Corso di Laurea Specialistica in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2008/2009

Laboratorio 4 - (21 aprile 2009)

---

1 Chignolina: simulazione (N,V,T) nel vuoto

1. preparazione dell'input; si deve solo modificare il blocco `&SIMULATION`

```
&SIMULATION
    ...
    THERMOS
       cofm 30.0
       solute 30.0
       solvent 30.0
       temp_limit 1000.
    END
&END
```

2. verifica delle proprietà del sistema

   (a) energie

      i. L'energia del sistema, EREAL, non è costante; è costante l'Hamiltoniano di Nosé-Hoover $ETOT = EREAL + KINH + HPOT$

$$H_{NH} = \sum \frac{p_i^2}{2m_i} + U(\mathbf{r}) + \frac{p_\eta^2}{2Q} + \frac{L}{\beta}\eta \quad (1)$$

$$EREAL = \sum \frac{p_i^2}{2m_i} + U(\mathbf{r}) \quad (2)$$

$$KINH = \frac{p_\eta^2}{2Q} \quad (3)$$

$$HPOT = \frac{L}{\beta}\eta \quad (4)$$

      ii. confrontare l'andamento e soprattutto le fluttuazioni dell'energia totale nell'insieme NVT con quella dell'insieme NVE con medesimo input

      iii. vedere la dipendenza del risultato dal valore delle "masse" del termostato

      iv. verificare l'entità delle fluttuazioni dell'energia cinetica

   (b) RMSD
   confrontare l'andamento e il valore finale di RMSD nell'insieme NVT con quelle dell'insieme NVE con medesimo input

---

2 Chignolina: simulazioni con solvente.

2.1 Preparazione input

1. Considerazioni sul calcolo dei dati di input

   (a) lato cella è opportuno che sia almeno il doppio della lunghezza della proteina

(b) densità dell'acqua:

$$\begin{aligned}\rho/amu\cdot{}^{-3} &= \rho/g\cdot cm^{-3}\cdot\frac{g}{amu}\cdot\left(\frac{}{cm}\right)^3\\ &= \rho/g\cdot cm^{-3}\cdot N_A\cdot\left(10^{-8}\right)^3\\ &= \rho/g\cdot cm^{-3}\cdot 0.6023\\ &\simeq 0.6\end{aligned}$$

Per n molecole di acqua in un box di lato L Angstrom:

$$\rho/amu\cdot{}^{-3} = 0.6 = \frac{18n}{L^3}$$

Se $L = 31.07$, si ha $n = 999.8 \simeq 10^3$. Si può dunque scegliere

$$\begin{aligned}n &= 10^3\\ L &= 31.07\end{aligned}$$

2. copiare sulla propria directory di lavoro il file di input:

   `~signorini/biomol/orac/data/slv.in`

3. copiare sulla propria directory di lavoro il file di coordinate della molecola di H_2O:

   `~signorini/biomol/orac/pdb/water.pdb`

4. Notare le differenze rispetto al file utilizzato per la simulazione nel vuoto (magari usando il comando ediff di Emacs):

   (a) aggiungere solvente

```
&SETUP
   CRYSTAL 31.07 31.07 31.07
&END
&SOLUTE
   COORDINATES chignolin.pdb
&END
&SOLVENT
   CELL SC
   INSERT 1.4
   COORDINATES ../pdb/water.pdb
   GENERATE RANDOMIZE 10 10 10
&END
&PARAMETERS
   [...]
   JOIN SOLVENT
     hoh
   END
&END
```

   (b) aggiornare i time-step

```
&INTEGRATOR
   TIMESTEP 10.0
   MTS_RESPA
     step intra 2
     step intra 2
     step nonbond 2 4.7
     step nonbond 3 7.5 reciprocal
     step nonbond 1 9.7
     test_times OPEN energie
   END
```

```
&END
```

(c) Ewald

```
&POTENTIAL
   EWALD PME 0.43 24 24 24 4
   [...]
&END
```

(d) salvare un restart

```
&INOUT
   RESTART
      write 500.0 OPEN chigno.rst
   END
   ASCII 200.0 OPEN chigno.pdb
   [...]
&END
```

2.2 Equilibrazione

1. lanciare, salvando un restart
2. notare quanto è più lenta la simulazione aggiungendo il solvente (circa 10 volte)
3. monitorare le energie, in particolare:
   (a) Energia totale EREAL [scende , poi cost]
   (b) EPTOT
   (c) EKIN [oscilla intorno a 300K]
   (d) ESLV [scende]
   (e) ESLV-SLT [scende?]
   (f) ESLT [potrebbe salire]

   Tutte queste grandezze sono listate nel file `energie`.

   Si controllano usando `gnuplot`
4. Visualizzare il sistema in VMD
   (a) vedere se la RMSD rispetto alla conformazione sperimentale è minore che nel vuoto