1. No terminal, defina o caminho dos programas do pacote gromacs:

source /usr/local/gromacs/bin/GMXRC

1. Entre na pasta a ser com o arquivo analisado e converta o seu arquivo PDB para o formato GRO, definindo o modelo de água e o campo de força:

gmx pdb2gmx -f mol.pdb -o mol\_processed.gro -water tip3p -ff amber99sb-ildn -ignh

1. Defina o tamanho e formato da caixa:

gmx editconf -f mol\_processed.gro -o mol\_newbox.gro -d 1.0 -bt dodecahedron

1. Inclua as moléculas de água:

gmx solvate -cp mol\_newbox.gro -cs spc216.gro -o mol\_solv.gro -p topol.top

1. Compile os dados de estrutura e parâmetros de adição de íons:

gmx grompp -f ions.mdp -c mol\_solv.gro -p topol.top -o ions.tpr

1. Substitua moléculas do solvente por íons de Na e Cl de modo ao sistema ficar neutro e tenha concentração de 0,15

gmx genion -s ions.tpr -o mol\_solv\_ions.gro -p topol.top -pname NA -nname CL -neutral -conc 0.15

1. Compile os dados de estrutura e parâmetros de minimização de energia:

gmx grompp -f minim.mdp -c mol\_solv\_ions.gro -p topol.top -o em.tpr -maxwarn 10

1. Realize a minimização de energia:

gmx mdrun -v -deffnm em

1. Compile os dados de estrutura e parâmetros de relaxamento isovolumétrico:

gmx grompp -f nvt.mdp -c em.gro -r em.gro -p topol.top -o nvt.tpr -maxwarn 10

1. Realize o relaxamento isovolumétrico:

gmx mdrun -deffnm nvt

1. Compile os dados de estrutura e parâmetros de relaxamento isobárico:

gmx grompp -f npt.mdp -c nvt.gro -r nvt.gro -t nvt.cpt -p topol.top -o npt.tpr -maxwarn 10

1. Realize o relaxamento isobárico:

gmx mdrun -deffnm npt

1. Compile os dados de estrutura e parâmetros de dinâmica molecular:

gmx grompp -f md.mdp -c npt.gro -t npt.cpt -p topol.top -o md.tpr -maxwarn 10

1. Realize a dinâmica molecular:

gmx mdrun -v -deffnm md -c md.pdb

**ANÁLISES**

1. Em primeiro lugar, vamos avaliar a minimização de energia:

gmx energy -f em.edr -o potential.xvg

1. Agora, vamos definir o centro da simulação como o centro da proteína e evitar movimentos de rotação:

trjconv -s md.tpr -f md.xtc -o xtc\_nojump.xtc -fit rot+trans

1. Depois, vamos gerar um gráfico de RMSD por tempo:

gmx rmsdist -s md.tpr -f xtc\_nojump.xtc -o distance-rmsd.xvg

Abra os dados no Excel.

Em que período os valores se encontram estabilizados?

1. Então, vamos gerar o gráfico de RMSF:

gmx rmsf -f xtc\_nojump.xtc -s md.tpr -o rmsf-per-residue.xvg -ox average.pdb -oq bfactors.pdb -res -b 2500 -e 6500

1. Gere o gráfico de raio de giro:

gmx gyrate -f xtc\_nojump.xtc -s md.tpr -o radius-of-gyration.xvg

1. Agora da superfície acessível ao solvente:

gmx sasa -f xtc\_nojump.xtc -s md.tpr -o sasa.xvg

1. Vamos observar as ligações de H intramoleculares:

gmx hbond -f xtc\_nojump.xtc -s md.tpr -num intrahbond.xvg

1. Vamos observar as ligações de H intermoleculares:

gmx hbond -f xtc\_nojump.xtc -s md.tpr -num interhbond.xvg

1. Repita esses passos com a outra proteína.
2. Abra os dados no Excel e compare os dados.