

# C7790

# Počítačová chemie a molekulové modelování I

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

## 18. Samostatný projekt III

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

# 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) Provedte 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) Provedte histogramovou analýzu vybraného parametru, výsledný graf bude součástí protokolu. Analýzou histogramu určete počet substavů (konformerů) a odhadněte jejich relativní zastoupení.