Corso di Laurea Specialistica in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2008/2009

Laboratorio 2 - (31 marzo 2009)

---

1 Relazione: verifica della validità della distribuzione canonica delle energie nel solido di Einstein (e in problemi simili)

1.1 esercizi

Usare il programma `canon` per generare una distribuzione, e il programma `gnuplot` per diagrammare i risultati ed eseguire il fit

1. Studiamo un sistema con $\epsilon = \frac{E}{N} = 2$

   Verificare che per bassi valori di N, ad esempio $N = 2$, la funzione di distribuzione P_ν *non* ha andamento esponenziale.

   Trovare il valore minimo che deve avere N perché la funzione di distribuzione P_ν possa essere bene approssimata da una distribuzione canonica; in pratica, trovare il valore minimo di N tale che il fit dei dati sull'espressione

   $$P_\nu = \frac{e^{-\beta\epsilon_\nu}}{Z}$$

   dia

   (a) un valore di β che differisca di meno dell'1% dal valore teorico

   $$\lim_{E\to\infty} \beta = \lim \left(\frac{\partial \ln \Omega}{\partial E}\right)_N = \ln\left(1 + \frac{N-1}{E}\right)$$

   (b) una deviazione quadratica media dei dati che differisca di meno dell'1‰ dal valore della funzione a $\epsilon_\nu = 0$, cioè

   $$rms \leq \frac{1}{Z} \cdot 0.001$$

   Riportare P_ν per diversi valori di N su un grafico a scala logaritmica in modo da evidenziare la deviazione dall'andamento limite

2. Studiamo un sistema con $E = 10000$, $N = 1000$

   Trovare il numero minimo di mosse che si devono eseguire perché la funzione di distribuzione calcolata P_ν differisca da quella teorica

   $$P_\nu = \frac{(E-\nu+N-2)!}{(E-\nu)!(N-2)!} / \frac{(E+N-1)!}{E!\,(N-1)!}$$

   di meno dell'1‰ dal valore della funzione a $\epsilon_\nu = 0$, cioè

   $$rms \leq \frac{1}{Z} \cdot 0.001$$

   Ripetere il calcolo con $E = 100000, N = 1000$.

   Riportare P_ν calcolato e teorico per diversi valori del numero di mosse su un grafico a scala logaritmica.

2 Chignolina

2.1 ricerca informazioni in rete

2.1.1 ricerca info generali

2.1.2 ricercare e scaricare struttura PDB

2.2 analisi struttura

- leggere file PDB

  Analizzare in particolare le istruzioni

  - `SEQRES`
  - `MODEL`

- visualizzare con `vmd`

  - frames
  - graphics representations

3 Simulazioni con ORAC

3.1 il programma ORAC

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

3.2 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

3.3 preparazione input per simulazione

3.3.1 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.

3.3.2 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 ->
```

3.3.3 topologia

Notare che la sequenza è

```
GLY TYR ASP PRO GLU THR GLY THR TRP GLY
```

ma le due glicine terminali sono, rispettivamente, N-terminale e C-terminale, ovvero la sequenza, in termini di residui definiti nella topologia AMBER, è

```
gly-h tyr asp pro glu thr gly thr trp gly-o
```

3.3.4 parametri di potenziale