Corso di Laurea Specialistica in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2007/2008

Laboratorio 2 - (8 aprile 2008)

---

1 Chignolina

1.1 ricerca informazioni in rete

1.1.1 ricerca info generali

1.1.2 ricercare e scaricare struttura PDB

1.2 analisi struttura

- leggere file PDB

  Analizzare in particolare le istruzioni

  - `SEQRES`
  - `MODEL`

- visualizzare con `vmd`

  - frames
  - graphics representations

2 Simulazioni con ORAC

2.1 il programma ORAC

presentazione del programma e dei file di input e output: `http://www.chim.unifi.it/u/signo/did/biomol/orac.pdf`

2.2 copia dei file di dati

1. Creare la directory `~orac` e copiarci tutto il contenuto di `/home/signorini/biomol/orac`
2. Osservare il contenuto delle varie directory

2.3 preparazione input per simulazione

2.3.1 input principale

Come già visto, definisce tre file di dati

1. coordinate (PDB)
2. topologia
3. parametri di potenziale

Questi file devono usare le stesse convenzioni sui nomi dei

- residui (es. `ile`, `gly-h`)
- atomi (es. `ca`, `hg21`)
- tipi atomici (es. `hc`)

Nell'istruzione `JOIN SOLUTE` va data la sequenza dei residui, che si può ricavare dal file PDB.

Ricordare che i due residui terminali sono definiti a parte nel file delle topo.

2.3.2 struttura

Si prende la prima struttura, “traducendola” per compatibilità con AMBER: `~orac/pdb/chignolin-a.pdb` ; si devono modificare i seguenti nomi di atomo:

```
HA2-> HA1
HA3-> HA2
HB2-> HB1
HB3-> HB2
HG2 PRO ->
HG3 PRO ->
HG2 GLU ->
HG3 GLU ->
HD2 PRO ->
HD3 PRO ->
```

2.3.3 topologia

2.3.4 parametri di potenziale

2.4 simulazione di chignolina a 300 K nel vuoto (E,V=cost).

1. portarsi in `~/orac/data`; si analizza il file di input di ORAC (`chigno.in`), in particolare i seguenti blocchi:
   - `&SETUP`
   - `&PARAMETERS`
   - `&SIMULATION`
   - `&RUN`
   - `&INOUT`
2. lanciare il programma con output sullo schermo

   ```
   orac < chigno.in
   ```

3. lanciare il programma con output su file

   ```
   orac < chigno.in > chigno.out
   ```