

Análisis de simulación molecular

Viernes 9 de junio 2017

Requisito NAMD energy

- Instala NAMD

Entra a la siguiente pagina y descarga NAMD versión 2.12, correspondiente a tu sistema operativo.

<http://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=NAMD>

Plugins VMD

- VMD no solo es un visualizador molecular, sino que también tiene una gama de herramientas para realizar análisis de trayectorias de simulación molecular.
- A continuación deberá ingresar a los siguientes links en los que estarán descritas algunas de estas herramientas y las formas de uso. Las herramientas **deben estar descritas en su informe**.
 - <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/plugins/rmsdtt/>
 - Has una alineación de la proteína, luego obtén su RMSD a lo largo de la trayectoria, analiza la información, concluye, y adjunta el gráfico al informe.
 - Has una alineación del ligando (rename SUV), calcula RMSD a lo largo de la trayectoria, analiza la información, adjunta el gráfico, concluye.
 - <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/plugins/namdenergy/>
 - Abre el plugin, carga los archivos de parametros (.par), y calcula la energía de interacción (VDW y elec) entre la proteína y el ligando. Analiza los resultados, observa como se mantiene la energía a lo largo de la trayectoria. Concluye.

- <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/plugins/saltbr/>
 - Obten los puentes salinos que se forman entre los residuos de la proteína, ¿cuántos puentes salinos se encontraron? ¿qué muestran los archivos de salida? ¿entre que residuos se forman los puentes salinos?. Selecciona uno de los puentes y gráfícalo en excel, adjunta la gráfica y analiza si es estable a lo largo de la trayectoria.
- <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/plugins/hbonds/>
 - Obtén los puentes hidrógenos que se forman entre la proteína y el ligando, calcula la información detallada de todos los puentes hidrógenos, adjunta la gráfica. Analiza la información detallada obtenida, ¿cuántos puentes hidrógenos se forman? ¿qué residuos están implicados? describe los resultados.

- Concluye con respecto a toda la información obtenida en relación a la estabilidad entre la proteína y ligando.