

## Laboratorio 5 - (9 maggio 2006)

### 1 Simulazione con dinamica guidata nel vuoto

#### 1.1 Preparazione input per t=20ps

1. creare la directory ~/orac/Ala\_steer e copiarvi il file di input ~/infochim/biomol/orac/Ala\_steer/Ala.in
2. Notare le modifiche nell'input Ala.in, rispetto alla simulazione senza forzatura, usando il comando ediff di Emacs :

- (a) si parte da configurazione già ad  $\alpha$ -elica

```
&SETUP
  CRYSTAL 200. 200. 200.
  READ_PDB ../pdb/ala.pdb
&END
```

- (b) simulare N,V,T

```
&SIMULATION
  MDSIM
  TEMPERATURE 300.0 80.0
  THERMOS
    cofm 30.0
    solute 30.0
    solvent 30.0
    temp_limit 1000.
  END
&END
```

- (c) aggiornare i time-step

```
&INTEGRATOR
  TIMESTEP 4.0
  MTS_RESPA
    step intra 1
    step intra 2
    step nonbond 2 6.
    step nonbond 2 12.
    step nonbond 1 100.
    test_times OPEN energie
  END
&END
```

- (d) Aggiungere la forzatura lungo il legame tra l'atomo 1 e il 102, con costante di forza 500., da 15.9 a 31.5 Å

```
&POTENTIAL
  ADD_STR_BONDS 1 102 500.0 15.9 31.5
  [...]
  STRETCHING HEAVY
&END
```

- (e) far partire la forzatura da t=2ps a 22ps

```
&RUN
  REJECT 1000.
  STEER 2000. 22000.
  TIME 22000.
  [...]
&END
```

- (f) stampare il file del lavoro, e la struttura molecolare su file con nomi appropriati:

```
&INOUT
  ASCII 100.0 OPEN 20ps.pdb
  PLOT STEER 10.0 OPEN 20ps.wrk
&END
```

## 1.2 Visualizzare la dinamica con VMD:

```
pdb2vmd < 20ps.pdb > 20.pdb
```

## 1.3 Diagrammare il lavoro in funzione della distanza

1. selezionare righe dal file:

```
grep bond 20ps.wrk > 20.plt
```

1. diagrammare la 5 e 7 colonna con gnuplot:

## 1.4 Ripetere con diverso percorso di forzatura

1. Correggere input

- (a) tempi

```
&RUN
  [...]
  STEER 3000. 23000.
  TIME 23000.
  [...]
&END
```

## 1.5 Ripetere per tempi di forzatura di 50, 200, 500 ps

1. Correggere input

- (a) tempi

```
&RUN
  [...]
  STEER 2000. 52000.
  TIME 52000.
  [...]
&END
```

- (b) nomi dei file (eventualmente frequenze di salvataggio)

```
&INOUT
  ASCII 100.0 OPEN 50ps.pdb
  PLOT STEER 10.0 OPEN 50ps.wrk
&END
```

2. Diagrammare lavori tutti insieme:

```
gnuplot
plot '20.plt' u 5:7 w l, '50.plt' u 5:7 w l
```

## 1.6 fare un grafico del lavoro in funzione del tempo di forzatura

Si prepara una tabella a mano con emacs