Corso di Laurea Specialistica in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2006/2007

Laboratorio 4 - (17 aprile 2007)

1 Simulazione di deca-alanina con solvente.

1.1 Preparazione input

1. creare la directory `~/orac/Ala_solv` e copiarvi il file di input `~signorini/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/ala.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) 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
   ```

   (c) Ewald

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

   (d) salvare un restart

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

3. Considerazioni sul calcolo dei dati di input
   (a) lato cella è opportuno che sia circa il doppio della lunghezza della proteina
   (b) densità dell'acqua:

$$\begin{aligned} \rho/amu \cdot A^{-3} &= \rho/g \cdot cm^{-3} \cdot \frac{g}{amu} \cdot \left(\frac{A}{cm}\right)^3 \\ &= \rho/g \cdot cm^{-3} \cdot N_A \cdot \left(10^{-8}\right)^3 \\ &= \rho/g \cdot cm^{-3} \cdot 0.6023 \\ &\simeq 0.6 \end{aligned}$$

Per n molecole di acqua in un box di lato L Angstrom:

$$\rho/amu \cdot A^{-3} = 0.6 = \frac{18n}{L^3}$$

Se $L = 28.0$, si ha $n = 724.4 \simeq 729 = 9^3$. Si può dunque scegliere

$$\begin{aligned} n &= 9 \\ L &= 28.0 \end{aligned}$$

1.2 Equilibrazione

1. lanciare, salvando un restart
2. notare quanto è più lenta la simulazione aggiungendo il solvente (circa 10 volte)
3. monitorare E
   (a) ESLV scende
   (b) ESLV-SLT scende?
   (c) ESLT potrebbe salire
   (d) EKIN oscilla a 300K
   (e) EREAL scende , poi cost

   Tutte queste grandezze sono listate nel file `energie.`

   Si controllano usando gnuplot
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: usare Extensions / Analysis / RMSD calculations per allineare il primo e l'ultimo frame e vedere la variazione della struttura

1.3 Run con verifica della stabilità della conformazione della proteina

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