

C7800

Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

Petr Kulhánek, Jakub Štěpán

kulhanek@chemi.muni.cz

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

Obsah

- **Požadavky na zpracování výsledků**
- **Tématické okruhy**
 - Dynamika malé organické molekuly ve vakuu
- **Referenční manuál**
 - AMBER
 - VMD

Požadavky na zpracování výsledků

Výsledky jednotlivých cvičení budou zpracovány do protokolu, který bude mít následující náležitosti:

- Jméno a příjmení, název cvičení a datum
- Pro každý tematický okruh:
 - Stručné shrnutí tématu včetně reakčního schématu, pokud je to vhodné
 - Použitý software včetně verzí
 - Výsledky (tabulky a grafy)
 - Diskuze výsledků dle zadání
 - Použitá literatura (např. u experimentálních hodnot)

Protokol ve formátu **pdf** je nutné odevzdat do konce semestru.

Úkoly

- 1) Namodelujte molekulu dle vlastního výběru (např. aktivní molekulu léčiva ibuprofen).
- 2) Připravte vstupní topologii (parm7) a souřadnice (rst7) pro molekulárně dynamickou simulaci namodelované molekuly ve vakuu v prostředí AMBER dle postupu uvedeného níže.
- 3) Proved'te ekvilibraci a následně produkční dynamiku o délce 10 ns při teplotě 300K.
- 4) Zobrazte získanou trajektorii v programu VMD. Kvalitativně charakterizujte dynamiku molekuly.
- 5) Vyberte charakteristický geometrický parametr(y) (např. vzdálenost, úhel, dihedrální úhel), které co nejlépe vystihuje pozorované konformační přeměny. Zobrazte průběh vybraného parametru v čase, graf bude součástí protokolu.
- 6) Proved'te histogramovou analýzu vybraného parametru, výsledný graf bude součástí protokolu. Analýzou histogramu určete počet substavů (konformerů) a odhadněte jejich relativní zastoupení.