

Laboratorio 4 - (2 maggio 2006)

1 Manuale di ORAC

Il manuale di ORAC, con la spiegazione dettagliata dell'input, è su

<http://www.chim.unifi.it/orac/MAN>

2 Simulazione di deca-alanina con solvente.

2.1 Preparazione input

1. creare la directory ~/orac/Ala_solve copiarvi il file di input ~infochim/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/ala20.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) simulare N,p,T

```
&SIMULATION
  MDSIM
  TEMPERATURE 300.0 40.0
  THERMOS
    cofm 30.0
    solute 30.0
    solvent 30.0
    temp_limit 1000.
  END
  ISOSTRESS PRESS-EXT 0.1 BARO-MASS 10.0 COMPR 5.3e-4
&END
```

(c) 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
(d) Ewald
    &POTENTIAL
        EWALD PME 0.43 24 24 24 4
        [...]
    &END

```

(e) salvare un restart

```

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

```

3. Copiare il file `~infochim/biomol/orac/pdb/water.pdb` e le versioni aggiornate dei file TPG e PRM, che contengono le definizioni dell'acqua:

```

cp ~infochim/biomol/orac/pdb/water.pdb ~/orac/pdb/
cp ~infochim/biomol/orac/lib/* ~/orac/lib/

```

2.2 Equilibratura

1. lanciare, salvando un restart
2. monitorare E
 - (a) ESLV scende
 - (b) ESLV-SLT scende?
 - (c) ESLT potrebbe salire
 - (d) EKIN oscilla a 300K
 - (e) EREAL scende
 - (f) ETOT (Nosé) cost
 - (g) PV si aggiusta il Volume

Tutte queste grandezze sono listate nel file `test_times`.

Si controllano usando `gnuplot`

3. Monitorare, dall'output
 - (a) Volume
 - (b) Pressione

Queste grandezze si estraggono dal file di output con un comando tipo

```
post-out P="Volume TotPre" solv.out
```

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

2.3 Run con verifica della stabilità della conformazione della proteina

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