

TSM

Modelování molekulárních struktur

Cvičení V

Petr Kulhánek

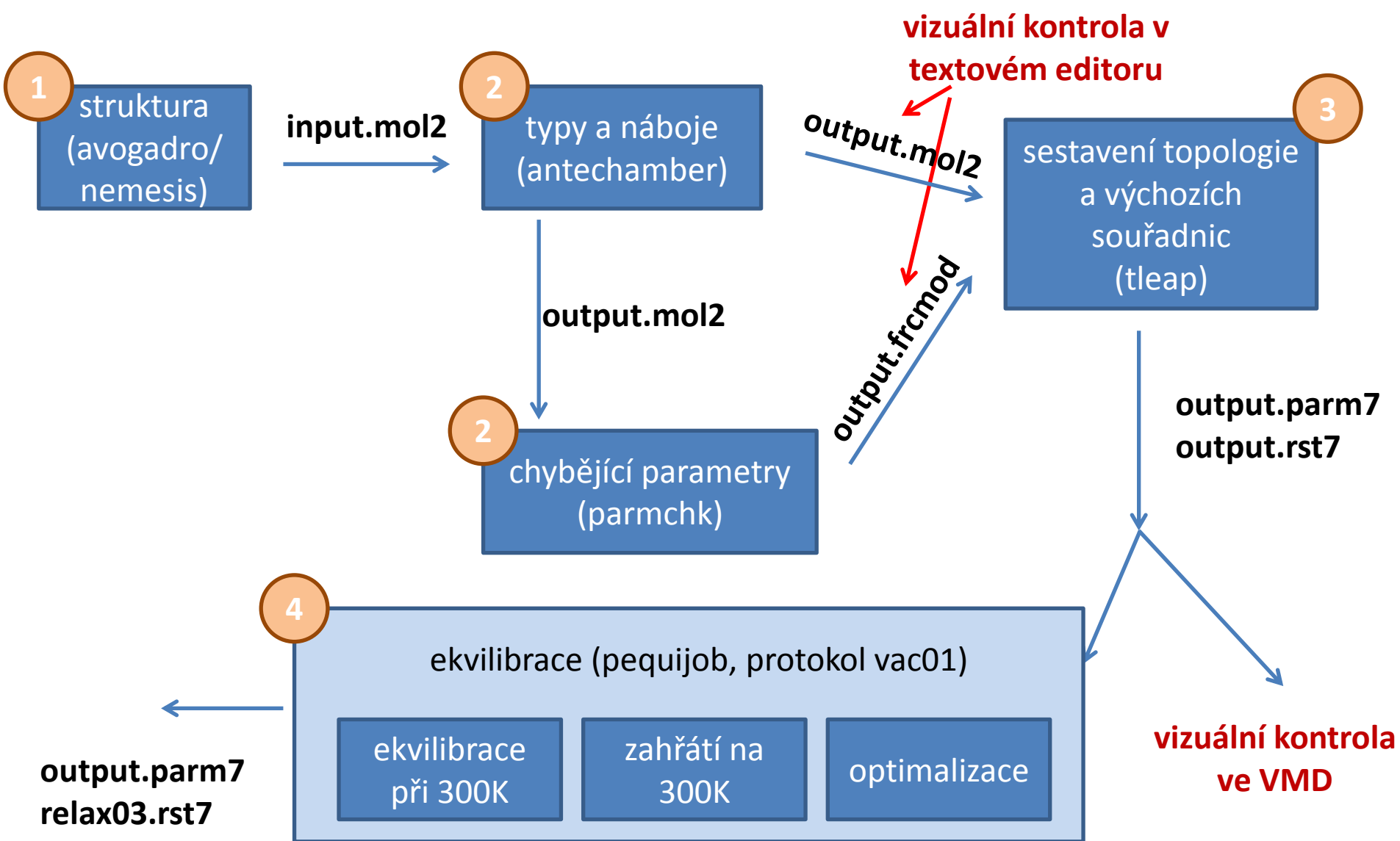
petr.kulhanek@ceitec.muni.cz

CEITEC – Středoevropský technologický institut, Masarykova univerzita,
Kamenice 5, 625 00 Brno

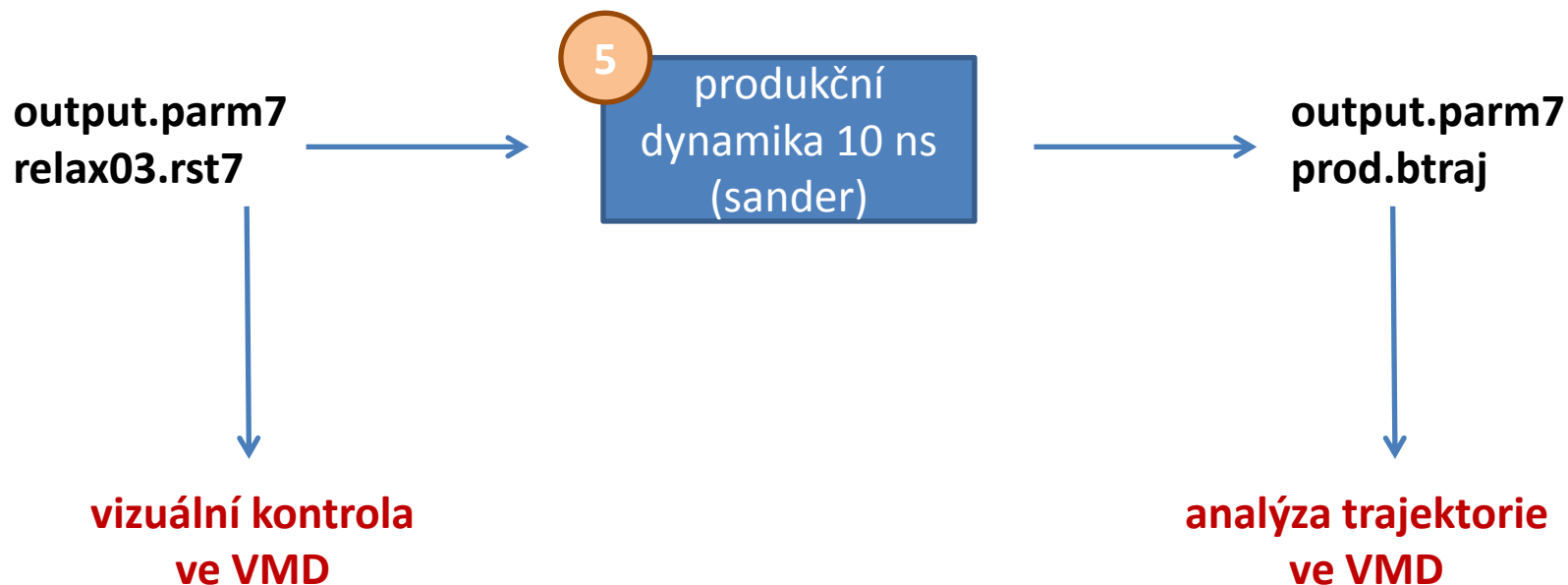
NCBR – Národní centrum pro výzkum biomolekul, Masarykova univerzita,
Kotlářská 2, 611 37 Brno

Příprava dat pro molekulovou dynamiku

Mapa postupu, vakuum



Mapa postupu, vakuum, ...



1. Stavba molekuly

- molekulu postavíme v programu avogadro/nemesis
- geometrii molekuly **zoptimalizujeme** (za použití silového pole MMFF94)
- optimalizovanou geometrii uložíme ve formátu **mol2** (input.mol2)

2. Typy, náboje a parametry FF

Typy a náboje jednotlivých atomů určíme programem **antechamber** (modul amber):

```
$ module add amber
$ antechamber -i input.mol2 -fi mol2 -o output.mol2 -fo mol2 \
  -rn CHO -nc -2 -c bcc
```

jméno vstupního souboru
jméno výstupního souboru
formát vstupního souboru
formát výstupního souboru
jméno residua (max .3 znaky)
celkový náboj
metoda výpočtu nábojů
pokračování na dalším řádku
(při zápisu nezadáváme)

Chybějící **parametry** určíme programem **parmchk** (modul amber):

```
$ parmchk -i output.mol2 -f mol2 -o output.frcmod
```

formát vstupního souboru

výstupní soubor s chybějícími parametry

3. Sestavení topologie

Vytvoříme skript (**script.in**) pro program **tleap**. Skript popisuje jakým způsobem se sestaví finální topologie (obsahuje seznam vazeb, úhlů, dihedrálních úhlů a parametry vazebných a nevazebných interakcí) a souřadnice systému.

```
# nacteni parametru siloveho pole (GAFF)
source leaprc.gaff

# nacteni chybejicich parametru
loadamberparams output.frcmod

# nacteni templatu se strukturou
LIG = loadmol2 output.mol2

# ulozeni topologie a souradnic
saveamberparm LIG output.parm7 output.rst7
```

Skript vykonáme interpretem **tleap**:

```
$ module add amber
$ tleap -f script.in
```

**projdeme celý výstup vypsaný
na obrazovku, zda-li se někde
nevyskytla chyba**

4. Ekvilibrace

1. Vytvoříme samostatný adresář a zkopírujeme do něj soubory **output.parm7** a **output.rst7**. Adresář nastavíme jako aktuální adresář.
2. V adresáři vytvoříme šablony pro ekvilibrační protokol **vac01**.

```
$ module add dynutil  
$ pequi-prep vac01
```

3. Otevřeme soubor **pequiJob** v textovém editoru a upravíme položky obsahující název topologie a souřadnic.

```
# input topology -----  
# file name without path, this file has to be presented in working directory  
export PEQUI_TOP="output.parm7"  
  
# input coordinates -----  
# file name without path, this file has to be presented in working directory  
export PEQUI_CRD="output.rst7"
```

4. Úlohu **pequiJob** zařadíme do dávkového systému.

5. Produkční dynamika

1. Vytvoříme samostatný adresář a zkopírujeme do něj soubory **output.parm7** a **relax03.rst7** (výsledek z ekvilibrace). Adresář nastavíme jako aktuální adresář.
2. Do adresáře zkopírujeme obsah adresáře **/home/kulhanek/Vibuch/prod-vac**
3. Úlohu **prodJob** zařadíme do dávkového systému.

Cílem produkční dynamiky je vytvořit **trajektorii**, která slouží k výpočtu **vlastností systému**.

Výslednou trajektorii si zobrazíme v programu VMD:

```
$ vmd -parm7 output.parm7 -netcdf prod.btraj
```

5. Produkční dynamika, ...

production dynamics at 300 K

kontrolní soubor **prod.in** určuje za jakých podmínek produkční dynamika probíhá

```
&cntrl
  imin=0,
  nstlim=10000000, ← celkový počet kroků
  dt=0.001, ← velikost integračního kroku (v ps)
  irest=1,
  ntx=5,

  ntpr=1000,
  ntwx=1000,
  ntwr=1000,
  ioutfm=1,

  ntf=2,
  ntb=0,
  cut=999,

  ig=-1,
  temp0=300.0, ← teplota v K
  ntt=3,
  gamma_ln=2.0,

  ntc=2,
&end
```

význam ostatních parametrů lze nalézt v manuálu programu sander