Corso di Laurea Magistrale in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2005/2006

Laboratorio 6 - (16 maggio 2006)

# 1 Strumenti UNIX

#### **1.1** plot

 $\dot{E}$  un comando (fatto da noi) per potere diagrammare file di dati da riga di comando.  $\dot{E}$  un'interfaccia per gnuplot.

#### 1.2 avg

Di una colonna di dati, fa media,<br/>  $\sigma,$  etc.

## 2 Simulazione con dinamica guidata in solvente.

#### 2.1 Run con t=20ps in parallelo

- 1. Si deve partire dal restart: copiare il file di input ~infochim/biomol/orac/Ala\_solv/steer.in nella directory ~/orac/Ala\_solv
- 2. sostituire il nome giusto del file di restart e di quelli di output

```
&INOUT
  RESTART
   read /home/infochim/biomol/orac/Ala_solv/@I.rst
  END
  ASCII 1000.0 OPEN solv.pdb
  PLOT STEER 16.0 OPEN solv.wrk
&END
dove c'è @I mettere il numero della propria postazione, es 12.rst
```

3. lanciare il programma (dovrebbe durare meno di mezz'ora)

#### 2.2 confronto con altri run

1. estrarre i dati diagrammabili dal file solv.wrk:

grep bond solv.wrk > solv.plt

- 2. copiare solv.plt su /home/infochim/tmp/ con il proprio nome di account
- 3. diagrammare tutte le curve; si può fare in modo compatto con

plot ~infochim/tmp/\* -5,7

#### 2.3 calcolare media e $\sigma$

1. tail -1 \*.plt| awk '/bond/ {print \$NF}' > dw

(a) si calcolano media e  $\sigma$ :

$$\bar{w} = \frac{1}{N} \sum w_i$$
$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N-1} \sum (w_i - \bar{w})^2}$$
$$\Delta G = \bar{w} - \frac{\beta \sigma^2}{2}$$

2. Si può fare anche direttamente con

avg dw

3. Es<br/>attamente, la formula per il  $\Delta G$  è

avg dw |awk 'NR==2 {print \$2-.2\*\$4}'

## 3 Visualizzazione e calcolo degli spostamenti atomici (RMSD)

### 3.1 preparare il file della traiettoria

#### 3.2 caricare solo la prima e ultima istantanea

- 1. caricare la traiettoria; poi distruggere dalla seconda istantanea in poi con Molecule > Delete frames
- 2. ricaricare come nuova molecola la stessa traiettoria distruggendo tutte le istantanee meno l'ultima
- 3. per entrambe le rappresentazioni scegliere ad es. Drawing method: tube e Coloring method: ColorID
- 4. In VMD Main, selezionare la prima molecola come T (top); magari rinominare la due molecole come first e last

### 3.3 calcolo RMSD

- 1. Da VMD Main > Extensions > Analysis scegliere RMSD Calculator
- 2. Nella finestra in alto a sx eseguire una selezione (ad es. all, o protein)
- 3. Verificare che nella finestra in basso a s<br/>x sono elencate le due molecole  $% \left( {{{\left[ {{{\left[ {{\left[ {{\left[ {{\left[ {{{\left[ {{{\left[ {{{\left[ {{{\left[ {{{\left[ {{{\left[ {{{\left[ {{{\left[ {{{\left[ {{{}}}} \right]}}}} \right.$
- 4. Calcolare gli RMSD pigiando il bottone relativo
- 5. Ripetere, dopo avere allineato (minimizzato le distanze tra gli atomi selezionati) con Align