Corso di Laurea Specialistica in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2006/2007

Laboratorio 3 - (3 aprile 2007)

1 Simulazione di deca-alanina a 300 K nel vuoto.

1.1 Analisi dei file di input

1. portarsi in `~/orac/Ala300` e visualizzare con `xemacs` il file di input di ORAC: (`Ala.in`); cercare la definizione dei file di input della topologia e dei parametri
2. individuare la parte *non-bonded* nei file dei parametri e della topologia

1.2 Analisi delle energie nella precedente simulazione

1. visualizzare il file delle energie ottenuto nella precedente simulazione (molecola nel vuoto a 300 K e E,V=cost) : `energie`
2. con gnuplot, diagrammare le energie cinetica, potenziale e totale:

   pl 'energie' u 0:7 w l, 'energie' u 0:8 w l, 'energie' u 0:9
   pl 'energie' u 0:7 w l, 'energie' u 0:8 w l, 'energie' u 0:($7+$8)

2 Minimizzazione

1. Si esegue la minimizzazione
   (a) con due metodi: Steepest Descent e Conjugate Gradient
   (b) a partire da una configurazione vicina al minimo (conf di partenza della propria traiettoria), e da una lontana, con l'α-elica elongata a 20Å: `../pdb/ala20.pdb`
2. Portarsi sulla directory `~/orac/Alamin`.
3. Modificare l'input `Ala.in`, in modo da eseguire una minimizzazione dell'energia della molecola:

```
&SETUP
[...]
  READ_PDB ../pdb/ala20.pdb
# oppure:  READ_PDB ../pdb/ala.pdb
&END

&SIMULATION
  MINIMIZE
  CG 0.00001
# oppure   SD 0.00001
  WRITE_GRADIENT
  END
&END
&POTENTIAL
[...]
  CUTOFF 100.
  STRETCHING
&END
```

4. lanciare il programma con l'input `Ala.in` usando la struttura di partenza della simulazione: `../pdb/ala.pdb`
5. ripetere la minimizzazione usando `~/orac/pdb/ala20.pdb` come struttura di partenza.
6. Visualizzare i risultati con vmd