Corso di Laurea Magistrale in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2005/2006

Laboratorio 5 - (9 maggio 2006)

1 Simulazione con dinamica guidata nel vuoto

1.1 Preparazione input per t=20ps

1. creare la directory `~/orac/Ala_steer` e copiarvi il file di input `~infochim/biomol/orac/Ala_steer/Ala.in`
2. Notare le modifiche nell'input `Ala.in`, rispetto alla simulazione senza forzatura, usando il comando ediff di Emacs :

   (a) si parte da configurazione già ad α-elica

   ```
   &SETUP
     CRYSTAL 200.  200.  200.
     READ_PDB ../pdb/ala.pdb
   &END
   ```

   (b) simulare N,V,T

   ```
   &SIMULATION
     MDSIM
     TEMPERATURE 300.0 80.0
     THERMOS
       cofm 30.0
       solute 30.0
       solvent 30.0
       temp_limit 1000.
     END
   &END
   ```

   (c) aggiornare i time-step

   ```
   &INTEGRATOR
     TIMESTEP 4.0
     MTS_RESPA
       step intra 1
       step intra 2
       step nonbond 2 6.
       step nonbond 2 12.
       step nonbond 1 100.
       test_times OPEN energie
     END
   &END
   ```

   (d) Aggiungere la forzatura lungo il legame tra l'atomo 1 e il 102, con costante di forza 500., da 15.9 a 31.5 Å

   ```
   &POTENTIAL
     ADD_STR_BONDS 1 102 500.0 15.9 31.5
     [...]
     STRETCHING HEAVY
   &END
   ```

   (e) far partire la forzatura da t=2ps a 22ps

   ```
   &RUN
     REJECT 1000.
     STEER 2000.  22000.
     TIME 22000.
   [...]
   &END
   ```

   (f) stampare il file del lavoro, e la struttura molecolare su file con nomi appropriati:

```
&INOUT
  ASCII 100.0 OPEN 20ps.pdb
  PLOT STEER 10.0 OPEN 20ps.wrk
&END
```

1.2 Visualizzare la dinamica con VMD:

```
pdb2vmd < 20ps.pdb > 20.pdb
```

1.3 Diagrammare il lavoro in funzione della distanza

1. selezionare righe dal file:

   ```
   grep bond 20ps.wrk > 20.plt
   ```

1. diagrammare la 5 e 7 colonna con gnuplot:

1.4 Ripetere con diverso percorso di forzatura

1. Correggere input

   (a) tempi

   ```
   &RUN
     [...]
     STEER 3000.  23000.
     TIME 23000.
     [...]
   &END
   ```

1.5 Ripetere per tempi di forzatura di 50, 200, 500 ps

1. Correggere input

   (a) tempi

   ```
   &RUN
     [...]
     STEER 2000.  52000.
     TIME 52000.
     [...]
   &END
   ```

   (b) nomi dei file (eventualmente frequenze di salvataggio)

   ```
   &INOUT
     ASCII 100.0 OPEN 50ps.pdb
     PLOT STEER 10.0 OPEN 50ps.wrk
   &END
   ```

2. Diagrammare lavori tutti insieme:

   ```
   gnuplot
   plot '20.plt' u 5:7 w l, '50.plt' u 5:7 w l
   ```

1.6 fare un grafico del lavoro in funzione del tempo di forzatura

Si prepara una tabella a mano con emacs