernen / hinzufügen
   - Initiale Energieminimierung
2. Equilibration
   - Temperatur
   - Potentielle Energie $\leftrightarrows$ kinetische Energie
3. Produktion

Randbedingungen



Michael P Allen et al. "Introduction to molecular dynamics simulation". In: *Computational soft matter: from synthetic polymers to proteins* 23 (2004), pp. 1–28.

δ t



- Klein genug für physikalische Korrektheit
- Groß genug für sinnvolle Ergebnisse
- Typischer weise 1 - 2 fs ($10^{-15}s$)
- Konformationsänderunen dauern Nanosekunden ($10^{-9}s$)
- Faltung dauert Millisekunden ($10^{-3}s$)

Andrew R Leach and Andrew R Leach. *Molecular modelling: principles and applications*. Pearson education, 2001.