Corso di Laurea Specialistica in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2006/2007

Laboratorio 5 - (24 aprile 2007)

1 Simulazione (N,V,E) in solvente partendo da configurazione elongata

- Ricordare che *nel vuoto* la molecola, a partire da una configurazione elongata ($L = 20$; file `../pdb/ala20.pdb`), si elicizza in $\simeq 30\,ps$
- Vogliamo vedere che in solvente che l'elicizzazione è più lenta
- Lanciamo la simulazione in solvente e verifichiamo la variazione di struttura con `vmd`

2 Simulazione (N,V,T) in solvente

1. preparazione dell'input

```
&SIMULATION
  ...
  THERMOS
    cofm 30.0
    solute 30.0
    solvent 30.0
    temp_limit 1000.
  END
&END
```

2. verifica delle proprietà del sistema

   (a) energie

      i. adesso EREAL non è costante; è costante $ETOT = EREAL + HPOT$ (HPOT=energia del termostato)

      ii. infatti EREAL oscilla un po'

3 Simulazione (N,p,T) in solvente

1. preparazione dell'input

```
&SIMULATION
  ...
  THERMOS
    cofm 30.0
    solute 30.0
    solvent 30.0
    temp_limit 1000.
  END
  ISOSTRESS PRESS-EXT 0.1 BARO-MASS 10.0 COMPR 5.3e-4
&END
```

2. verifica delle energie
   la quantità conservata adesso è $ETOT = EREAL + HPOT + PV$

3. verifica di altre proprietà

(a) esaminare l'output; le proprietà istantanee e le medie (esclusa equilibrazione) sono stampate a intervalli regolari. Osservare

   i. Volume

   ii. Pressione

(b) si può creare un file con l'evoluzione di una proprietà come il volume con il comando

   post-out P="Volume TotPre" Ala.out

   che può poi essere diagrammato con `gnuplot`