Fáze počítačových simulací

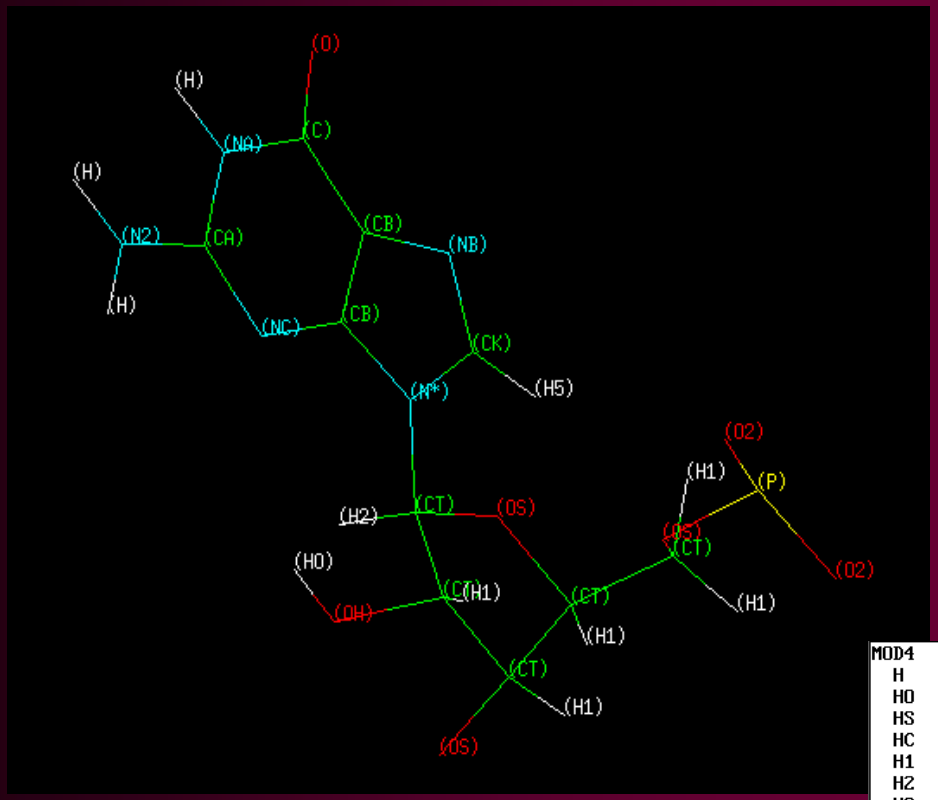
- ⇨ příprava počáteční struktury
- ⇨ ekvilibrace
- ⇨ produkční fáze
- ⇨ analýza výsledků

Program XLEaP

⇨ slouží k vytvoření souborů s topologií a souřadnicemi ze vstupního PDB souboru

⇨ umožňuje přidat ionty a box solventu

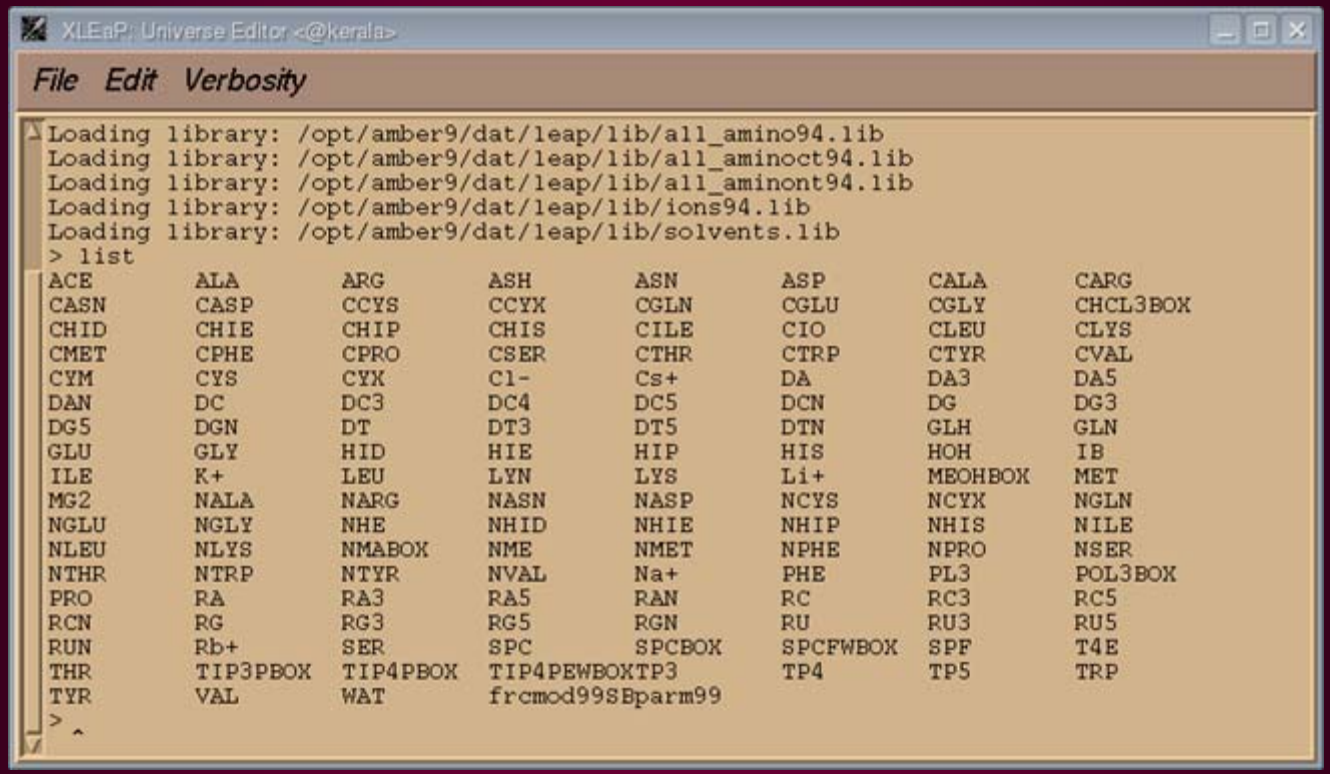
⇨pracuje s knihovnou předem definovaných reziduí, kterou lze doplňovat o vlastní rezidua (např. modifikované nukteotidy)



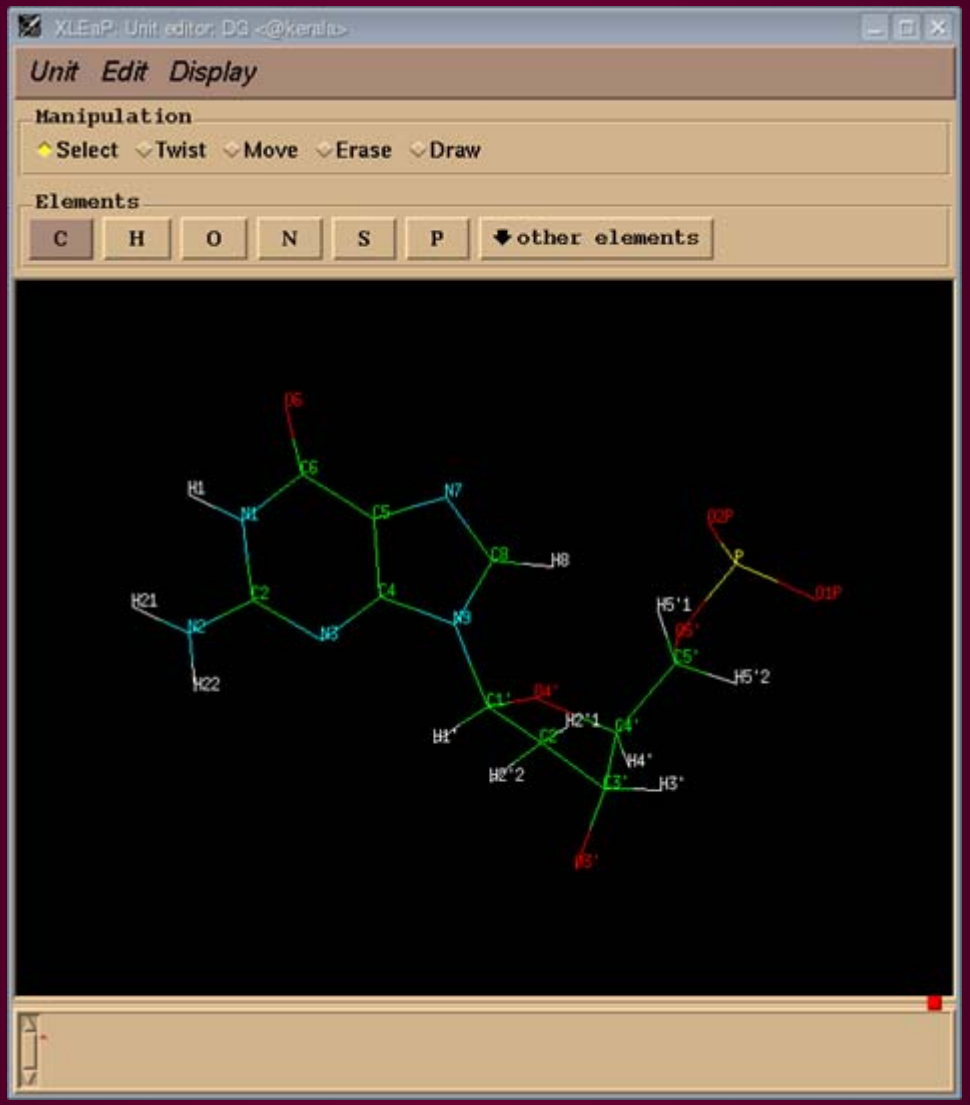
Atomový typ

MOD4	RE		
H	0.6000	0.0157	!Ferguson base pair geom.
HO	0.0000	0.0000	OPLS Jorgensen, JACS,110,(1988),1657
HS	0.6000	0.0157	W. Cornell CH3SH --> CH3OH FEP
HC	1.4870	0.0157	OPLS
H1	1.3870	0.0157	Veenstra et al JCC,8,(1992),963
H2	1.2870	0.0157	Veenstra et al JCC,8,(1992),963
H3	1.1870	0.0157	Veenstra et al JCC,8,(1992),963
HP	1.1000	0.0157	Veenstra et al JCC,8,(1992),963
HA	1.4590	0.0150	Spellmeyer
H4	1.4090	0.0150	Spellmeyer, one electrowithdr. neighbor
H5	1.3590	0.0150	Spellmeyer, two electrowithdr. neighbor
HW	0.0000	0.0000	TIP3P water model
HZ	1.4590	0.0150	H bonded to sp C (Howard et al JCC 16)
O	1.6612	0.2100	OPLS
O2	1.6612	0.2100	OPLS
OW	1.7683	0.1520	TIP3P water model
OH	1.7210	0.2104	OPLS
OS	1.6837	0.1700	OPLS ether
C*	1.9080	0.0860	Spellmeyer
CT	1.9080	0.1094	Spellmeyer
C	1.9080	0.0860	OPLS
N	1.8240	0.1700	OPLS
N3	1.8240	0.1700	OPLS
NY	1.8240	0.1700	N in nitrile
S	2.0000	0.2500	W. Cornell CH3SH and CH3SCH3 FEP's
SH	2.0000	0.2500	W. Cornell CH3SH and CH3SCH3 FEP's
P	2.1000	0.2000	JCC,7,(1986),230;
IM	2.47	0.1	Cl- Smith & Dang, JCP 1994,100:5,3757
Li	1.1370	0.0183	Li+ Aqvist JPC 1990,94,8021. (adapted)
IP	1.8680	0.00277	Na+ Aqvist JPC 1990,94,8021. (adapted)

XLEaP: seznam reziduí



XLEaP: příklad stavební jednotky

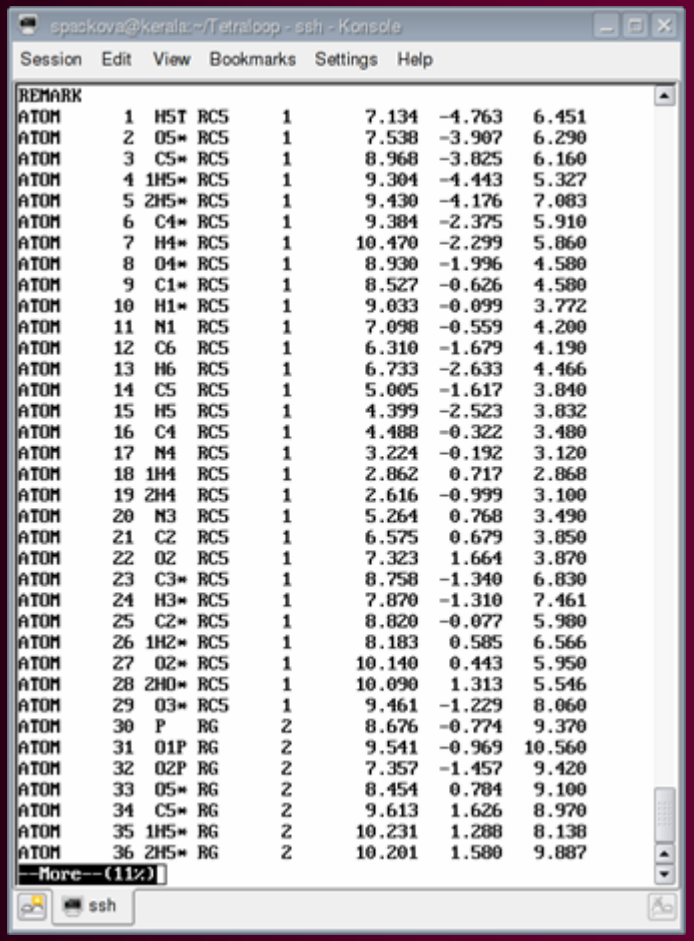


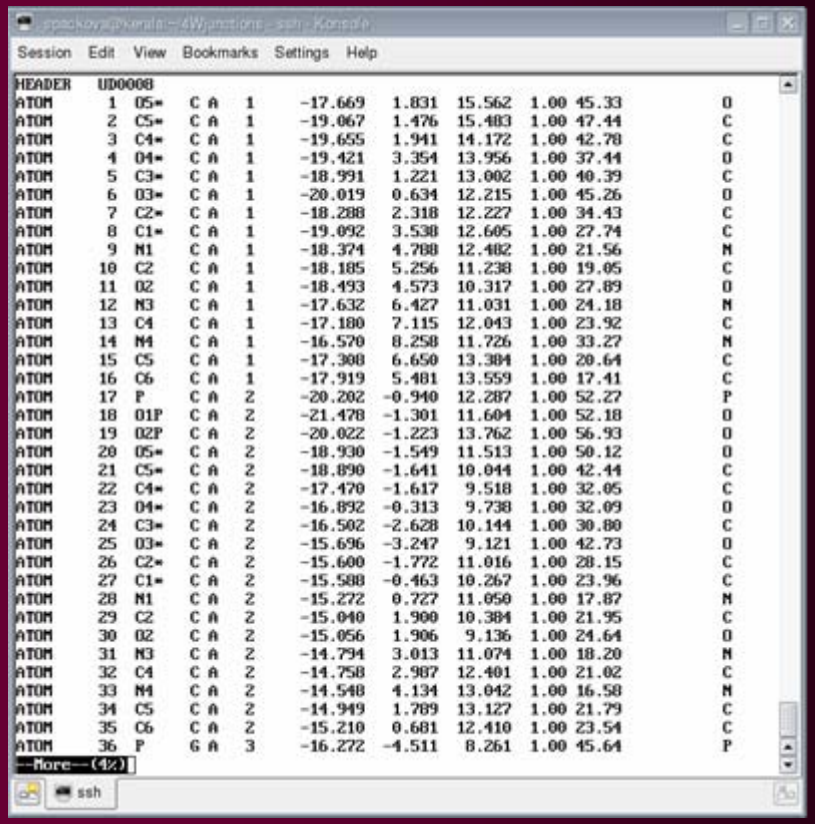
Vstupní struktura

⇨ kanonické dvoušroubovice DNA, RNA – pomocí programu Nucgen

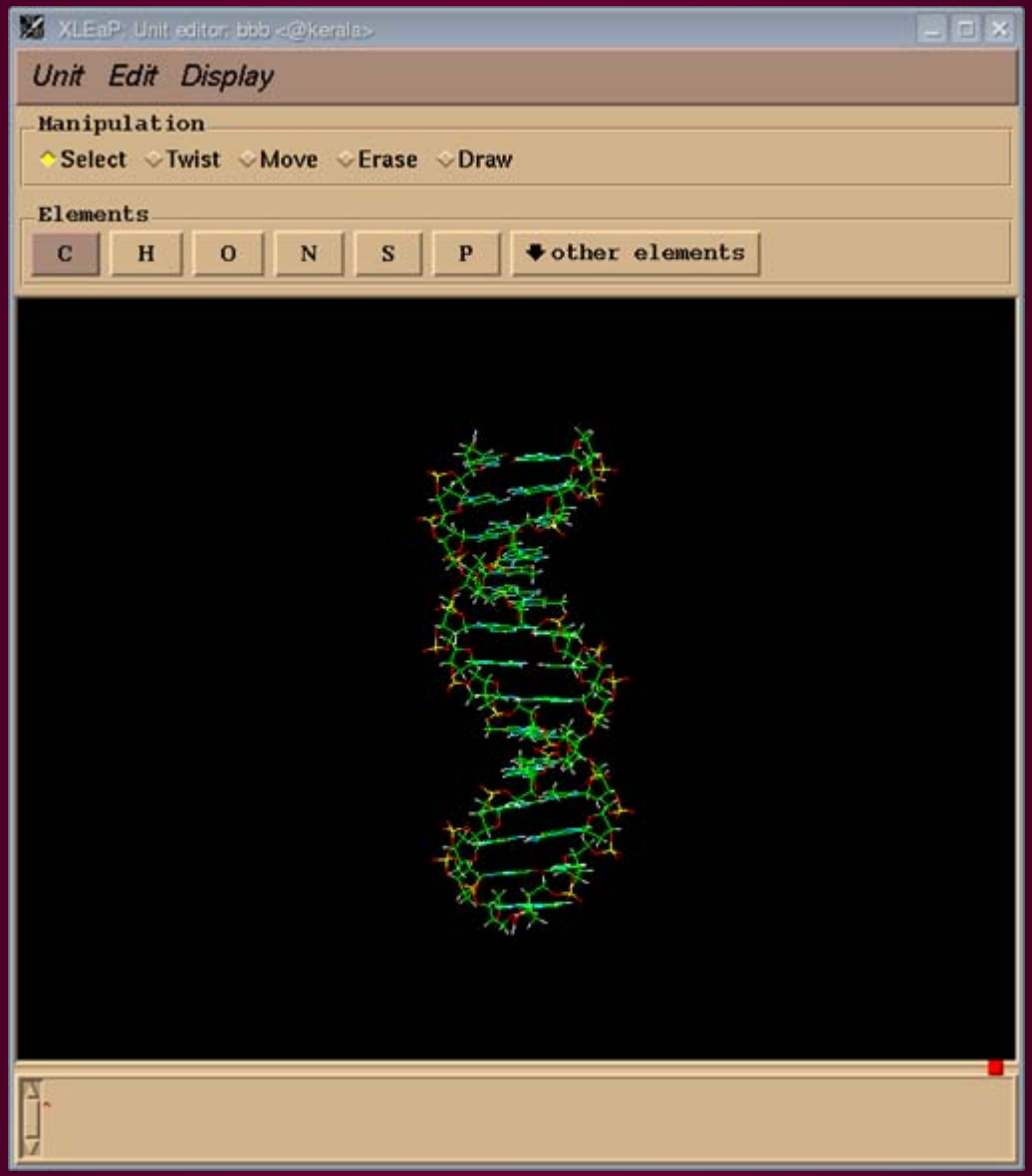
⇨ ostatní molekuly – využití struktur z databází NDB, PDB (struktury z RTG, NMR)

Formát souboru PDB

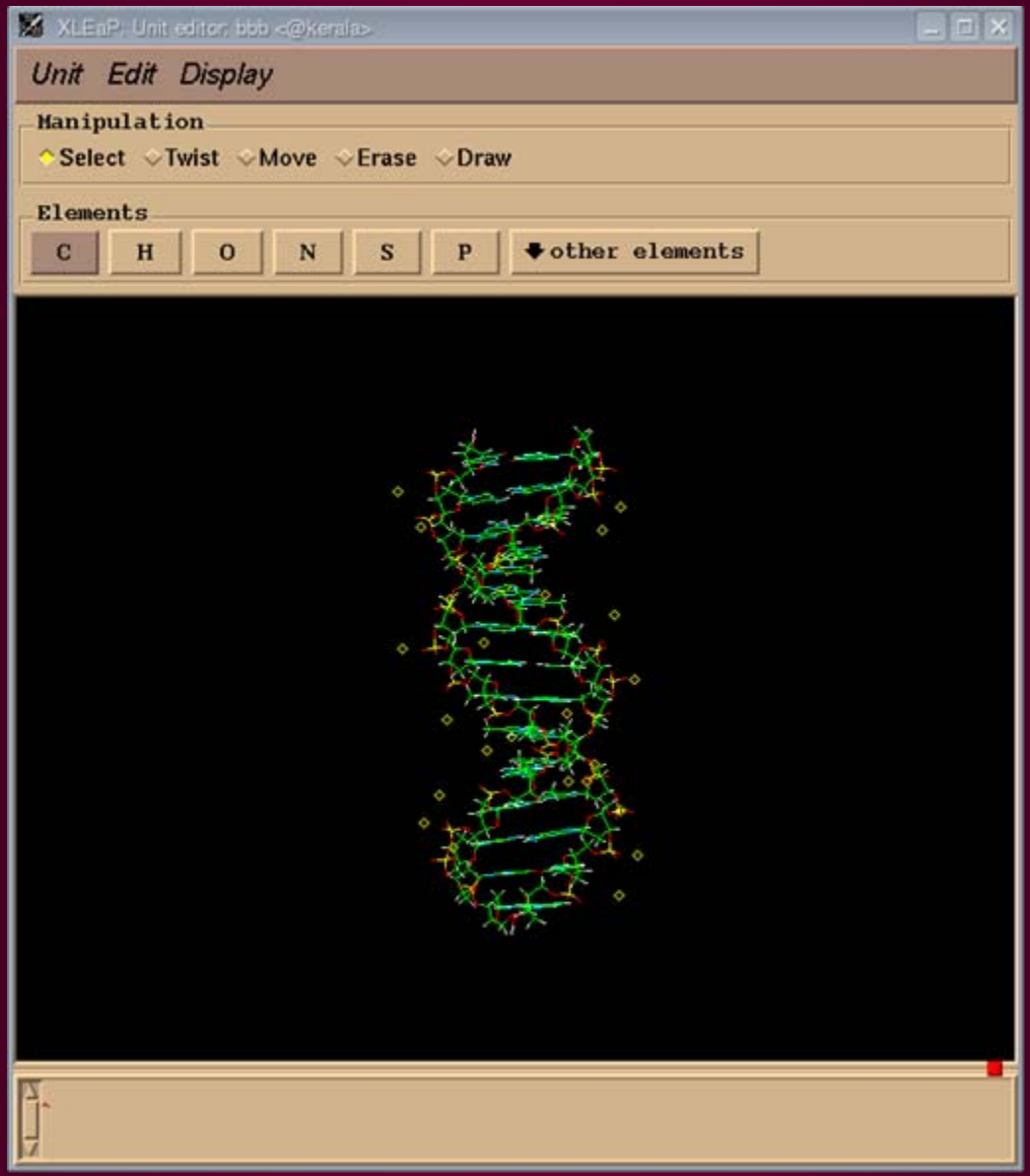




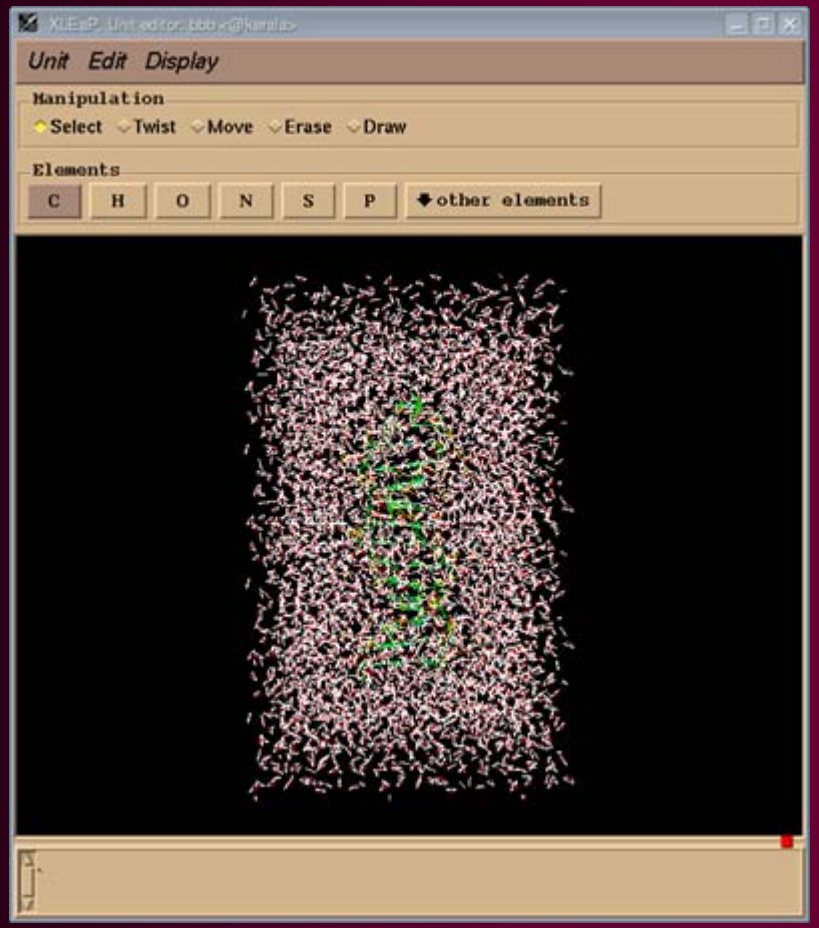
XLEaP: zobrazení načtené molekuly

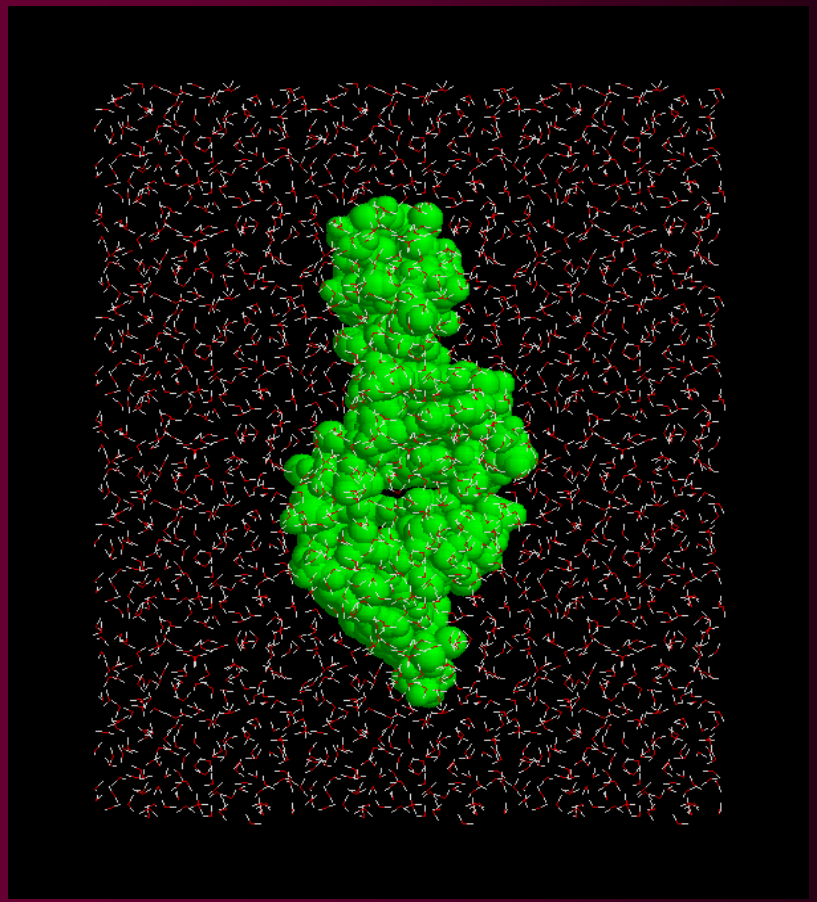


XLEaP: přidání iontů

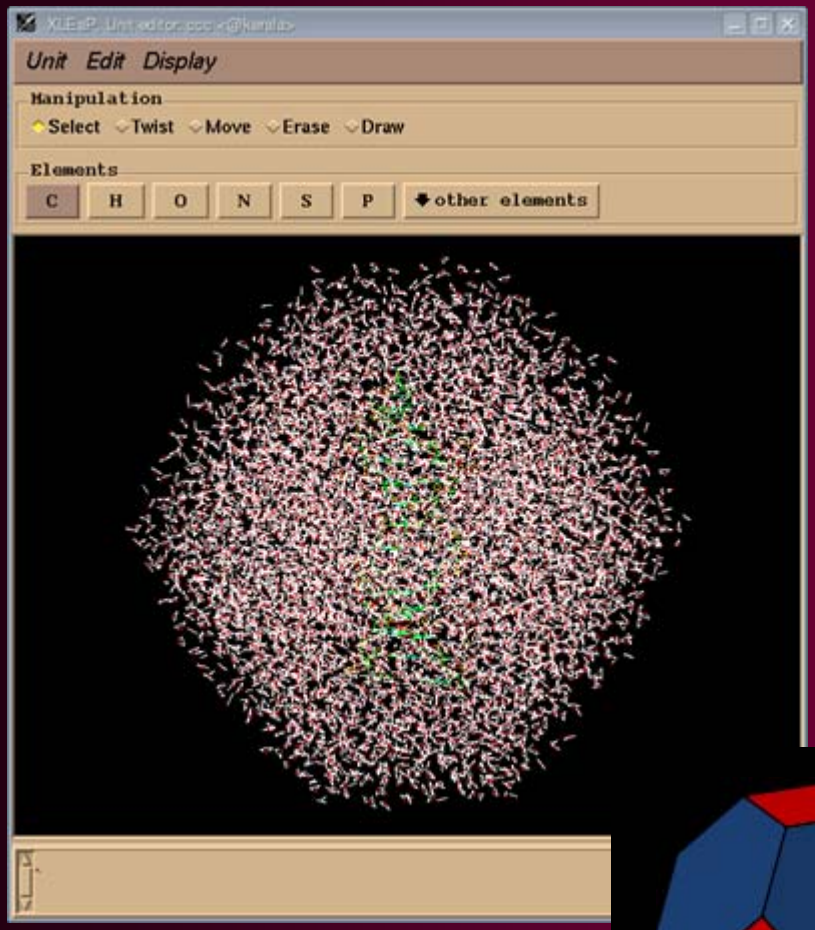


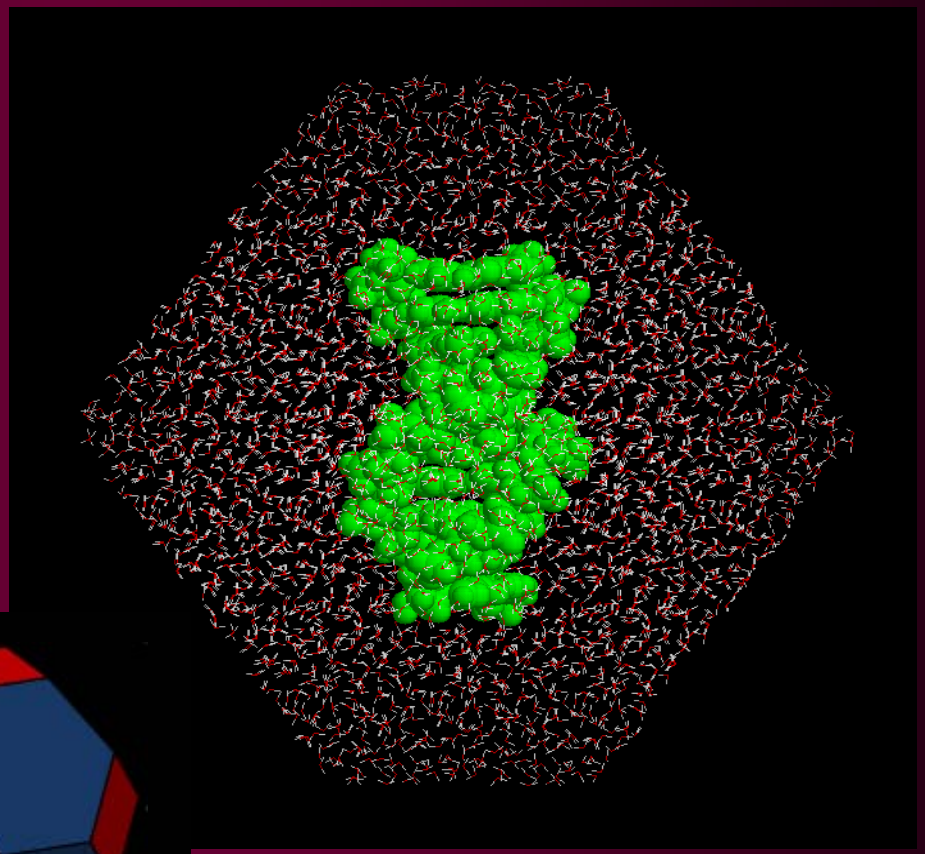
XLEaP: přidání boxu vody

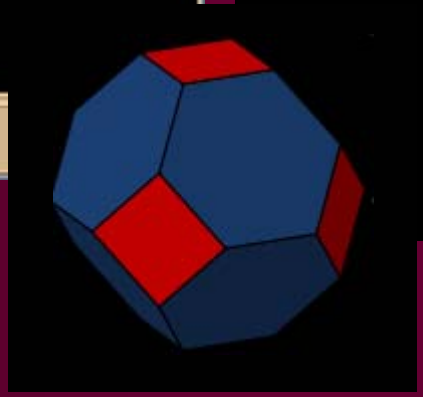




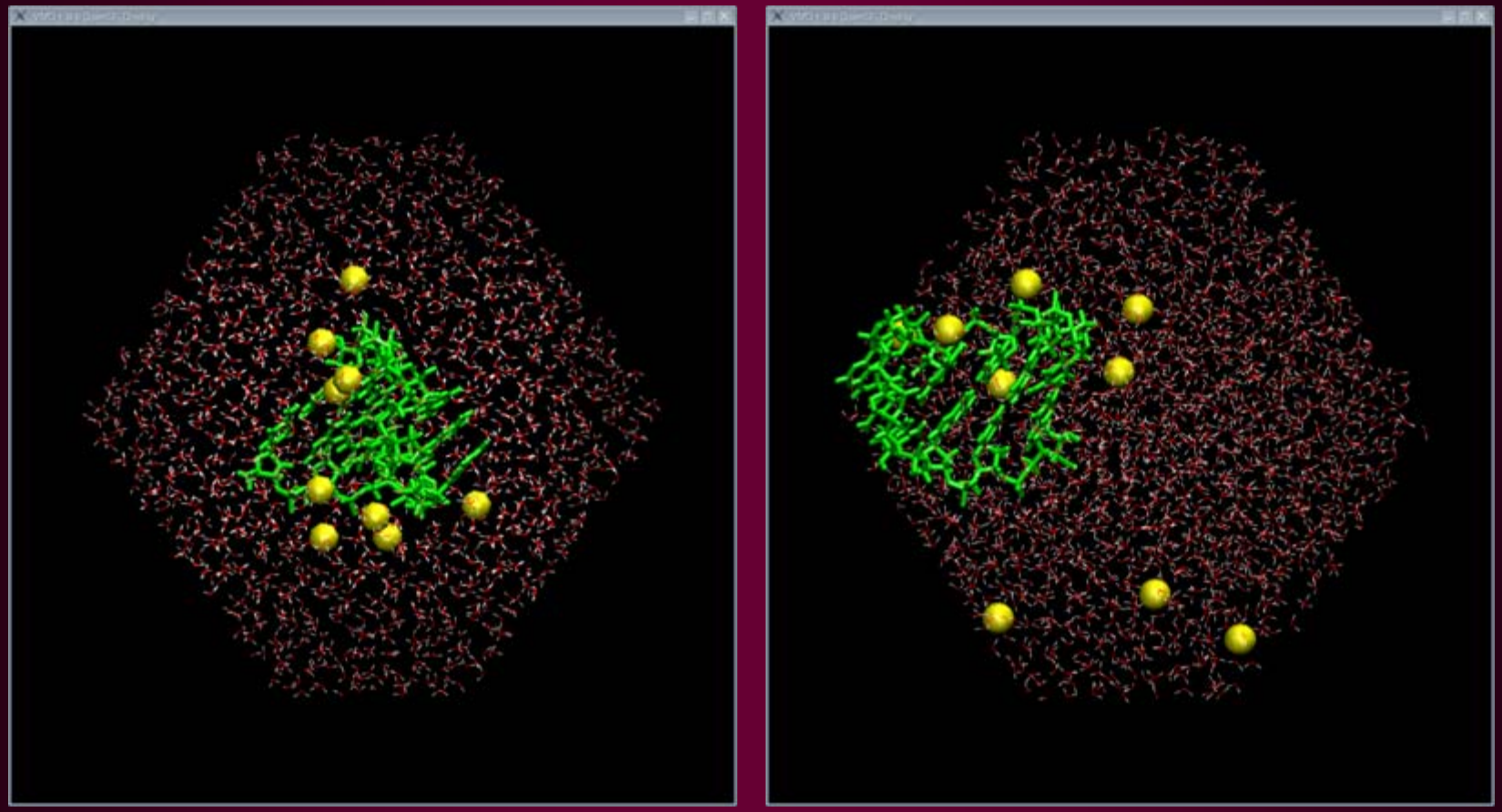
Oktahedrální typ boxu



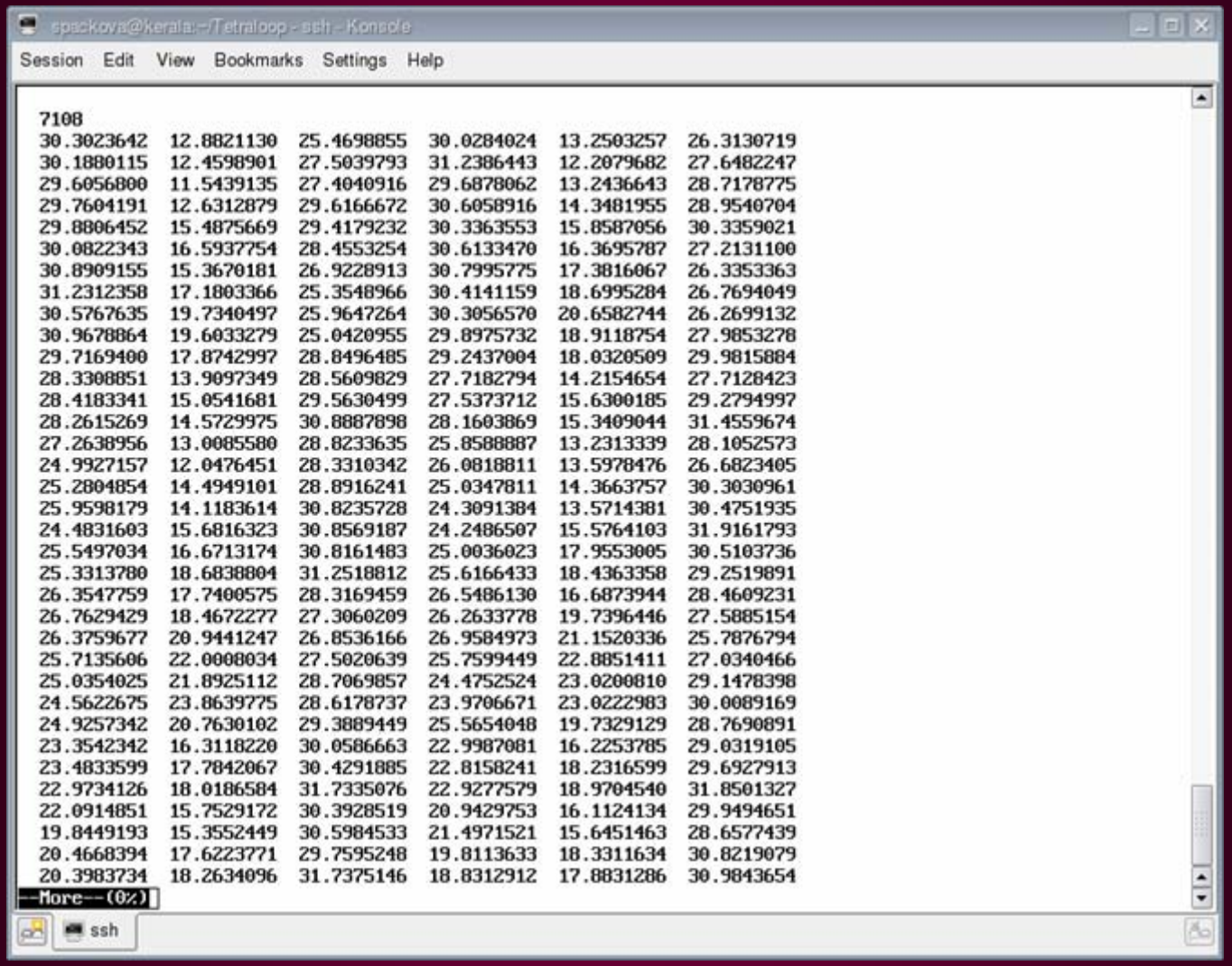




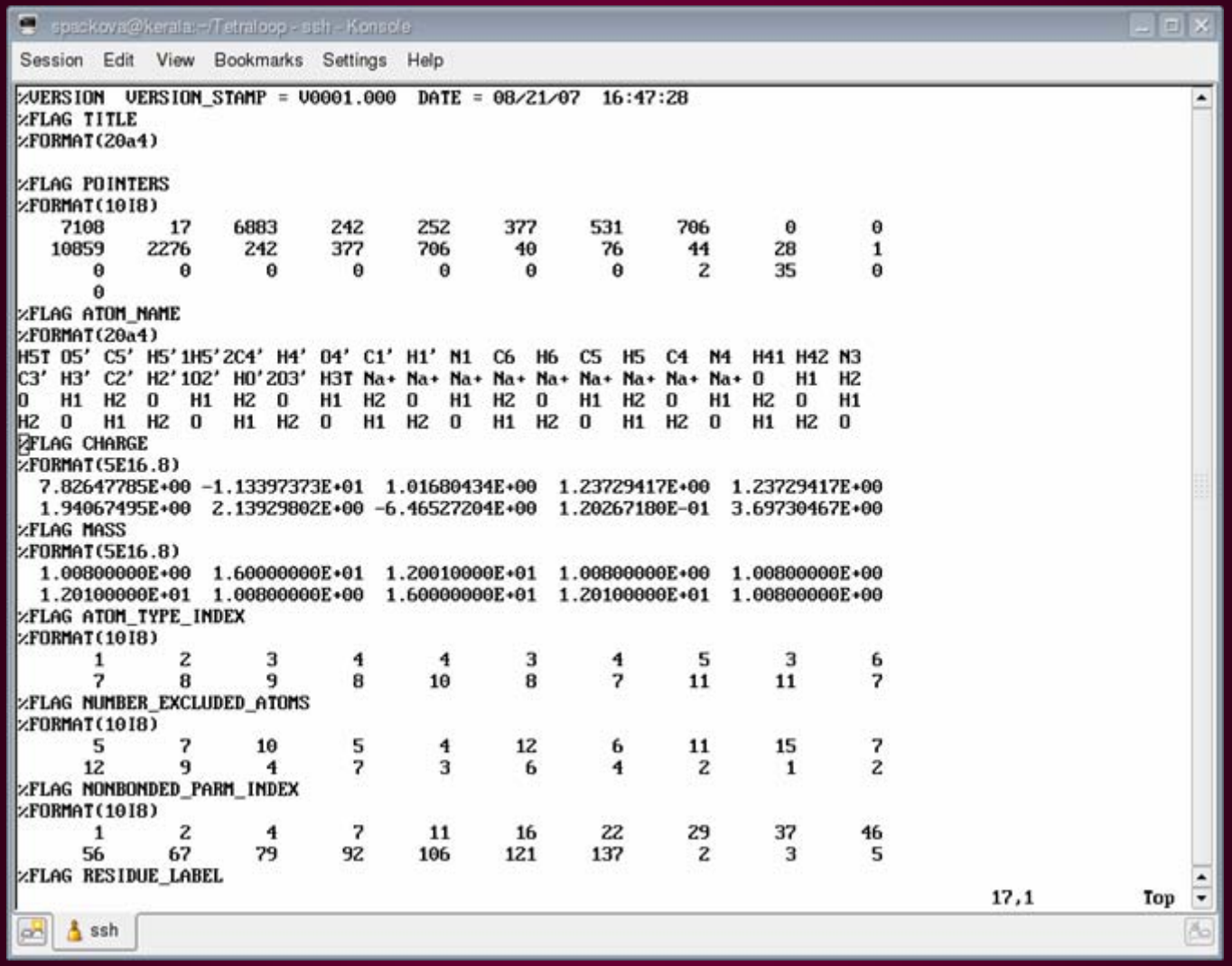
Pohyb molekuly v boxu



Formát souboru *.crd



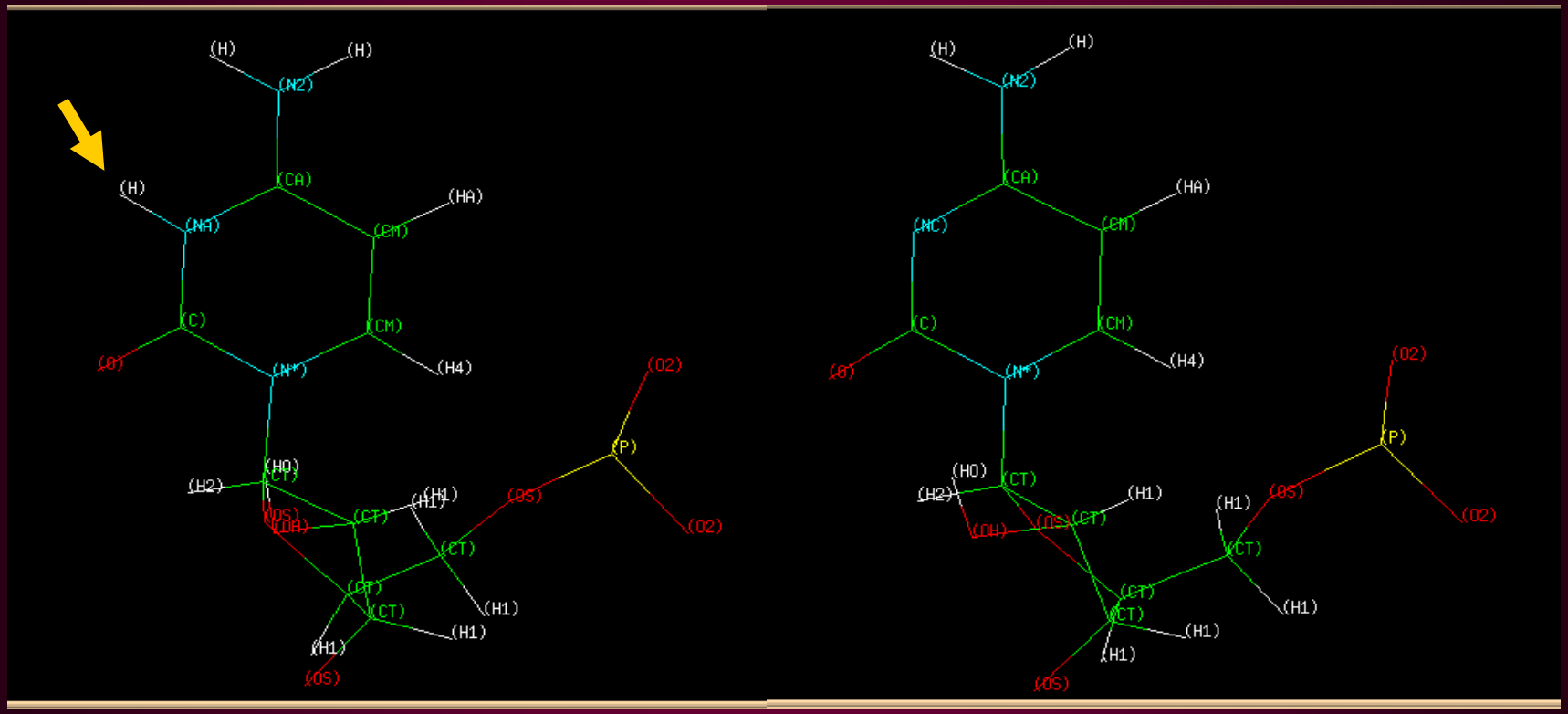
Formát souboru *.top



Nestandardní rezidua

- ⇨ geometrie:
  - úprava standardních reziduí v xLeapu
  - použití souřadnic odjinud (QM)
- ⇨ náboje
- ⇨ atomové typy
  - již existující – někdy třeba dodefinovat chybějící parametry
  - nové – nutno vždy dodefinovat chybějící parametry

Příklad nestandardního rezidua (protonizovaný RC)



Nové atomové typy