

# C7800

# Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

Referenční manuál - AMBER

Petr Kulhánek

[kulhanek@chemi.muni.cz](mailto:kulhanek@chemi.muni.cz)

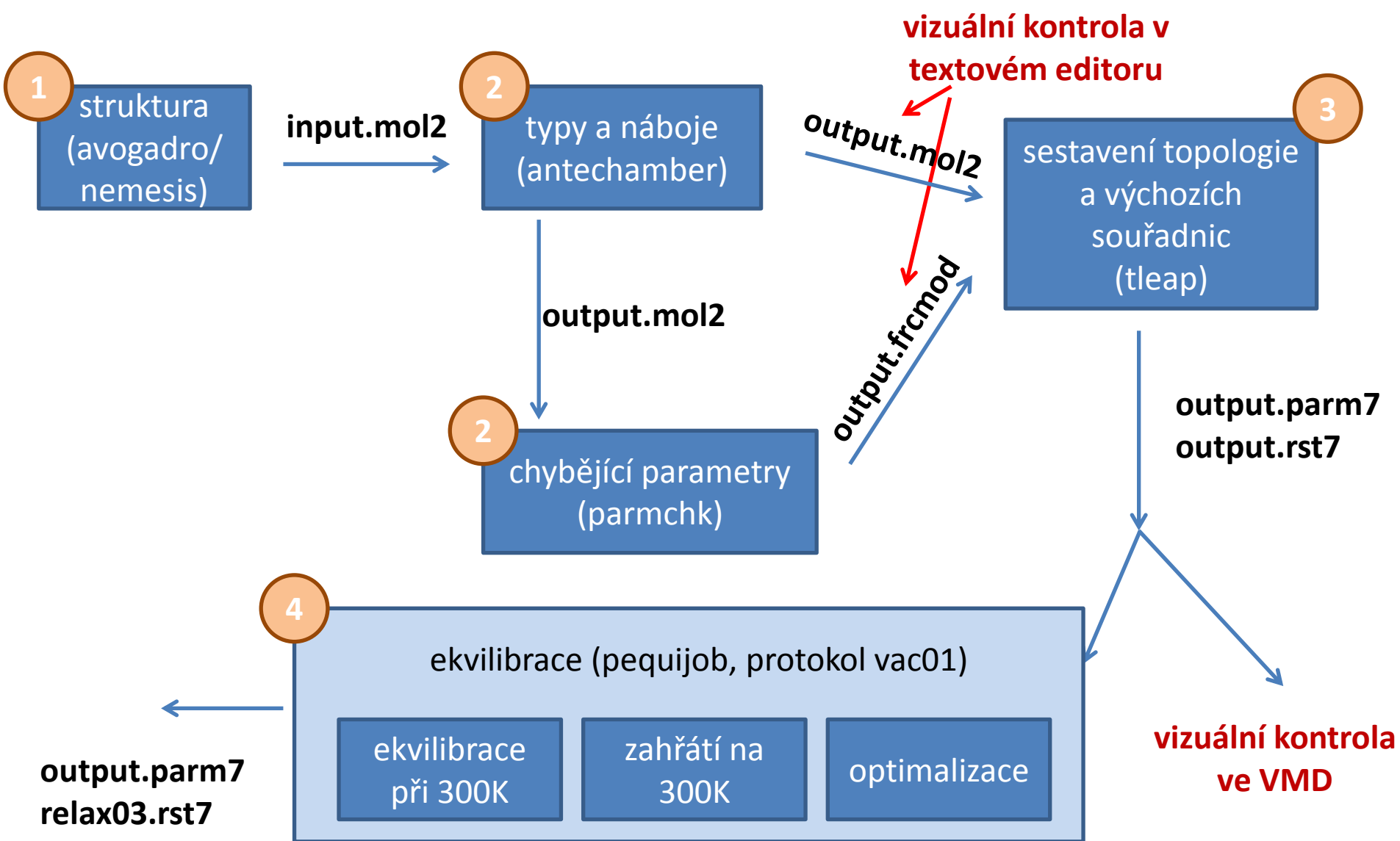
Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta  
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

# AMBER

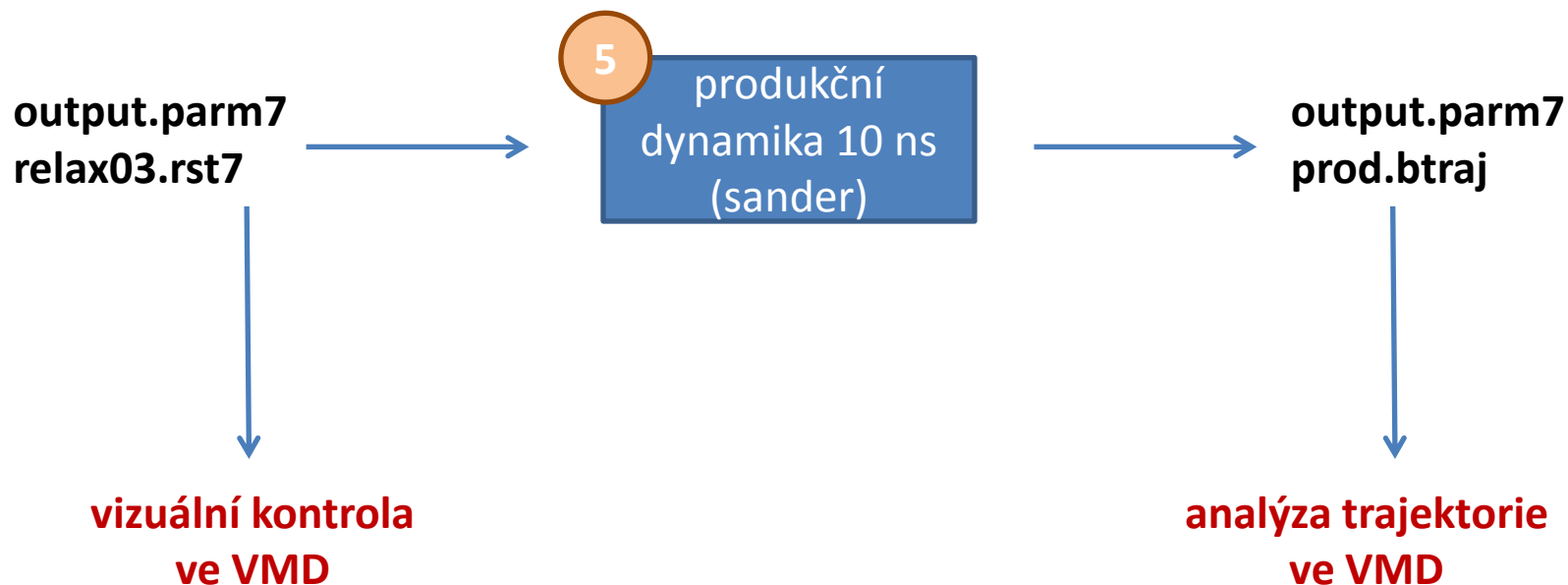
<http://ambermd.org>

---

# 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 RES -nc 0 -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-new  
$ 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/2011/prod-vac**
3. Pokud používáme jiné názvy souborů, je nutné provést editaci skriptu **prodJob** .
4. 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, ← nastavení Langevinova termostatu

ntc=2,

&end

význam ostatních parametrů lze nalézt v manuálu programu sander