Corso di Laurea Magistrale in Chimica delle Molecole di Interesse Biologico

Struttura e Dinamica di Biomolecole - 2006/2007

Risultati dell'esercitazione finale - (22/29 maggio 2007): Simulazione di un semplice polipeptide nel vuoto con dinamica guidata lungo una coordinata di stiramento dell'α-elica

Ultimo aggiornamento: 31 maggio 2007

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 6 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 τ.

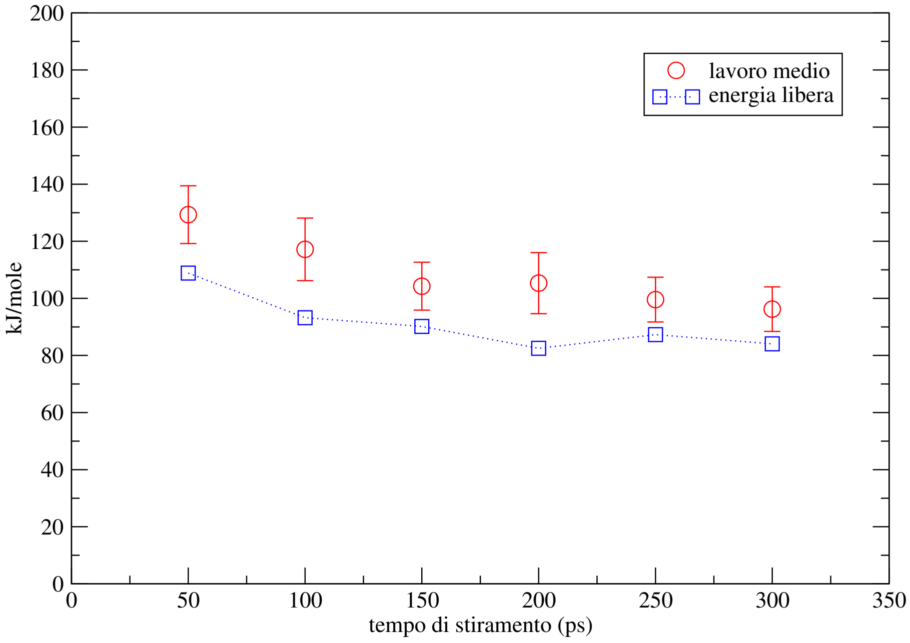
τ	$\bar{w}$	σ	ΔG	N
50	129.3	10.1	108.9	9
100	117.2	10.9	93.2	9
150	104.3	8.4	90.2	7
200	105.3	10.7	82.5	9
250	99.6	7.8	87.3	8
300	96.2	7.8	84.1	5

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

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

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

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



3 Valutazione individuale

Cognome	*Nome*	*Voto*
Acciai	Jessica	26
Cirri	Erica	24
Gustini	Liliana	22
Lanzarone	Salvatore	25
Peruzzini	Riccardo	27
Puccioni	Stefano	27

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