Corso di Laurea Specialistica in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2007/2008

Laboratorio 5 - (7 maggio 2008) - Esercitazione individuale

Simulazione di Dinamica Molecolare: chignolina in acqua nell'insieme (N,V,E). Analisi delle energie e delle strutture.

Dati di input

1. come struttura di partenza per la chignolina, utilizzare una delle strutture NMR che si trovano sulla directory `~signorini/biomol/orac/pdb/` con il nome `chigno-`***`nn`***`.PDB` ($nn = 01, .., 18$)
2. la struttura di una molecola di H_2O è sulla stessa directory, con il nome `water.pdb`
3. il file topologico contenente i residui della chignolina e la molecola di acqua è `~signorini/biomol/orac/lib/amber_all.tpg`
4. il corrispondente file del campo di forze è `~signorini/biomol/orac/lib/amber_all.prm`

Simulazione

Utilizzando il programma `orac`, eseguire una simulazione nell'insieme N,V,E con le seguenti caratteristiche:

- Temperatura iniziale = 300K
- fase di equilibratura di lunghezza sufficiente (verificare che in fase acquisizione l'energia cinetica media è stazionaria)
- fase acquisizione = 30 ps

Registrare la struttura del sistema (in formato PDB) con intervalli di 1 ps.

Risultati (entro oggi)

Spedire il file di output all'indirizzo `signo@chim.unifi.it`

Relazione (da consegnare martedì 13/5/08)

Nella relazione, discutere la simulazione, riportando i dati che si ritengono interessanti, tra cui almeno:

1. Dati del sistema simulato: volume del box, densità, temperatura
2. Durata della simulazione
3. Valori medi e deviazioni standard di
   (a) Energia totale, Energia Potenziale, Temperatura
   (b) (eventualmente) altre energie che si ritengano interessanti
4. Grafico delle energie totale, cinetica e potenziale in funzione del tempo, compresa la fase di equilibratura
5. Deviazioni quadratiche medie (RMSD) degli atomi pesanti rispetto alla struttura di partenza:
   (a) valore medio, massimo e minimo sulla simulazione (strutture registrate ogni 1 ps)
   (b) confronto della RMSD con la RMSD tra le 18 strutture NMR e con la RMSD della simulazione riportata in letteratura:
   `http://www.math.chalmers.se/Stat/Bioinfo/SBW2005/talks/SBW2005_T1_Seibert.pdf`
   (c) grafico dell'andamento della RMSD in funzione del tempo
6. Figura del sistema nella configurazione finale