

ANÀLISI DE DINÀMICA MOLECULAR

SALT BRIDGE DISTANCE

Pau Pujol Duque
12 de maig de 2024

En aquesta pràctica veurem un dels anàlisis que ens permet fer el software VMD gràcies a la seva extensió **Salt Bridges**.

Els *Salt Bridges* són un tipus d'enllaç, que podem trobar normalment en proteïnes i estructures supramoleculares, que combinen dues interaccions no covalents: un enllaç d'hidrogen i un enllaç iònic.

L'exemple que usarem per realitzar l'anàlisi és la proteïna amb la simulació d'equilibri de 100 nanosegons.

Primer, carreguem l'arxiu general del sistema que volem analitzar (**system.psf**) i després, carreguem les dades que hem obtingut al realitzar la simulació de dinàmica molecular (**MD.dcd**). Llavors, seleccionem l'extensió **Salt Bridges** i ens apareix el següent quadre d'opcions:

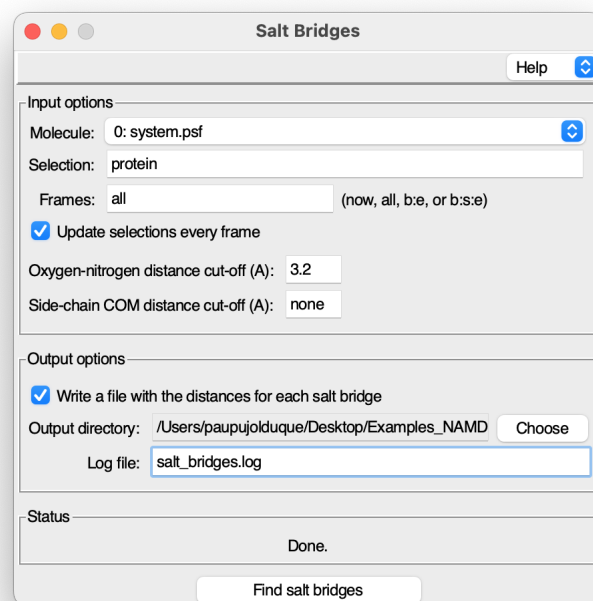


Figura 1: Quadre d'opcions de l'extensió *Salt Bridges*.

Quan fem click en el quadre *Find salt bridges* obtenim un fitxer **.log** on s'indiquen tots els enllaços i, a més a més, obtenim un fitxer de dades per cadascun dels enllaços on es mostren les distàncies de l'enllaç en cadascun dels frames de la simulació.

En el nostre cas i, per les opcions que es mostren en la Figura 1, s'han trobat 14 *salt bridges* entre els grups d'àtoms que es mostres a continuació, en la Figura 2.

Found 14 salt bridges.

ASP52-ARG74
 ASP39-ARG74
 GLU51-LYS48
 ASP32-LYS33
 ASP52-ARG72
 GLU51-ARG42
 ASP39-ARG72
 GLU64-LYS63
 ASP52-LYS27
 ASP58-ARG54
 GLU51-ARG54
 GLU34-LYS11
 ASP32-LYS29
 ASP21-LYS29

Figura 2: *Salt bridges* totals trobats per l'extensió.

Podem veure més en detall l'evolució de la disància d'enllaç, per exemple, del primer que es mostra a la llista, entre l'àcid aspàrtic 52 (ASP52) i l'arginina 74 (ARG74).

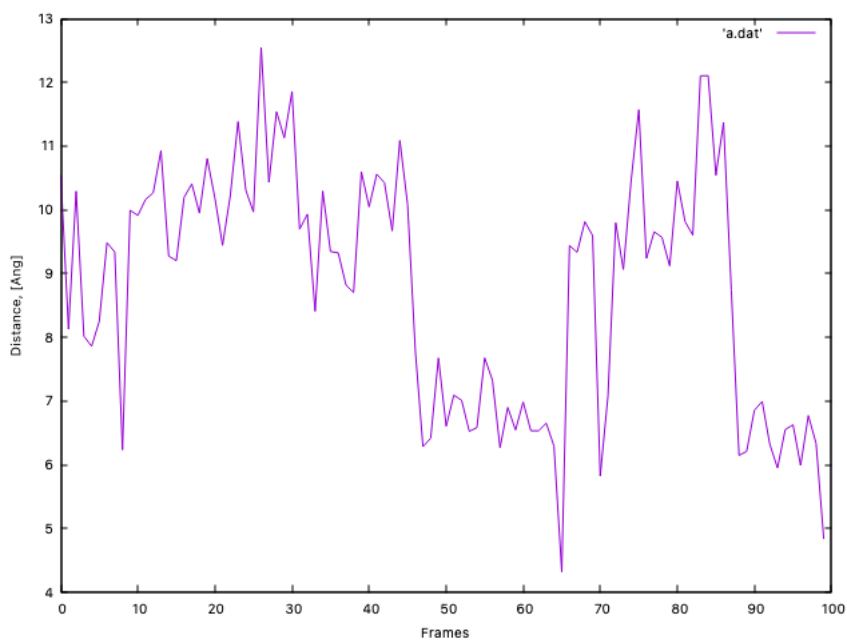


Figura 3: *Distància d'enllaç ASP52-ARG74 al llarg de la simulació.*