Corso di Laurea Magistrale in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2005/2006

Risultati dell'esercitazione finale - (23/30 maggio 2006):

Simulazione di un semplice polipeptide nel vuoto con dinamica guidata lungo una coordinata di stiramento dell'α-elica

---

Ultimo aggiornamento: 6 giugno 2006

---

1 Descrizione dell'esercitazione

Si è simulato lo stiramento dell'α-elica di un polipeptide formato da dieci residui: AAGAAAAGAA (A=Ala; G=Gly).

La simulazione è stata fatta in assenza di solvente, nel "vuoto" (lato cella = 200 Å), nell'insieme N, V, T, alla temperatura di 300 K.

La conformazione di partenza è stata ottenuta con una precedente equilibrazione, ed è appunto quella di un'α-elica. Durante la simulazione, la distanza tra l'atomo di azoto del primo e dell'ultimo residuo, inizialmente di 15.5 Å, è stata portata a 33.0 Å, in tempi variabili tra 50 e 300 ps.

L'esercitazione è stata svolta da 15 studenti nell'arco di 2 ore su PC con sistema operativo GNU/Linux. Ad ogni studente è stato richiesto di eseguire il numero più alto possibile di simulazioni indipendenti con un determinato tempo di stiramento. Gli studenti hanno avuto altre 2 ore la settimana successiva per scrivere una sintetica relazione ed eventualmente finire di elaborare i risultati.

2 Risultati

Nella tabella e nella figura sono riportati i risultati, raggruppati per tempo di stiramento. Simulazioni identiche eseguite da più studenti sono state considerate una sola volta.

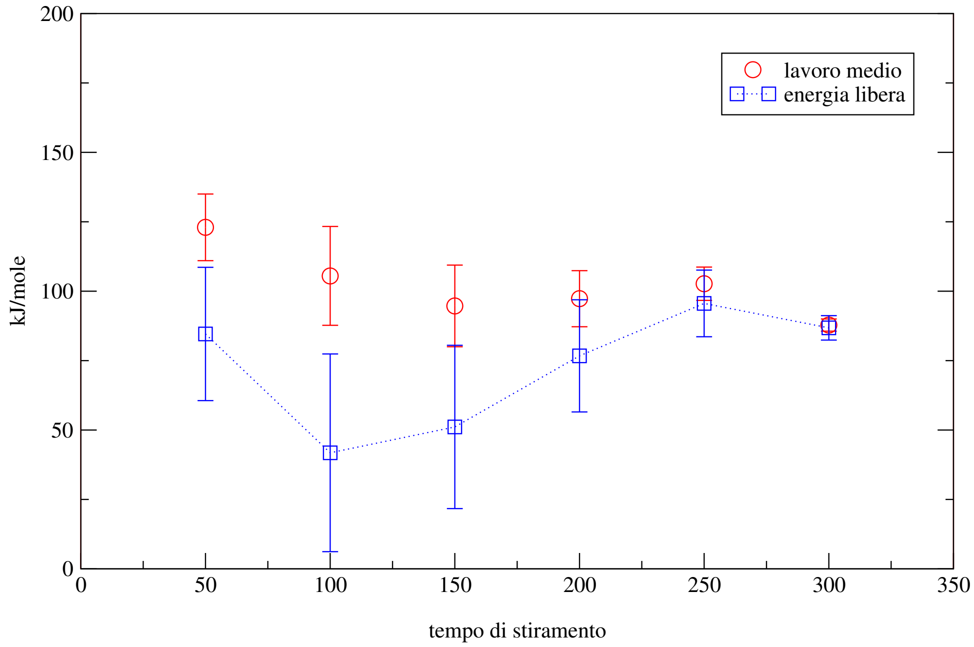
τ	$\bar{w}$	σ	ΔG	N
50.	123.0	12.0	84.6	10
100.	105.5	17.8	41.8	4
150.	94.7	14.7	51.1	5
200.	97.3	10.1	76.7	6
250.	102.7	6.0	95.6	5
300.	87.8	2.2	86.8	3

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

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

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

dove N è il numero totale dei dati, βla costante di Boltzmann.



Nella figura, si è attribuito a ΔG un errore di 2σ.

3 Valutazione individuale

Sono state valutate globalmente le seguenti conoscenze e capacità emerse nel laboratorio, in particolar modo nell'esercitazione finale:

- uso del calcolatore in ambiente UNIX
- elaborazione numerica, trattamento degli errori, conoscenze generali in ambito scientifico
- conoscenze specifiche riguardo all'argomento del corso
- accuratezza dei risultati
- presentazione dei risultati

Cognome	Nome	Voto
Allegra	Anna Letizia	25
Bandini	Tommaso	26
Bessi	Irene	26
Caciolli	Lorenzo	24
Costantini	Barbara	27
Dipisa	Margherita	27
Fantechi	Elvira	30
Gallo	Angelo	28
Giachetti	Sara	24
Grillo	Gianluca	25
Innocenti	Elisa	28
Lalli	Daniela	27
Pezzati	Bernardo	28
Testa	Chiara	25
Vadi	Alessandro	27