Corso di Laurea Magistrale in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2005/2006

Laboratorio 6 - (16 maggio 2006)

---

1 Strumenti UNIX

1.1 plot

È un comando (fatto da noi) per potere diagrammare file di dati da riga di comando. È un'interfaccia per gnuplot.

1.2 avg

Di una colonna di dati, fa media,σ, etc.

2 Simulazione con dinamica guidata in solvente.

2.1 Run con t=20ps in parallelo

1. Si deve partire dal restart: copiare il file di input `~infochim/biomol/orac/Ala_solv/steer.in` nella directory `~/orac/Ala_solv`
2. sostituire il nome giusto del file di restart e di quelli di output

```
&INOUT
  RESTART
    read /home/infochim/biomol/orac/Ala_solv/@I.rst
  END
  ASCII 1000.0 OPEN solv.pdb
  PLOT STEER 16.0 OPEN solv.wrk
&END
```

   dove c'è `@I` mettere il numero della propria postazione, es `12.rst`

3. lanciare il programma (dovrebbe durare meno di mezz'ora)

2.2 confronto con altri run

1. estrarre i dati diagrammabili dal file `solv.wrk`:

```
grep bond solv.wrk > solv.plt
```

2. copiare solv.plt su `/home/infochim/tmp/` con il proprio nome di account
3. diagrammare tutte le curve; si può fare in modo compatto con

```
plot ~infochim/tmp/* -5,7
```

2.3 calcolare media e σ

1. `tail -1 *.plt| awk '/bond/ {print $NF}' > dw`

   (a) si calcolano media e σ:

$$\bar{w} = \frac{1}{N}\sum w_i$$

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{N-1}\sum (w_i - \bar{w})^2}$$

$$\Delta G = \bar{w} - \frac{\beta\sigma^2}{2}$$

2. Si può fare anche direttamente con

   ```
   avg dw
   ```

3. Esattamente, la formula per il ΔG è

   ```
   avg dw |awk 'NR==2 {print $2-.2*$4}'
   ```

3 Visualizzazione e calcolo degli spostamenti atomici (RMSD)

3.1 preparare il file della traiettoria

- filtrare il file PDB prodotto da ORAC con il comando pdb2vmd

3.2 caricare solo la prima e ultima istantanea

1. caricare la traiettoria; poi distruggere dalla seconda istantanea in poi con Molecule > Delete frames
2. ricaricare come nuova molecola la stessa traiettoria distruggendo tutte le istantanee meno l'ultima
3. per entrambe le rappresentazioni scegliere ad es. Drawing method: tube e Coloring method: ColorID
4. In VMD Main, selezionare la prima molecola come T (top); magari rinominare la due molecole come `first` e `last`

3.3 calcolo RMSD

1. Da VMD Main > Extensions > Analysis scegliere RMSD Calculator
2. Nella finestra in alto a sx eseguire una selezione (ad es. all, o protein)
3. Verificare che nella finestra in basso a sx sono elencate le due molecole
4. Calcolare gli RMSD pigiando il bottone relativo
5. Ripetere, dopo avere allineato (minimizzato le distanze tra gli atomi selezionati) con Align