Corso di Laurea Specialistica in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2008/2009

Laboratorio 5 - (28 aprile 2009)

---

1 Esame dei risultati della simulazione (N,V,T) della Chignolina

1. verifica della densità della soluzione dopo la rimozione del solvente
2. controllo del valore della massa (frequenza) del termostato
3. controllo dell'ampiezza delle fluttuazioni dell'energia cinetica
4. RMSD
5. ...

---

2 Simulazioni di lunga durata

Il nostro obiettivo è valutare la frequenza di folding/unfolding della chignolina (i dati di letteratura indicano che questa avviene nei tempi del μs). A questo scopo, si può eseguire una simulazione di lunga durata a partire da una configurazione naturale e una da una configurazione elongata e osservare le conformazioni nel tempo.

- Si fa circa $1ns$ al giorno;
- si usano le utenze `student1` e `student2` su `cl17`

2.1 A partire da configurazione osservata

- considerare la frequenza di salvataggio dei file per evitare di riempire il disco

2.2 A partire da configurazione elongata

1. Si deve caricare una configurazione elongata

```
&SOLUTE
    COORDINATES unf-199-vac-1.pdb
&END
```

2. si devono avere lo stesso numero di molecole di H_2O (1000-135); lo si fa agendo sul parametro che segue `INSERT`:

```
&SOLVENT
    CELL SC
    INSERT 1.267
    COORDINATES ../pdb/water.pdb
    GENERATE RANDOMIZE 10 10 10
&END
```