Corso di Laurea Magistrale in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2005/2006

Laboratorio 4 - (2 maggio 2006)

1 Manuale di ORAC

Il manuale di ORAC, con la spiegazione dettagliata dell'input, è su
`http://www.chim.unifi.it/orac/MAN`

2 Simulazione di deca-alanina con solvente.

2.1 Preparazione input

1. creare la directory `~/orac/Ala_solv` e copiarvi il file di input `~infochim/biomol/orac/Ala_solv/Ala.in`
2. Notare le modifiche nell'input `Ala.in` usando il comando ediff di Emacs :
   (a) aggiungere solvente

```
&SETUP
  CRYSTAL 28.  28.  28.
&END
&SOLUTE
  COORDINATES ../pdb/ala20.pdb
&END
&SOLVENT
  CELL SC
  INSERT 1.4
  COORDINATES ../pdb/water.pdb
  GENERATE RANDOMIZE 9 9 9
&END
&PARAMETERS
  [...]
  JOIN SOLVENT
    hoh
  END
&END
```

   (b) simulare N,p,T

```
&SIMULATION
  MDSIM
  TEMPERATURE 300.0 40.0
  THERMOS
    cofm 30.0
    solute 30.0
    solvent 30.0
    temp_limit 1000.
  END
  ISOSTRESS PRESS-EXT 0.1 BARO-MASS 10.0 COMPR 5.3e-4
&END
```

   (c) 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
```

(d) Ewald

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

(e) salvare un restart

```
&INOUT
  RESTART
    write 500.0 OPEN Ala.rst
  END
  ASCII 200.0 OPEN 15.pdb
  PLOT STEER 5.0
  [...]
&END
```

3. Copiare il file `~infochim/biomol/orac/pdb/water.pdb` e le versioni aggiornate dei file TPG e PRM, che contengono le definizioni dell'acqua:

```
cp ~infochim/biomol/orac/pdb/water.pdb ~/orac/pdb/
cp ~infochim/biomol/orac/lib/* ~/orac/lib/
```

2.2 Equilibrazione

1. lanciare, salvando un restart
2. monitorare E
   (a) ESLV scende
   (b) ESLV-SLT scende?
   (c) ESLT potrebbe salire
   (d) EKIN oscilla a 300K
   (e) EREAL scende
   (f) ETOT (Nosé) cost
   (g) PV si aggiusta il Volume

   Tutte queste grandezze sono listate nel file `test_times.`

   Si controllano usando gnuplot
3. Monitorare, dall'output
   (a) Volume
   (b) Pressione

   Queste grandezze si estraggono dal file di output con un comando tipo

   post-out P="Volume TotPre" solv.out
4. Visualizzare il sistema in VMD
   (a) ricordarsi di filtrare il pdb creato da ORAC con pdb2vmd
   (b) si può vedere che già dopo 3 ps l'α-elica si apre alle estremità

2.3 Run con verifica della stabilità della conformazione della proteina

1. Lanciare il programma partendo dal restart: copiare il file di input `~infochim/biomol/orac/Ala_solv/restart.in` nella directory `~/orac/Ala_solv`