Corso di Laurea Specialistica in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2006/2007

Laboratorio 2 - (27 marzo 2007)

1 Strumenti di calcolo

1.1 ripasso shell

1. Ripassare la tabella sul reindirizzamento di input e output e sulla pipeline

1.2 ripasso gnuplot

1.3 grafica molecolare: `vmd`

2 Simulazioni con ORAC

2.1 il programma ORAC

2.2 copia dei file di dati

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

2.3 la deca-alanina

Visualizzare la molecola aprendo il file `~orac/pdb/ala.pdb` con `vmd`

2.4 simulazione di deca-alanina a 300 K nel vuoto (E,V=cost).

1. portarsi in `~/orac/Ala300`; si analizza il file di input di ORAC (`Ala.in`), in particolare i seguenti blocchi:
   - `&SETUP`
   - `&PARAMETERS`
   - `&SIMULATION`
   - `&RUN`
   - `&INOUT`
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