**Corso di Laurea Specialistica in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico**

**Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2007/2008**

# Laboratorio 3 - (15 aprile 2008)

---

## 1 Chignolina: minimizzazione energia

Si può eseguire la minimizzazione

- con due metodi: Steepest Descent e Conjugate Gradient
- a partire da varie configurazioni NMR

### 1.1 preparazione input ed esecuzione

1. Portarsi sulla directory di lavoro (es. `~/orac/data`).
2. Creare un input modificato (es `minim.in`) che esegua una minimizzazione dell'energia della molecola:

```
&SETUP
[...]
  READ_PDB ../pdb/chignolin.pdb
&END

&SIMULATION
  MINIMIZE
  CG 0.00001
# oppure   SD 0.00001
  WRITE_GRADIENT
  END
&END

&POTENTIAL
[...]
  CUTOFF 100.
  STRETCHING
&END

&INOUT
  ASCII 100.0 OPEN minim.pdb
&END

&RUN
  TIME 3000.0
  PRINT 100.0
  PROPERTY 100.0
&END
```

3. lanciare il programma usando la prima struttura NMR (es. `chignolin.pdb`)

### 1.2 analisi risultati

1. Visualizzare i risultati con `vmd`
2. Misurare gli RMSD con `vmd`
3. Analizzare i diversi contributi all'energia:
   `post-out P="TotPot NonBond Bonded" chigno.out > ene`
   `plot -1,2-4 ene`
4. Osservare
   (a) se vi è correlazione tra variazione nei RMSD e nell'energia
   (b) quale modifica conformazionale determina la massima variazione di energia
   (c) quale parte del potenziale guida la transizione verso il minimo

### 1.3 *(non fatto) ripetere partendo da altre strutture NMR*

1. *Estrarre una struttura NMR dal file del PDB*
2. *Modificare i nomi di atomo come per la struttura precedente (vedi lo scorso lab.)*