

Laboratorio 4 - (17 aprile 2007)

1 Simulazione di deca-alanina con solvente.

1.1 Preparazione input

1. creare la directory `~/orac/Ala_solve` e copiarvi il file di input `~/signorini/biomol/orac/Ala_solv/Ala.in`
2. Notare le modifiche nell'input `Ala.in` usando il comando `ediff` di Emacs :

(a) aggiungere solvente

```
&SETUP
  CRYSTAL 28.  28.  28.
&END
&SOLUTE
  COORDINATES ../pdb/ala.pdb
&END
&SOLVENT
  CELL SC
  INSERT 1.4
  COORDINATES ../pdb/water.pdb
  GENERATE RANDOMIZE 9 9 9
&END
&PARAMETERS
  [...]
  JOIN SOLVENT
    hoh
  END
&END
```

(b) aggiornare i time-step

```
&INTEGRATOR
  TIMESTEP 10.0
  MTS_RESPA
    step intra 2
    step intra 2
    step nonbond 2 4.7
    step nonbond 3 7.5 reciprocal
    step nonbond 1 9.7
    test_times OPEN energie
  END
&END
```

(c) Ewald

```
&POTENTIAL
  EWALD PME 0.43 24 24 24 4
  [...]
&END
```

(d) salvare un restart

```
&INOUT
  RESTART
    write 500.0 OPEN Ala.rst
  END
  ASCII 200.0 OPEN 15.pdb
  PLOT STEER 5.0
  [...]
&END
```

3. Considerazioni sul calcolo dei dati di input

- (a) lato cella è opportuno che sia circa il doppio della lunghezza della proteina
- (b) densità dell'acqua:

$$\begin{aligned}\rho / amu \cdot A^{-3} &= \rho / g \cdot cm^{-3} \cdot \frac{g}{amu} \cdot \left(\frac{A}{cm} \right)^3 \\ &= \rho / g \cdot cm^{-3} \cdot N_A \cdot (10^{-8})^3 \\ &= \rho / g \cdot cm^{-3} \cdot 0.6023 \\ &\simeq 0.6\end{aligned}$$

Per n molecole di acqua in un box di lato L Angstrom:

$$\rho / amu \cdot A^{-3} = 0.6 = \frac{18n}{L^3}$$

Se $L = 28.0$, si ha $n = 724.4 \simeq 729 = 9^3$. Si può dunque scegliere

$$\begin{aligned}n &= 9 \\ L &= 28.0\end{aligned}$$

1.2 Equilibratura

1. lanciare, salvando un restart
2. notare quanto è più lenta la simulazione aggiungendo il solvente (circa 10 volte)
3. monitorare E
 - (a) ESLV scende
 - (b) ESLV-SLT scende?
 - (c) ESLT potrebbe salire
 - (d) EKIN oscilla a 300K
 - (e) EREAL scende , poi cost

Tutte queste grandezze sono listate nel file **energie**.

Si controllano usando **gnuplot**

4. Visualizzare il sistema in VMD
 - (a) ricordarsi di filtrare il pdb creato da ORAC con **pdb2vmd**
 - (b) si può vedere che già dopo 3 ps l' α -elica si apre alle estremità: usare **Extensions / Analysis / RMSD calculations** per allineare il primo e l'ultimo frame e vedere la variazione della struttura

1.3 Run con verifica della stabilità della conformazione della proteina

1. Lanciare il programma partendo dal restart: copiare il file di input `~signorini/biomol/orac/Ala_solv/restart.in` nella directory `~/orac/Ala_solv`