



Τεχνολογικό  
Πανεπιστήμιο  
Κύπρου

Σχολή Γεωπονικών  
Επιστημών και  
Διαχείρισης  
Περιβάλλοντος

**Πτυχιακή εργασία**

**ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΕΛΕΥΘΕΡΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ ΔΙΑΛΥΣΗΣ  
ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ**

**Αντρέας Παλάζης**

**Λεμεσός, Μάιος 2017**



ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΚΟ ΠΑΝΕΠΙΣΤΗΜΙΟ ΚΥΠΡΟΥ  
ΣΧΟΛΗ ΓΕΩΤΕΧΝΙΚΩΝ ΕΠΙΣΤΗΜΩΝ ΚΑΙ ΔΙΑΧΕΙΡΙΣΗΣ  
ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ  
ΤΜΗΜΑ ΕΠΙΣΤΗΜΗΣ ΚΑΙ ΤΕΧΝΟΛΟΓΙΑΣ ΠΕΡΙΒΑΛΛΟΝΤΟΣ

Πτυχιακή εργασία

ΥΠΟΛΟΓΙΣΜΟΣ ΤΗΣ ΕΛΕΥΘΕΡΗΣ ΕΝΕΡΓΕΙΑΣ ΔΙΑΛΥΣΗΣ  
ΜΕ ΤΗ ΜΕΘΟΔΟ ΤΗΣ ΜΟΡΙΑΚΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ

του

Αντρέα Παλάζη

Επιβλέπων Καθηγητής  
Δρ. Ευάγγελος Δασκαλάκης

Λεμεσός, Μάιος 2017

## **Πνευματικά δικαιώματα**

Copyright © Αντρέας Παλάζης, 2017

Με επιφύλαξη παντός δικαιώματος. All rights reserved.

Η έγκριση της πτυχιακής εργασίας από το Τμήμα επιστήμης και τεχνολογίας περιβάλλοντος του Τεχνολογικού Πανεπιστημίου Κύπρου δεν υποδηλώνει απαραίτητως και αποδοχή των απόψεων του συγγραφέα εκ μέρους του Τμήματος.

## **ΕΥΧΑΡΙΣΤΙΕΣ**

Θα ήθελα να ευχαριστήσω ιδιαίτερα τον επιβλέπων καθηγητή μου Δρ. Ευάγγελο Δασκαλάκη, για την καθοδήγηση και άμεση βοήθεια που παρείχε καθ' όλη την διάρκεια διεκπεραίωσης της διπλωματικής έρευνας. Επίσης ευχαριστώ θερμά την διδακτορική φοιτήτρια Αναστασία Σαλάμεγ για την υποστήριξη και βοήθεια που έδωσε, χωρίς την οποία η εργασία αυτή δεν θα ήταν δυνατή. Τέλος θέλω να ευχαριστήσω την οικογένεια και τους φίλους μου που ήταν πάντα δίπλα μου σε κάθε βήμα στηρίζοντας τις επιλογές μου με υπομονή.

## ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η παρούσα πτυχιακή εργασία επικεντρώνεται στον υπολογισμό της ελεύθερης ενέργειας διαλυτοποίησης έντεκα οργανικών μορίων σε νερό με προσομοίωση μοριακής δυναμικής. Αναλύεται το θεωρητικό υπόβαθρο για να κατανοηθούν βασικές έννοιες χρήσιμες για την συνέχεια της εργασίας καθώς επίσης και βασικές πληροφορίες για τα οργανικά μόρια που χρησιμοποιηθήκαν. Το δεύτερο κομμάτι της εργασίας επικεντρώνεται στην διεξαγωγή του πειράματος. Τα οργανικά σχεδιάστηκαν σε τρισδιάστατη δομή και με την βοήθεια του συντελεστή σύζευξης  $\lambda$  προσομοιώθηκε η διαλυτοποίηση τους σε νερό TIP4P/2005. Οι υπολογισμοί έγιναν με βοήθεια του υπολογιστικού πακέτου Gromacs. Για την ελαχιστοποίηση ενέργειας χρησιμοποιήθηκαν δύο μέθοδοι η steepest descent method και η L-BFGS. Χρησιμοποιήθηκαν δύο στατιστικά μοντέλα, σταθερής θερμοκρασίας και σταθερού όγκου. Το ενεργειακό προφίλ που προκύπτει για κάθε τιμή  $\lambda$  δίνει την ελεύθερη ενέργεια στο σύστημα με την χρήση του gmx-bar. Η εγκυρότητα του μοντέλου εξετάστηκε και τα αποτελέσματα συγκρίθηκαν με βιβλιογραφικά δεδομένα.

**Λέξεις κλειδιά:** Μοριακή δυναμική, Ελεύθερη ενέργεια διαλυτοποίησης, συντελεστής σύζευξης  $\lambda$ .

## **ABSTRACT**

This thesis focuses on the free energy of solvation calculations of eleven organic molecules in water using molecular dynamics simulation. The theoretical background is analyzed to understand basic information useful for the continuation of work as well as basic information on the organic molecules used. The second part of the thesis focuses on conducting the experiment. The organics were designed in a three-dimensional structure and solvation was simulated with the coupling parameter  $\lambda$  in water TIP4P/2005. The calculations were made using the Gromacs computational package. Steepest descent method and L-BFGS were used to minimize energy. Two statistical models, constant temperature and constant volume were used. The resulting energy profile for each  $\lambda$  gives the free energy to the system using gmx-bar. The validity of the model was checked and the results compared with bibliographic data.

**Keywords:** Molecular Dynamics, Free energy of solvation, Couple parameter  $\lambda$ .