

Laboratorio 2 - (28 marzo 2006)

1 Preliminari

1.1 Copia dei file di dati

1. Creare la directory `~orac` e copiarci tutto il contenuto di `/home/infochim/biomol/orac`
2. Osservare il contenuto delle varie directory

2 Simulazione di deca-alanina a 300 K nel vuoto.

2.1 Prima simulazione

1. portarsi in `~/orac/Ala300` e analizzare il file di input di ORAC: `Ala.in` .
2. lanciare il programma con output sullo schermo

```
orac < Ala.in
```

3. lanciare il programma con output su file

```
orac < Ala.in > Ala.out
```

4. analizzare l'output
5. trasformare il file della traiettoria (PDB) per poterlo visualizzare in `vmd`

```
grep -v REMARK 15.pdb > a.pdb  
sed 's/TER/END/' a.pdb > b.pdb
```

o meglio usando una pipeline

6. Visualizzare il risultato in `vmd`

2.2 Altre simulazioni

Modificare le condizioni di partenza e produrre traiettorie diverse