

TP dynamique moléculaire – Protocole de simulation de dynamique moléculaire.

Objectifs : notions de champs de force, dynamique moléculaire
Logiciels AMBER, Chimera

1/ Préparation des fichiers

Dans un shell lancer le logiciel tleap:

```
tleap -s -f /home/modmol/SOFT/amber9/dat/leap/cmd/leaprc.ff03
```

puis dans tleap taper les commandes suivantes:

```
prot = loadpdb 1DZK_A_rec.pdb  
solvatebox prot TIP3PBOX 10  
charge prot  
addions prot Na+ 16  
saveamberparm prot prot.top prot.crd  
quit
```

2/ visualiser la boîte de simulation de départ

```
ambpdb -p prot.top < prot.crd > prot_depart.pdb  
vmd prot_depart.pdb
```

3/ protocole de simulation de dynamique moléculaire:

a) minimisation de la boîte d'eau:

```
sander -O -i min.in -o min.out -p prot.top -c prot.crd -r prot_min.crd -ref prot.crd
```

b) minimisation de la protéine:

```
sander -O -i min2.in -o min2.out -p prot.top -c prot_min.crd -r prot_min2.crd -ref prot_min.crd
```

c) minimisation de l'ensemble du système:

```
sander -O -i min3.in -o min3.out -p prot.top -c prot_min2.crd -r prot_min3.crd
```

d) étape de thermalisation:

```
sander -O -i therm.in -o therm.out -p prot.top -c prot_min3.crd -r prot_therm.crd
```

e) étape d'équilibration:

```
sander -O -i eq.in -o eq.out -p prot.top -c prot_therm.crd -r prot_eq.crd
```

f) étape de production:

```
sander -O -i prod.in -o prod.out -p prot.top -c prot_eq.crd -r prot_prod.crd -x prot_traj.mdcrd
```

4/ analyse de la trajectoire

a) analyse structurale au cours de la simulation de dynamique moléculaire

```
ptraj < ptraj.in
```

b) visualiser la simulation de dynamique moléculaire

ouvrir chimera, menu *Tools*, puis onglet *MD/Ensemble Analysis*, puis *MD movie*
ouvrir les fichiers *topologie* (*prot.top*) et *trajectoire* (*prot_traj.mdcrd*)

Remarque: Pour votre compte rendu, les questions vous seront posées en séances