Corso di Laurea Specialistica in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2007/2008

Laboratorio 7 - (27 maggio 2008) - Esercitazione individuale

Simulazione di Dinamica Molecolare Guidata: chignolina in acqua nell'insieme (N,V,T). Calcolo del ΔG di *unfolding*.

1 Calcolo del ΔG di *unfolding*

1.1 analisi dei risultati di tutte le simulazioni

1. copiare i file di tutte le traiettorie

```
ssh -X stufis06.fisica.unifi.it
mkdir ~/WRK
cd ~/WRK
scp guest@clxx.sm.chim.unifi.it:~signo/WRK/*.plt .
```

2. diagrammare energia in funzione della distanza; si può fare in modo compatto con

```
plot *.plt -5,7
```

1.2 calcolare media e σ

1. Il lavoro totale di una traiettoria è riportato nell'ultima riga del file relativo, ultima colonna.
   Si può creare un file con tutti i lavori finali con il comando:

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

2. Calcolare media e σ:

$$\bar{w} = \frac{1}{N} \sum w_i$$

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

   Media e σ si possono calcolare anche direttamente con

```
avg dw
```

3. Calcolare la differenza di energia libera:

$$\Delta G = \bar{w} - \frac{\beta \sigma^2}{2}$$

   Tenendo conto che a $T = 300$, $\beta^{-1} = 2.5\ kJ/mol$, questa formula si può programmare con

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

2 Visualizzazione e calcolo degli spostamenti atomici (RMSD)

2.1 caricare solo ultima istantanea di ciascun run

1. copiare i file PDB dell'ultima istantanea

```
ssh -X stufis06.fisica.unifi.it
mkdir ~/LAST-PDB
cd ~/LAST-PDB
scp guest@clxx..:~signo/LAST-PDB/* .
```

2. caricarle in VMD:

```
vmd *.PDB
```

3. calcolo RMSD
   Col metodo consueto, calcolare gli RMSD delle configurazioni finali

3 Relazione (consegnare entro la fine delle lezioni o almeno una settimana prima dell'esame)

Riportare in una relazione i risultati, ed il confronto con i dati pubblicati