Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche, Curriculum "Struttura, dinamica e reattività chimica"

Struttura e Dinamica Molecolare di Sistemi Biologici - 2009/2010

Laboratorio 5 - (4 dicembre 2009)

Esercizio: simulazione del decapeptide GPM12

1 Introduzione

La chignolina (GYDPETGTWG) è stata progettata[1] sul modello della sequenza di residui 45-52 del dominio B1 della proteina G, sequenza che forma un $\beta - turn$. Nel corso della progettazione, si è osservato che l'oligopeptide con la sequenza originaria (con due *Gly* aggiunte alle estremità: GYD**DA**T**K**T**F**G), chiamato GPM12, non è stabile nella forma piegata. Per stabilizzare la struttura piegata nella chignolina si sono sostituiti quattro residui (quelli indicati in grassetto).

$$Gly - Tyr - Asp - Pro - Glu - Thr - Gly - Thr - Trp - Gly \quad \leftarrow \quad \text{chignolina}$$
$$Gly - Tyr - Asp - \mathbf{Asp} - \mathbf{Ala} - Thr - \mathbf{Lys} - Thr - \mathbf{Phe} - Gly \quad \leftarrow \quad \text{GPM12}$$

2 Scopo dell'esercizio

L'esercizio consiste nell'eseguire una simulazione di $30ps$ in acqua a $300K$ di GPM12, a partire da una struttura teorica del GPM12 (non piegata), fornita dal docente. In particolare si dovrà:

- fare preliminarmente le opportune minimizzazioni e/o equilibrature.
- verificare il corretto svolgimento delle simulazioni (es. conservazione dell'Hamiltoniano), compresa la fase di equilibratura
- caratterizzare la struttura di GPM12 nella simulazione finale e verificarne la stabilità
- confrontare la struttura con quella della chignolina in uguali condizioni

3 Strumenti

- ORAC; la struttura di GPM12 è nel file `~signorini/biomol/orac/GPM12-vmd.pdb`
- verifica dell'andamento delle energie e delle altre grandezze termodinamiche (programmi accessori di ORAC; gnuplot)
- visualizzazione di strutture (VMD)
- calcolo di RMSD da una struttura di riferimento (VMD)
- calcolo di distanze intramolecolari (VMD)

4 Documenti da consegnare

1. Relazione sull'esperienza: 2-5 pagine compresi non meno di due grafici
2. file di output di ORAC per tutte le simulazioni eseguite, ed eventualmente altri file di dati (strutture PDB)

---

[1] S. Honda et al, Structure 2004, 12, 1507; T. Terada et al., Proteins 2008, 73, 621