Corso di Laurea Magistrale in Scienze Chimiche, Curriculum ”Struttura, dinamica e reattività chimica”

Struttura e Dinamica Molecolare di Sistemi Biologici - 2010/2011

Laboratorio 2 - (22 novembre 2010)

---

1 simulazione della proteina a 300 K nel vuoto (E,V=cost).

1.1 primo run: controllo della conservazione di E

1. portarsi in `~/orac/data`; creare un input di ORAC (es. `protein.in`) per una simulazione:

   (a) nel potenziale si omette il cutoff (i cutoff per le varie shell sono definiti nel blocco `&INTEGRATOR`), e si levano gli stretching C-H, N-H, O-H

   ```
   &POTENTIAL
      [...]
      #  CUTOFF 100.
      STRETCHING HEAVY
   &END
   ```

   (b) inserire il blocco `&INTEGRATOR` e modificare il blocco `&SIMULATION`

   ```
   &SIMULATION
      MDSIM
      TEMPERATURE 300.0 40.0
   &END
   &INTEGRATOR
      TIMESTEP 2.0
      MTS_RESPA
        step intra 2
        step intra 2
        step nonbond 1 100.
        test_times OPEN energie
      END
   &END
   ```

   Note:

   - nel caso di una molecola nel vuoto si suddivide solo il potenziale “legato”; quello “non legato” ha un timestep unico.
   - il timestep del potenziale non legato deve essere più basso che nel solvente, anche a medio-lungo raggio (tanto l’aggravio di calcolo è trascurabile); questo perché i moti sono presumibilmente più veloci
   - il cutoff deve essere alto (cariche), ma meno del lato della pseudo-cella

   (c) modificare il blocco `&RUN` :

   ```
   &RUN
      CONTROL 0
      REJECT 0.0
      TIME 10000.0
      PRINT 100.0
      PROPERTY 1000.0
   &END
   ```

2. lanciare il programma con output sullo schermo

   ```
   orac < protein.in
   ```

3. lanciare il programma con output su file

orac < protein.in > protein.out

4. verificare la conservazione dell'energia totale (media stabile):

```
plot -2,9 energie
```

5. se l'energia non si conserva, diminuire i timestep

1.2 simulazione con equilibratura iniziale

1. modificare il blocco `&RUN` inserendo un ciclo di equilibratura appropriato:

```
&RUN
    CONTROL 0
    REJECT 50000.0
    TIME 30000.0
    PRINT 100.0
    PROPERTY 1000.0
&END
```

1.3 Analisi delle proprietà

Analizzare

- Energie
- RMSD
- Angoli di Ramachandran
- distanza "head-to-tail"

---

2 simulazione (N,V,T) nel vuoto

1. preparazione dell'input; si deve solo modificare il blocco `&SIMULATION`

```
&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. L'energia del sistema, EREAL, non è costante; è costante l'Hamiltoniano di Nosé-Hoover $ETOT = EREAL + KINH + HPOT$

$$H_{NH} = \sum \frac{p_i^2}{2m_i} + U(\mathbf{r}) + \frac{p_\eta^2}{2Q} + \frac{L}{\beta}\eta \tag{1}$$

$$EREAL = \sum \frac{p_i^2}{2m_i} + U(\mathbf{r}) \tag{2}$$

$$KINH = \frac{p_\eta^2}{2Q} \tag{3}$$

$$HPOT = \frac{L}{\beta}\eta \tag{4}$$

[non fatto]

i. confrontare l'andamento e soprattutto le fluttuazioni dell'energia totale nell'insieme NVT con quella dell'insieme NVE con medesimo input

ii. vedere la dipendenza del risultato dal valore delle "masse" del termostato;

iii. verificare che se $Q \to \infty$ si ricade nell'insieme N, V, E

iv. verificare l'entità delle fluttuazioni dell'energia cinetica

(b) RMSD

confrontare l'andamento e il valore finale di RMSD nell'insieme NVT con quelle dell'insieme NVE con medesimo input