Apêndice

Ferramentas para modelagem molecular e parâmetros de simulação

Porcupine

Diego Enry Barreto Gomes1; Roberto D. Lins2,3; Thereza A. Soares2,3; Pedro G. Pascutti1

(1) Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ – Brasil. (2) Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE – Brasil (3) Pacific Northwest National Laboratory, Richland, WA – EUA. Distribuído via requisição por e-mail: diego@biof.ufrj.br

**Descrição**

O programa **porcupine** foi desenvolvido para auxiliar a visualização dos componentes principais de uma simulação de dinâmica molecular (dinâmica essencial) ao projetar no espaço, os autovetores de movimento de acordo com a amplitude calculada por PCA. O programa lê um arquivo no formato PDB contendo os pontos extremos do modo de vibração calculado, opcionalmente filtra vetores de baixa amplitude, e escreve um arquivo de saída no formato VMD contendo setas com direção e tamanho proporcionais à direção e amplitude do modo de vibração.

**Exemplo de uso.**

1) Realizando o cálculo de dinâmica essencial com o GROMACS

**g\_covar -f trajetória.xtc -s topologia.tpr -o autovalores.xvg -v autovetores.trr**

2) Projeção dos pontos extremos do movimento em uma trajetória no formato PDB, usando o GROMACS

**g\_anaeig -v eigenvec.trr -f trajetória.xtc -first 1 -last 1 -extr extremos.pdb -nframes 2**

3) Geração das setas para visualização dos autovetores usando o programa **porcupine**

**porcupine -i extremos.pdb -o setas.vmd -f 1.0 -c**

4) Visualização no programa VMD

**vmd –e setas.vmd**

|  |
| --- |
| programas.001.png |

Ilustração de uso do programa porcupine. (A) Interface de comando. (B) Exemplo de saída no renderizada no programa VMD, as setas indicam a direção e amplitude do autovetor. (C) O uso avançado do programa permite distinguir vetores de diferentes amplitudes em cores diferentes, ex em vermelho os vetores com grande amplitude e em azul os vetores de menor amplitude.

Trj2pdb

Diego Enry Barreto Gomes1; Thereza A. Soares2,3; Pedro G. Pascutti1; Tjerk P. Straatma3

(1) Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ – Brasil. (2) Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE – Brasil (3) Pacific Northwest National Laboratory, Richland, WA – EUA. Distribuído via requisição por e-mail: diego@biof.ufrj.br

Descrição

O **trj2pdb** é um programa desenvolvido para converter trajetórias de simulação de dinâmica molecular no formato TRJ, adotado pelo programa NWCHEM, para trajetórias no formato PDB, universalmente aceito pelos programas de analise de simulação. Além da função de conversão, o **trj2pdb** permite ajustar a freqüência de escrita da trajetória e remover moléculas do solvente.

Exemplo de uso

|  |
| --- |
| Screen shot 2010-05-06 at 4.02.05 PM.png |

Tela de execução do programa **trj2pdb** apresentando a instrução de uso.

Nanopore

Diego Enry Barreto Gomes1; Thereza A. Soares2,3; Pedro G. Pascutti1; Tjerk P. Straatma3

(1) Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ – Brasil. (2) Universidade Federal de Pernambuco, Recife, PE – Brasil (3) Pacific Northwest National Laboratory, Richland, WA – EUA. Distribuído via requisição por e-mail: diego@biof.ufrj.br

Descrição

O programa **nanopore** escreve um arranjo de átomos no formato PDB, orientado no eixo Z, em diferentes condições e formas. O programa pode desenhar cubos ou cilindros de dimensões e espaço entre os pontos definidos pelo usuário. Além disso podem ser produzidas frações de ½ e ¼ de cilindro. Os arranjos produzidos podem ser usados em simulações de mecânica molecular ao incorporar atributos atômicos aos pontos (GOMES, 2008; GOMES, 2010).

Exemplo de uso

|  |  |
| --- | --- |
| #Execute nanopore  % ./nanopore  #Selecionar entre as formas disponíveis  Select the shape “  1 - cubic box “  2 - generic XYZ box “  3 - cylinder”  4 - tube + half tube + quarter tube “  % 4 | #Indicar espacejamento entre dois pontos.  #Esta distância pode determinar o raio do arranjo circular.  Please enter the distance between groups (Angstron)  % 10  # Indicar a extensão da rede de pontos. Se “cubic box” for # selecionada, apenas uma dimensão é #requerida. Se “generic # XYZ” é selecionado, as três dimensões serão necessárias. Neste # exemplo X e Y são escalonados para o raio selecionado e suas # dimensões definidas pela distancia entre os #pontos.  Enter the Z dimension in Angstrons (integer value)  % 200 |

Demonstração da execução do **nanopore**.

|  |
| --- |
| programas.002.png |

Arranjos produzidos pelo programa **nanopore** com espacejamento entre os pontos de 10Å. (A) ¼ de cilindro; (B) ½ cilindro; (C) cilindro.

Hbmap2grace

Diego Enry B. Gomes1, Alan Wilter da Silva2, Roberto D. Lins3, Pedro G. Pascutti1, Thereza A. Soares3

(1) Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ – Brasil. (2) EMBL - EBI, Wellcome Trust Genome Campus, Cambridge - Inglaterra. (3) Pacific Northwest National Laboratory, Richland, WA – EUA. Distribuído via requisição por e-mail: diego@biof.ufrj.br

Descrição

O programa hbmap2grace calcula a frequência das ligações hidrogênio dos arquivo **hbmap.xpm** e relaciona com a tabela de pares contida no arquivo **hbond.log**, ambos gerados pelo programa **g\_hbond** do GROMACS. O programa também permite selecionar conjuntos de ligações interessantes, agregar ligações, uma mesma marcação (*label)* para um aceitador com todos doadores, e reapresentar em escala temporal as ligações selecionadas.

Exemplo de uso

|  |
| --- |
| programas.003-001.png |

Tela de ajuda do programa **hbmap2grace** **(A)** e arquivos de teste, distribuídos com o programa. **(B)** Mapa de ligações hidrogênio gerado a partir do arquivo **hbmap.xpm**, convertida em imagem pelo programa **xpm2ps** (GROMACS). C) Lista de ligações hidrogênio derivada de um arquivo **hbond.log**.

|  |  |
| --- | --- |
| Screen shot 2010-05-07 at 12.36.35 PM.png | hbmap.png |

Resultado do programa **hbmap2grace**. À esquerda o programa em execução usando os arquivos de entrada mostrados na figura anterior. Logo que o programa inicia já são apresentadas as frequências das ligações hidrogênio, indexadas para seleção pelo usuário. As ligações podem ser agregadas numa mesma representação se for usada a mesma marcação (*label*). À direita o produto do programa apresentado como gráfico no programa **xmgrace**, os símbolos “+” representam a ocorrência de ligação na escala de tempo do eixo horizontal. No eixo vertical estão os números indicando as ligações selecionadas no exemplo a esquerda.

SurfinMD

Diego Enry Barreto Gomes1, Gabriel Limaverde Soares Costa Sousa1,3, Alan Wilter Sousa da Silva2, Pedro Geraldo Pascutti1

(1) Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ – Brasil. (2) EMBL - EBI, Wellcome Trust Genome Campus, Cambridge - Inglaterra (3) Instituto Nacional do Câncer, Rio de Janeiro, RJ – Brasil. Distribuído via requisição por e-mail: diego@biof.ufrj.br

Descrição

O programa **SurfinMD** usa o algoritmo de Connolly[[1]](#footnote--1) para calcular a superfície molecular. Como padrão, o programa calcula a superfície acessível ao solvente, utilizando uma esfera de prova com raio de 1.4Å, compatível com o diâmetro do solvente água. O programa é capaz de identificar a região excluída do solvente na interface entra duas moleculas (ex. enzima-inibidor). A área da superfície pode ser calculada para arquivos no formato PDB, como trajetórias de simulações de dinâmica molecular ou estruturas de Ressonância Magnética Nuclear de proteínas. A área total calculada é dividida em hidrofóbica e hidrofílica, de acordo com a característica em pH 7.0 do resíduo de aminoácido, quando presente (arquivo surf.dat). Outros resíduos que não aminoácidos presentes no banco de dados do programa são excluídos desta definição. Além disso o programa discrimina a área média para cada resíduo acompanhada do desvio padrão (arquivo **rsurf.dat**). Os arquivos de saída são simples e compatíveis com o programa **xmgrace**.

Exemplo de uso

|  |  |
| --- | --- |
| proteina.ligante.png | sitio.png |

Sistema de teste distribuído junto ao programa **SurfinMD**. Protease do vírus HIV-1 complexada com o ligante DMP (PDB 1BVE, estrutura número 1). À esquerda a proteína é apresentada no modelo *Cartoon* e colorida de acordo com a sequência. O ligante DMP, posicionado no sitio ativo da enzima é apresentado pelo modelo de bastões. À direita uma aproximação do sitio ativo onde a superfície molecular dos átomos a 4.0Å do DMP é apresentada como uma rede de pontos conectados (modelo *Mesh*).

|  |  |
| --- | --- |
| Screen shot 2010-05-07 at 3.37.14 PM.png | Screen shot 2010-05-07 at 2.15.02 PM.png |

Telas de execução do **SurfinMD**. À esquerda o exemplo de uso do programa. À direita uma demonstração de execução para o sistema 1BVE.

|  |  |
| --- | --- |
| surf.png | rsurf.png |

Resultado do programa **SurfinMD**. A saída do programa consiste em dois arquivos. À esquerda um gráfico produzido com o arquivo **surf.dat**, contém a área total, hidrofóbica e hidrofílica para cada quadro apresentado. À direita, o resultado do arquivo **rsurf.dat**, contendo a área média e o desvio padrão discriminada por resíduo. Pela clareza, apenas algumas áreas são apresentadas no gráfico.

Rsurf2grace

Diego Enry Barreto Gomes1, Priscila da Silva Figueiredo Celestino1, Pedro Geraldo Pascutti1

(1) Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ – Brasil. Distribuído via requisição por e-mail: diego@biof.ufrj.br

Descrição

A informação de área de interface molecular produzida pelo programa **SurfinMD** é de grande valia para interpretação de interações moleculares e planejamento de fármacos, sendo usada amplamente em Teses e trabalhos do nosso grupo e colaboradores. O processamento dos dados da área de interface molecular, entretanto, tem sido um processo lento e tedioso. Para eliminar estes fatores limitantes o programa **rsurf2grace** foi desenvolvido como complemento ao **SurfinMD**, automatizando o pós-processamento do arquivo de interfaces intermoleculares (**rsurf.dat**) e produzindo gráficos apenas com as informações de área consideradas relevantes pelo usuário.

|  |
| --- |
| Screen shot 2010-05-18 at 2.57.54 PM.png |

Tela de execução do programa **rsurf2grace** apresentando a instrução de uso.

|  |  |
| --- | --- |
| Screen shot 2010-05-18 at 3.01.28 PM.png | rsurf.png |

À esquerda o conteúdo parcial do arquivo **rsurf.dat** produzido pelo programa **SurfinMD**, contendo a média e o desvio padrão da área de contato proteína-ligante, discriminada por resíduo. O programa **rsurf2grace** processa os dados apresentando graficamente (por arquivo compatível com o **Xmgrace**) apenas a informação comumente procurada pelos usuários: resíduos com área de interação acima de um critério de corte. À direita, o gráfico automaticamente gerado, contendo apenas as áreas de interação maiores que 10.0Å2, entre a protease do HIV e o ligante DMP (PDB 1BVE, estruturas 1 à 20).

**Protocolo para construção de silica amorfa funcionalizada.**

Diego E.B. Gomes1, Roberto D. Lins2, Thereza A. Soares2, Pedro G. Pascutti1

(1) Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ – Brasil. (2) Pacific Northwest National Laboratory, Richland, WA – EUA. Distribuído via requisição por e-mail: diego@biof.ufrj.br – Brasil. Distribuído via requisição por e-mail: diego@biof.ufrj.br

# Requisitos para completar o protocolo com sucesso

1) Programas externos

a) VMD 1.8.7 (Visual Molecular Dynamics)

b) NAMD-Lite

c) NAMD

2) Run input file for NAMD-Lite

a) opt.namdlite

b) md.namdlite

c) quick.opt.namdlite

d) sio.buckingham.inp

2) Nossos programas

a) pdb2psf

3) Nossos scripts para o VMD

a) step1.tcl

b) count\_and\_label\_2breakbonds.tcl

# Tipos de átomos

SI = Silício

Ob = Oxigênio "bulk"

Os = Oxigênio de superfície

Hs = Hidrogênio de superfície

# Cargas. Note a carga do SI.

SI = 0.900 "bulk"; superfície ligado a silanol isolado ou vicinal

SI = 0.910 superfície ligado a silanol geminal (dois OH)

Ob = -0.450 "bulk"

Os = -0.660 superfície, ligado a hidrogênio

Hs = 0.430 superfície, ligado ao oxigênio

# Step 1: building de first structure

# Open VMD : inorganic builder: Amorphous SIO

# Add exclusion: VMD Selection: z > 10.0 or z < -10.0 : Build device

# close VMD

# Set unit cell dimensions on "script1.tcl" then run the script

vmd -dispdev text ASiO2.psf ASiO2.pdb -e script1.tcl >script1.log

# NOTA: O espaço entre as superfícies pode ser facilmente modificado aumentando o vetor Z.

export PATH=$PATH:/var/lmdm/dgomes/silica/programas/bin/

export vmdscripts=/var/lmdm/dgomes/silica/programas/vmdscripts/

# Podemos usar as cargas de Wensink2000.pdf

#Properties of Adsorbed Water Layers and the Effect of Adsorbed Layers on Interparticle Forces by Liquid Bridging

#E. J. W. Wensink, A. C. Hoffmann, M. E. F. Apol, and H. J. C. Berendsen

#Langmuir, 2000, 16 (19), 7392-7400

#DOI: 10.1021/la000009e

# Os = -0.71

# Hs = 0.40

# SIs = 0.31

# So que esse paper eh para silica cristalina e nao conta os efeitos de usar grupos geminais nem vicinais

# Eu proponho fazer assim:

# 1) Isolada

# Os = -0.71

# Hs = 0.40

# SIs = 0.31

# 2) Geminal

# Os = -0.71 duas vezes

# Hs = 0.40 duas vezes

# SIs = 0.62

Outro metodo eh fazer como Cruz-Chu, mas vai dar muito trabalho e eu nao tenho o menor tempo agora.

qnet = qsio + qneighbour

\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*

Enquanto eu nao faco isso, na minimizacao vamos considerar

SI = 0.9

Ob = 0.45

Os = -0.24

Hs = 0.24

\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*

e a carga do grupo funcional, atomo = 1 vai ser 0.24

# As cargas para o 4C\_COOH.pdb foram tiradas do GLU

# Step 1: building de first structure

# Open VMD : inorganic builder: Amorphous SIO

# Add exclusion: VMD Selection: z > 10 or z < -10 : Build device

#execute the step1.tcl script then close vmd.

#NOTE

# BEFORE executing the script, remember to correctly set the unit cell dimensions

#/NOTE

source script1\_v5.tcl

# Functions of step1.tcl

# 1) Fix atom properties: names,type,charge,mass.

# 2) Find shell/interior atoms

# 3) Assign "beta 1" to fix interior atoms

# 4) Neutralize the system by randomly removing Dangling atoms ( Silicon < numbonds 3 or Oxygen numbonds < 2)

# 5) Write output files

# quick and dirty:

# vmd -dispdev text ASiO2.psf ASiO2.pdb < script1\_v6beta.tcl > script1\_v6.log

#Step 2: Optimization the structure using NAMD-Lite

# TIP: open the previous log to get the cellBasisVectors :)

mdsim opt.namdlite

mdsim md.namdlite

mdsim quick.opt.namdlite

# Open in VMD and check for periodic disasters ! Manually fix then.

vmd -dispdev text step1.psf step3.coor < fixpbc.tcl > fixpbc.log

# step3.pdb will be created.

# !! Check if any atom has escaped the surface or whatever weird stuff may have happened.

# Move step3.pdb to step3.b4.fix.pdb

# Save fixed file as step3.pdb

# PART 2: PREPARE THE SURFACE

# b4\_breakbonds

!pdb2psf -i step3.pdb -bonds -d 2.0 -o step4.psf

pdb2psf -i step3.pdb -bonds -d 2.0 -o step4.psf

b4\_breakbonds -i step3.pdb -p step4.psf -o step4.pdb

# Execute VMD to measure exposed surface, estimate number of bonds to delete, and label atoms on the VERY surface.

vmd -dispdev text -pdb step4.pdb -e count\_and\_label\_2breakbonds.tcl > count\_and\_label\_2breakbonds.log

cp ok2breakbonds.pdb step5.pdb

pdb2psf -i step5.pdb -bonds -d 2.0 -o step5.psf

#check count\_and\_label\_2breakbonds.log for number of bonds to delete.

breakbonds -i step5.pdb -p step5.psf -o step6.psf <<EOF

928

EOF

# POR FAVOR USAR A VERSAO pdb2psf\_v9beta2 BETA DOIIS!!!

# Eu coloquei a opcao de ler os ATOMTYPES a partir do .psf e esqueci de criar uma condicao para o caso do arquivo .psf so conter as BONDS

pdb2psf -i step5.pdb -p step6.psf -o step7.psf -angles

#Attention here, it's really 5 to 7.

cp step5.pdb step7.pdb

../programas/fixcharges.part2.sh step7.psf step8.psf

cp step7.pdb step8.pdb

cp step8.pdb step8\_fixed.pdb

# Optimize to remove bad contacts.

/usr/local/bin/charmrun ++local /usr/local/bin/namd2 +p2 step8.em.namd &>step8.em.log&

\*\*\* Adicionar os hidrogenios com o silica protonate

# Olhe o /DATA1/doutorado/programas/2009/silica/add\_group\_v3/test2

\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*

\* √â necessário colocar o campo CRYST no arquivo de entrada. \*

\* Copie de algum .pdb anterior, pode ser até o step1.pdb \*

\* os vetores da caixa peri√≥dica não se alteram. \*

\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*

# Adicionar H ou OH na silica, e manter não-fixos os átomos adicionados.

silica\_protonate -i step8.coor -p step8.psf -o step9.pdb -op tmp.step9.psf

## POR FAVOR USAR A VERSAO pdb2psf\_v9beta2 BETA DOIIS!!!

## Eu coloquei a opcao de ler os ATOMTYPES a partir do .psf e esqueci de criar uma condicao para o caso do arquivo .psf so conter as BONDS

# quickly use gromacs to fix residue number.

editconf -f step9.pdb -o step9.pdb

pdb2psf -i step9.pdb -p tmp.step9.psf -o step9.psf

#corrigir as cargas para o forcefield.

silica\_fix\_charges -i step9.psf -o step10.psf

cp step9.pdb step10.pdb

cp step10.pdb step10\_fixed.pdb

[PARTE 3]

a) Otimizar bonds

/usr/local/bin/charmrun /usr/local/bin/namd2 step10.em.namd ++local +p4 &> step10.em.log &

b) Otimizar angulos

pdb2psf -i step10.coor -p step10.psf -o step11.psf -angles -psftype

/usr/local/bin/charmrun /usr/local/bin/namd2 step11.em.namd +p4 ++local &> step11.em.log &

c) Otimizar diedros

# nao precisa mais fazer o fix.charges, o pdb2psf preserva as cargas do psf anterior com a opcao -psftype

pdb2psf -i step11.coor -p step11.psf -o step12.psf -dihedrals -psftype

/usr/local/bin/charmrun ++local /usr/local/bin/namd2 step12.em.namd +p4 &> step12.em.log &

d) Pequena simula√ßão de DM para conferir:

/usr/local/bin/charmrun ++local /usr/local/bin/namd2 step13.em.namd +p4 &> step13.em.log &

[PARTE 4]

#Adicionar água. O VMD não consegue lidar com a lista de angulos da silica, portanto vamos ajuda-lo mantendo apenas as "bonds"

cp step12.psf step13.psf

pdb2psf -i step13.coor -p step13.psf -o step14.psf -psftype

#abra o VMD e salve um .pdb. Isso é necessário para assinalar o numero do segmento em todos os atomos. Caso contrario a solvatacao falha.

vmd -dispdev text -psf step14.psf -pdb step13.coor <step14.tcl

#execute o programa silica\_charges (NAO é o silica\_fix\_charges !!!!)

silica\_charges (nas simulacoes em "oph.silica" eu esqueci de fazer isso aqui e fiz no "step15"

#ele usa o arquivo step14.psf e produz o arquivo "saida.psf". Copie o saida.psf de volta para step14.psf

# NOTA

# Mais a frente este numero de segmento vai nos criar um problema.

[Simulacoes da superficie SEM GRUPO FUNCIONAL]

Para ficar facil o copy&paste dos comandos:

silica\_charges (step14.psf)

ln -s saida.psf step15.psf

ln -s step14.pdb step15.pdb

#Continue do va até [Simula√ßoes FMS] e prossiga a partir de:

pdb2psf -i step15.pdb -p step15.psf -o step16.psf -dihedrals -psftype

# poderia ateh pular o passo step17 mas já que mudamos um pouquinho as cargas melhor faze-lo for the sake of conciseness

[FIM - Simulacoes da superficie SEM GRUPO FUNCIONAL]

[Simulações FMS]

#Preparamos uma série de grupos funcionais para serem adicionados rapidamente a SIO. Processamos os arquivos para que o Carbono 1 seja aquele que se ligar ao Oxigenio livre na superficie da sílica.

$HOME/silica/grupos\_funcionais/

# NOTA por enquanto so o 4CCOO.charmm.pdb, 4CCOOH.charmm.pdb e o 4CNH3.charmm.pdb estao prontinhos.

# As cargas na penultima coluna e os nomes atomos certinhos.

Antes de solvatar precisamos adicionar o grupo funcional passar por uma nova etapa de otimiza√ßão.

vmd -dispdev text -psf step14.psf -pdb step14.pdb <delete\_random\_H\_v3.tcl

add\_function -i h.pdb -p h.psf -o step15.pdb -op step15.psf -fgroup 4CCOO.charmm.pdb

# NOTA

# As vezes os hidrogenios deletados estao em átomos de oxigênio na superfície porém virados para baixo, em cavidades.

# Nesses casos (raros) use o VMD para mover tanto o grupo funcional quanto o oxigênio ligado para longe dessa cavidade.

# Depois disso o vai conseguir minimizar e simular a dinamica sem dar erro.

#produce a .psf with angles and dihedrals (ja vai dar para pular o passo 16, as cargas já foram incluídas.

pdb2psf -i step15.pdb -p step15.psf -o step16.psf -dihedrals -psftype

ln -s step16.psf step17.psf

cp step15.pdb step17.pdb

# optimize

/usr/local/bin/charmrun ++local /usr/local/bin/namd2 +p4 step17.em.namd &>step17.em.log&

[Simulacoes FMS - passo 2]

O VMD (mais especificamente o modulo "psfgen" usado pelo SOLVATE) nao lida direito com os nomes de atomos estranhos que colocamos para a silica, alem disso ele se complica se o "segid" nao esta corretamente escrito no arquivo.

No passo a seguir vamos zerar a configuracao do "numero dos atomos". Eu nao sei usar o VMD para reiniciar a numeracao dos atomos, portanto sem mais demoras, vamos usar o gromacs para nos ajudar aqui e depois o vmd para gerar um novo .psf.

Aqui acontece o seguinte:

1) O editconf renumera os atomos e "ResID"

2) O VMD designa o "segid" e escreve novos arquivos .psf e .pdb contendo essa informacao.

cp step17.coor step18.pdb

editconf -f step18.pdb -o step19.pdb

vmd -dispdev text -e step19.tcl

vmd -dispdev text -e step20.tcl

../../programas/silica\_readpsfinfo/readpsfinfo <<EOF

step16.psf

step21.psf

EOF

cp step21.pdb mergedstructure.pdb

ln -s mergedstructure.psf min.nvt.psf

ln -s mergedstructure.pdb min.nvt.pdb

ln -s mergedstructure.pdb fixed.pdb

Edite o tamanho da celula no eixo Z e de uma folga para as aguas.

cellBasisVector1 57.306999 -0.100018 0.000000

cellBasisVector2 0.000000 57.306912 0.101530

#cellBasisVector3 0.000000 0.000000 58.172912

cellBasisVector3 0.000000 0.000000 93.537

agora e partir para o abraco

/usr/local/bin/charmrun ++local +p4 /usr/local/bin/namd2 min.nvt.namd >min.nvt.log &&

/usr/local/bin/charmrun ++local +p4 /usr/local/bin/namd2 heat.nvt.namd > heat.nvt.log &&

/usr/local/bin/charmrun ++local +p4 /usr/local/bin/namd2 md.npt.namd > md.npt.log &&

/usr/local/bin/charmrun ++local +p4 /usr/local/bin/namd2 md.npt.part0002.namd > md.npt.part0002.log &&

/usr/local/bin/charmrun ++local +p4 /usr/local/bin/namd2 md.npt.part0003.namd > md.npt.part0003.log &&

exit 0

\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*

\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*

\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*

[Simulacao com a OPH E grupo funcional]

\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*\*

# Preparando o sistema SEM íons. A idéia é abusar do efeito eletrostático

# Mentirinha tá, sobraram oxigênios e a gente arranjou uma desculpa p n ter que inventar um jeito do annealing não fazer "cagada" ex. SI-ligadoa 5 oxigênios.

# As coisas em .tcl que aparecem aqui são para fazer PARA FAZER NA MAO !!!

#abre os arquivos

mol new step17.psf

mol addfile step17.pdb

mol new system.psf

mol addfile center.pdb

set sel [atomselect top all]

# Orienta a OPH com o sitio virado para cima em Z>0

set M [transaxis x -90]

$sel move $M

set M [transaxis y -90]

$sel move $M

# Agora anote o minmax da OPH. E mova a enzima para que o mínimo fique a 20A da ORIGEM (0.0 0.0 0.0)

measure minmax $sel

{-26.968000411987305 -48.54399871826172 -22.760000228881836} {27.618000030517578 48.37799835205078 24.302000045776367}

#aqui é s√≥ somar o mínimo em Z (-22.76) com + 20.

$sel moveby {0.0 0.0 42.76}

#escreve o arquivo final.

source set\_unitcell.tcl

set\_unitcell 114.613 114.613 58.173 top 90.00 90.00 90.00

$sel writepdb oph.over.silica.pdb

# fim do .tcl

cp step17.coor step18.pdb

editconf -f step18.pdb -o step19.pdb

vmd -dispdev text -e step19.tcl

# Abra o vmd

vmd -f step20.psf step20.pdb -f system.psf oph.over.silica.pdb

set all [atomselect 0 all]

set sio [atomselect 0 "resname SIO"]

$sio set segid U0

set fms [atomselect 0 "resname FMS"]

$fms set segid F1

$all writepsf step20.fixed.psf

$all writepdb step20.fixed.pdb

vmd -f step20.fixed.psf step20.fixed.pdb -f system.psf oph.over.silica.pdb

1) use o modulo Merge structures e junte no arquivo "tudo.psf , tudo.pdb"

Ok, o VMD estraga com as coordenadas de tudo que eu adicionei p silica.

ignora o "tudo.pdb" e faz isso:

cat step20.fixed.pdb oph.over.silica.pdb > merged.pdb

2) Abra o merged e junte direito os atomos, removendo END e colocando CRYST apenas no inicio

3) Solvate

vmd -dispdev text -e step20.FMS.tcl

4) Agora preciso das ligacoes e dos nomes e cargas originais.

#### Abra o "step19.pdb" e copie o numero dos RESIDUOS em cima do "step17.psf"

#### Salve como "step17.fixed.psf"

readpsfinfo <<EOF

step17.fixed.psf

step21.psf

EOF

# Faltam algumas coisinhas que o VMD estraga.

cat mergedstructure.psf | sed s/"HSD CG CPH "/"HSD CG CPH1"/ | sed s/"HSD CE1 CPH "/"HSD CE1 CPH2"/ | sed s/"HSD CD2 CPH "/"HSD CD2 CPH1"/ > mergedstructure.fixed.psf

# fixe todo mundo menos o solvente

vmd -dispdev text fixnonwater.tcl

# Otimiza !!!

namd2 +p2 silica.oph.em.namd

# Agora é s√≥ alegria !

cp step21.pdb mergedstructure.pdb

ln -s mergedstructure.psf min.nvt.psf

ln -s mergedstructure.pdb min.nvt.pdb

#ln -s mergedstructure.pdb fixed.pdb

/usr/local/bin/charmrun ++local +p4 /usr/local/bin/namd2 min.nvt.namd >min.nvt.log &&

/usr/local/bin/charmrun ++local +p4 /usr/local/bin/namd2 heat.nvt.namd > heat.nvt.log &&

/usr/local/bin/charmrun ++local +p4 /usr/local/bin/namd2 md.npt.namd > md.npt.log &&

/usr/local/bin/charmrun ++local +p4 /usr/local/bin/namd2 md.npt.part0002.namd > md.npt.part0002.log &&

/usr/local/bin/charmrun ++local +p4 /usr/local/bin/namd2 md.npt.part0003.namd > md.npt.part0003.log &&

# DONE !

**Parâmetros de simulação para construção de silica amorfa funcionalizada.**

Diego E.B. Gomes1, Roberto D. Lins2, Thereza A. Soares2, Pedro G. Pascutti1

(1) Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ – Brasil. (2) Pacific Northwest National Laboratory, Richland, WA – EUA. Distribuído via requisição por e-mail: diego@biof.ufrj.br – Brasil. Distribuído via requisição por e-mail: diego@biof.ufrj.br

#################### step1.tcl ####################

# Arquivo step1.tcl

#################### step1.tcl ####################

#just in case

source /home/dgomes/vmdscripts/set\_unitcell.tcl

#surface

set\_unitcell 57.307 57.307 58.173 top 89.90 90.00 90.10

#pore

#set\_unitcell 171.920 171.920 58.173 top 89.90 90.00 90.10

#create selections

set all [atomselect top all]

set oxygen [atomselect top "name O or type O or element O"]

set silicon [atomselect top "name SI or name Si or type SI or type Si or element Si"]

set num\_oxygen [$oxygen num]

set num\_silicon [$silicon num]

#correcting name

$oxygen set type O

$silicon set type SI

#setting charge for the BKS force field

$oxygen set charge -1.2

$silicon set charge 2.4

#correcting mass

$oxygen set mass 15.9994

$silicon set mass 28.0855

#find shell atoms

set gridsz 1 ; # grid spacing

set radius 6 ; # sphere radius

set dist 6 ; # distance from surface

set shellatoms [measure surface $all $gridsz $radius $dist]

set shell [atomselect top [concat "index" $shellatoms]]

set interior [atomselect top [concat "not index" $shellatoms]]

set num\_shell [$shell num]

set num\_interior [$interior num]

#create the shell and interior selections

puts "Found $num\_shell shell atoms"

puts "Found $num\_interior interior atoms"

#fixing selection !keep this order !

set fix $interior

set free $shell

$fix set beta 1

$free set beta 0

#create list of the dangling atoms on the surface

set dsi [atomselect top "numbonds < 3 and beta 0 and (name SI or name Si or type SI or type Si or element Si)"]

set dox [atomselect top "numbonds < 2 and beta 0 and (name O or type O or element O)"]

#check electroneutrality

set evenodd [expr $num\_oxygen %2 ]

if { $evenodd == 1 } { set num\_oxygen [expr $num\_oxygen -1 ] }

set difference [ expr $num\_silicon - ($num\_oxygen/2) ] ; # TCL rounds up the difference

#adds set selections to exclude from output file.

if { $difference > 0} {

puts "Delete $difference Si"

set list\_to\_delete [$dsi get index]

for {set i 0} {$i < $difference} {incr i} {

set random [expr int(rand()\*[$dsi num])] ; # generate random number within number of dangling silicon atoms

set deletethis [atomselect top "index [lindex $list\_to\_delete $random]"] ; # get the index number of the atom to be deleted

puts "Deleting atom index [$deletethis list]"

$deletethis set beta 9 ;# we assign "9" to bfactor, so latter we won't write this kind of atom to output file.

}

if { $evenodd == 1 } {

set list\_to\_delete [$dox get index] ; #list of dox

set random [expr int(rand()\*[$dox num])] ; #random number within number of dangling silicon atoms

set deletethis [atomselect top "index [lindex $list\_to\_delete $random]"] ; # get the index number of the atom to be deleted

puts "Deleting atom index [$deletethis list] (one extra Oxygen to make it even)"

$deletethis set beta 9 ;# we assign "9" to bfactor, so latter we won't write this kind of atom to output file.

}

}

if { $difference < 0} {

puts "Delete [expr (-1)\*($difference)\*2] O"

set difference [expr ((-1)\*($difference)\*2 )] ; #remove double the of atoms just for oxygen

set list\_to\_delete [$dox get index] ; #list of dox

for {set i 0} {$i < $difference} {incr i} {

set random [expr int(rand()\*[$dox num])] ; #random number within number of dangling silicon atoms

set deletethis [atomselect top "index [lindex $list\_to\_delete $random]"] ; # get the index number of the atom to be deleted

puts "Deleting atom index [$deletethis list]"

$deletethis set beta 9 ;# we assign "9" to bfactor, so latter we won't write this kind of atom to output file.

}

if { $evenodd == 1 } {

set list\_to\_delete [$dox get index] ; #list of dox

set random [expr int(rand()\*[$dox num])] ; #random number within number of dangling silicon atoms

set deletethis [atomselect top "index [lindex $list\_to\_delete $random]"] ; # get the index number of the atom to be deleted

puts "Deleting atom index [$deletethis list] (one extra Oxygen to make it even)"

$deletethis set beta 9 ;# we assign "9" to bfactor, so latter we won't write this kind of atom to output file.

}

}

if { $difference == 0} {

puts "Great cut ! Your molecule is neutral"

}

# create output selection, excluding atoms labeled with beta 9

set output [atomselect top "not beta 9"]

#writing output

$output writepsf step1.psf

$output writepdb step1.pdb

$output writepdb step1\_fixed.pdb

#################### Fim do step1.tcl ####################

############################################################

# Arquivo sio.buckingham.inp, , para simulação com NAMD-Lite

############################################################

set echo=false end

! eps sigma eps(1:4) sigma(1:4)

! (kcal/mol) (A)

! ---------------------------------------

! I got this values from Table 2

! Cruz-Chu et al

! Water-Silica Force Field for Simulating Nanodevices

! J.Phys. Chem. B, Vol 110, No. 43, 2006

NONBonded O 0.15 4.295 0.15 4.295

NONBonded SI 0.30 3.5 0.30 3.5

set echo=true end

############################################################

# Arquivo sio.h.inp, para simulação com NAMD

############################################################

! from supplementary material of:

! Lorenz, C. D.; Crozier, P. S.; Anderson, J. A. & Travesset, A.

! Molecular Dynamics of Ionic Transport and Electrokinetic Effects in Realistic Silica Channels

! The Journal of Physical Chemistry C, 2008, 112, 10222-10232

! and inorganic builder:

!silicon section (experimental alek@ks.uiuc.edu)

! ATOMS

! Bulk silicon SI

! Bulk oxygen Ob

! Silanol silicon SI

! Silanol oxygen Os

! Silanol Hydrogen Hs

! Water oxygen Ow

! Water hydrogen Hw

BONDS

SI Ob 885.10 1.61

SI Os 428.00 1.42

Os Hs 545.00 0.96

SI O 885.10 1.61

ANGLES

SI Ob SI 4.66 174.22

Ob SI Ob 159.57 110.93

Ob SI Os 153.26 111.09

Os SI Os 89.62 116.26

SI Os Hs 57.50 106.00

SI O SI 4.66 174.22

O SI O 159.57 110.93

Ob SI SI 0.0 0.0

SI SI SI 0.0 0.0

DIHEDRALS

!H O SI O 1.3300 1 180.00 ! ALLOW ALC

!H O SI O 0.1800 2 180.00 ! ALLOW ALC

!H O SI O 0.3200 3 180.00 ! ALLOW ALC

Hs Os SI Ob 1.3300 1 180.00 ! ALLOW ALC

Hs Os SI Ob 0.1800 2 180.00 ! ALLOW ALC

Hs Os SI Ob 0.3200 3 180.00 ! ALLOW ALC

!SI O SI O 0.0000 1 180.00 ! ALLOW ALC

!SI Ob SI Ob 0.0000 1 180.00 ! ALLOW ALC

!Ob SI Os Hs 0.0000 1 180.00 ! ALLOW ALC

!SI Ob SI Os 0.0000 1 180.00 ! ALLOW ALC

!Os SI Os Hs 0.0000 1 180.00 ! ALLOW ALC

NONBONDED

!atom ignored epsilon Rmin/2 ignored eps,1-4 Rmin/2,1-4

SI 0.0 -0.3000 2.1475 0.0 -0.3000 2.1475

Ob 0.0 -0.1500 1.7500 0.0 -0.1500 1.7500

Os 0.0 -0.1500 1.7700 0.0 -0.1500 1.7700

Hs 0.0 -0.0460 0.2245 0.0 -0.0430 0.2245

O 0.0 -0.1500 1.7500 0.0 -0.1500 1.7500

HBOND CUTHB 0.5 ! If you want to do hbond analysis (only), then use

! READ PARAM APPEND CARD

! to append hbond parameters from the file: par\_hbond.inp

END

############################################################

# Arquivo quick.opt.namdlite

############################################################

# protocol params

numsteps 100

cgmin on

# initial config

coordinates step1.pdb

bincoordinates step2.coor

temperature 300

seed 12345

# output params

outputname step3

binaryoutput yes

dcdfile step3.dcd

dcdfreq 1

# integrator params

timestep 1.0

# force field params

structure step1.psf

parameters sio.buckingham.inp

exclude scaled1-4

1-4scaling 1.0

switching on

switchdist 8.0

cutoff 12.0

buckingham = on # replaces van der Waals interaction potential with Buckingham

buckparam = bks # uses BKS parameterizations, other possible values are ttam and fb

bucksafe = on # sets up a safety switch eliminating the artificial well in the potential

# mobile atom selection:

# z > 5 or z < -5

fixedAtoms on

fixedAtomsFile step1\_fixed.pdb

fixedAtomsCol B

cellBasisVector1 57.306999 -0.100018 0.000000

cellBasisVector1 0.000000 57.306912 0.101530

cellBasisVector1 0.000000 0.000000 58.172912

cellOrigin 0.0 0.0 0.0

############################################################

# Arquivo opt.namdlite

############################################################

# protocol params

numsteps 1000

cgmin on

# initial config

coordinates step1.pdb

temperature 300

seed 12345

# output params

outputname step1

binaryoutput yes

dcdfile step1.dcd

dcdfreq 1

# integrator params

timestep 1.0

# force field params

structure step1.psf

parameters sio.buckingham.inp

exclude scaled1-4

1-4scaling 1.0

switching on

switchdist 8.0

cutoff 12.0

buckingham = on # replaces van der Waals interaction potential with Buckingham

buckparam = bks # uses BKS parameterizations, other possible values are ttam and fb

bucksafe = on # sets up a safety switch eliminating the artificial well in the potential

# mobile atom selection:

# z > 5 or z < -5

fixedAtoms on

fixedAtomsFile step1\_fixed.pdb

fixedAtomsCol B

cellBasisVector1 57.306999 -0.100018 0.000000

cellBasisVector1 0.000000 57.306912 0.101530

cellBasisVector1 0.000000 0.000000 58.172912

cellOrigin 0.0 0.0 0.0

############################################################

# Arquivo md.namdlite

############################################################

# protocol params

numsteps 30000

#cgmin on

# initial config

coordinates step1.pdb

bincoordinates step1.coor

temperature 300

seed 12345

# output params

outputname step2

binaryoutput yes

dcdfile step2.dcd

dcdfreq 10

# integrator params

timestep 1.0

# force field params

structure step1.psf

parameters sio.buckingham.inp

exclude scaled1-4

1-4scaling 1.0

switching on

switchdist 8.0

cutoff 12.0

buckingham = on # replaces van der Waals interaction potential with Buckingham

buckparam = bks # uses BKS parameterizations, other possible values are ttam and fb

bucksafe = on # sets up a safety switch eliminating the artificial well in the potential

# mobile atom selection:

# z > 5 or z < -5

fixedAtoms on

fixedAtomsFile step1\_fixed.pdb

fixedAtomsCol B

cellBasisVector1 57.306999 -0.100018 0.000000

cellBasisVector1 0.000000 57.306912 0.101530

cellBasisVector1 0.000000 0.000000 58.172912

cellOrigin 0.0 0.0 0.0

############################################################

# Arquivo min.ptn.fixed.namd

############################################################

# input

coordinates ionized.pdb

structure ionized.psf

parameters par\_all27\_prot\_lipid\_na.inp

parameters par.LCX.inp

paratypecharmm on

# output

set output ionized

outputname $output

dcdfile ${output}.dcd

xstFile ${output}.xst

dcdfreq 500

xstFreq 500

binaryoutput no

binaryrestart yes

outputEnergies 1000

restartfreq 1000

# mobile atom selection:

# not water and not name CLA

fixedAtoms on

fixedAtomsFile ionized\_fixed.pdb

fixedAtomsCol O

# Basic dynamics

exclude scaled1-4

1-4scaling 1

COMmotion no

dielectric 1.0

# Simulation space partitioning

switching on

switchdist 9

cutoff 10

pairlistdist 12

# Multiple timestepping

firsttimestep 0

timestep 1

stepspercycle 20

nonbondedFreq 2

fullElectFrequency 4

# pme parameters

# ldbUnloadPME yes

#PME on

#PMETolerance 10e-6

#PMEInterpOrder 4

#PMEGridspacing 1

#PMEPencils 12

PME yes

PMEGridSizeX 128

PMEGridSizeY 128

PMEGridSizeZ 128

dcdUnitCell yes

# Temperature control

set temperature 298

temperature $temperature; # initial temperature

# Pressure coupling !dgomes

useGroupPressure yes

useFlexibleCell yes

#useConstantRatio yes

#useConstantArea yes # XY is constant

# Berendsen Pressure Coupling

#BerendsenPressure on

#BerendsenPressureTarget 1.01325

#BerendsenPressureCompressibility 4.57E-5

#BerendsenPressureRelaxationTime 10.0

#BerendsenPressureFreq 2

#Langevin Temperature

langevin on

langevinDamping 10

langevinTemp 298.15

langevinHydrogen no

#Langevin Pressure stuff

langevinPiston on

langevinPistonTarget 1.01325

langevinPistonPeriod 200

langevinPistonDecay 10

langevinPistonTemp 298.15

#reading from .xst file

cellBasisVector1 128.000000 0.000000 0.000000

cellBasisVector2 0.000000 128.000000 0.000000

cellBasisVector3 0.000000 0.000000 128.000000

cellOrigin 0.0 0.0 0.0

# wrap stuff

wrapAll on

wrapNearest on

# shake

rigidbonds all # SHAKE

rigidtolerance 0.00001 # SHAKE

rigiditerations 400 # SHAKE

# dgomes

margin 5

# Scripting

# run one step to go into scripting mode

minimize 0

# turn off until later

langevinPiston off

minimize 10000

############################################################

# Arquivo heat.npt.namd

############################################################

# input

coordinates ionized.pdb

structure ionized.psf

parameters par\_all27\_prot\_lipid\_na.inp

parameters par.LCX.inp

paratypecharmm on

bincoordinates heat.backbone.fixed.restart.coor

binvelocities heat.backbone.fixed.restart.vel

extendedsystem heat.backbone.fixed.restart.xsc

# output

set output heat.backbone.fixed.npt

outputname $output

dcdfile ${output}.dcd

xstFile ${output}.xst

dcdfreq 500

xstFreq 500

binaryoutput no

binaryrestart yes

outputEnergies 1000

restartfreq 1000

# mobile atom selection:

# not water and not name CLA

fixedAtoms yes

fixedAtomsFile backbone\_fixed.pdb

fixedAtomsCol O

# Basic dynamics

exclude scaled1-4

1-4scaling 1

COMmotion no

dielectric 1.0

# Simulation space partitioning

switching on

switchdist 9

cutoff 10

pairlistdist 12

# Multiple timestepping

firsttimestep 0

timestep 1

stepspercycle 20

nonbondedFreq 2

fullElectFrequency 4

# pme parameters

# ldbUnloadPME yes

#PME on

#PMETolerance 10e-6

#PMEInterpOrder 4

#PMEGridspacing 1

#PMEPencils 12

PME yes

PMEGridSizeX 128

PMEGridSizeY 128

PMEGridSizeZ 128

dcdUnitCell yes

# Temperature control

#set temperature 298

#temperature $temperature; # initial temperature

# Pressure coupling !dgomes

useGroupPressure yes

#useFlexibleCell yes

#useConstantRatio yes

#useConstantArea yes # XY is constant

# Berendsen Pressure Coupling

#BerendsenPressure on

#BerendsenPressureTarget 1.01325

#BerendsenPressureCompressibility 4.57E-5

#BerendsenPressureRelaxationTime 10.0

#BerendsenPressureFreq 2

#Langevin Temperature

langevin on

langevinDamping 10

langevinTemp 298.15

langevinHydrogen no

#Langevin Pressure stuff

langevinPiston on

langevinPistonTarget 1.01325

langevinPistonPeriod 200

langevinPistonDecay 10

langevinPistonTemp 298.15

#reading from .xst file

#cellBasisVector1 128.000000 0.000000 0.000000

#cellBasisVector2 0.000000 128.000000 0.000000

#cellBasisVector3 0.000000 0.000000 128.000000

#cellOrigin 0.0 0.0 0.0

# wrap stuff

wrapAll on

wrapNearest on

# shake

rigidbonds all # SHAKE

rigidtolerance 0.00001 # SHAKE

rigiditerations 400 # SHAKE

# dgomes

margin 5

# Scripting

# run one step to go into scripting mode

minimize 0

# turn off until later

langevinPiston on

run 10000

############################################################

# Arquivo md.namd

############################################################

# input

coordinates ionized.pdb

structure ionized.psf

parameters par\_all27\_prot\_lipid\_na.inp

parameters par.LCX.inp

paratypecharmm on

bincoordinates heat.backbone.fixed.npt.restart.coor

binvelocities heat.backbone.fixed.npt.restart.vel

extendedsystem heat.backbone.fixed.npt.restart.xsc

# output

set output md.part0001

outputname $output

dcdfile ${output}.dcd

xstFile ${output}.xst

dcdfreq 5000

xstFreq 5000

binaryoutput no

binaryrestart yes

outputEnergies 1000

restartfreq 5000

# mobile atom selection:

# not water and not name CLA

fixedAtoms no

fixedAtomsFile backbone\_fixed.pdb

fixedAtomsCol O

# Basic dynamics

exclude scaled1-4

1-4scaling 1

COMmotion no

dielectric 1.0

# Simulation space partitioning

switching on

switchdist 9

cutoff 10

pairlistdist 12

# Multiple timestepping

firsttimestep 0

timestep 1

stepspercycle 20

nonbondedFreq 2

fullElectFrequency 4

# pme parameters

# ldbUnloadPME yes

#PME on

#PMETolerance 10e-6

#PMEInterpOrder 4

#PMEGridspacing 1

#PMEPencils 12

PME yes

PMEGridSizeX 128

PMEGridSizeY 128

PMEGridSizeZ 128

dcdUnitCell yes

# Temperature control

#set temperature 298

#temperature $temperature; # initial temperature

# Pressure coupling !dgomes

useGroupPressure yes

#useFlexibleCell yes

#useConstantRatio yes

#useConstantArea yes # XY is constant

# Berendsen Pressure Coupling

#BerendsenPressure on

#BerendsenPressureTarget 1.01325

#BerendsenPressureCompressibility 4.57E-5

#BerendsenPressureRelaxationTime 10.0

#BerendsenPressureFreq 2

#Langevin Temperature

langevin on

langevinDamping 10

langevinTemp 298.15

langevinHydrogen no

#Langevin Pressure stuff

langevinPiston on

langevinPistonTarget 1.01325

langevinPistonPeriod 200

langevinPistonDecay 10

langevinPistonTemp 298.15

#reading from .xst file

#cellBasisVector1 128.000000 0.000000 0.000000

#cellBasisVector2 0.000000 128.000000 0.000000

#cellBasisVector3 0.000000 0.000000 128.000000

#cellOrigin 0.0 0.0 0.0

# wrap stuff

wrapAll on

wrapNearest on

# shake

rigidbonds all # SHAKE

rigidtolerance 0.00001 # SHAKE

rigiditerations 400 # SHAKE

# dgomes

#margin 5 #nao usar margin na simulacao, so na minimizacao

# Scripting

# run one step to go into scripting mode

minimize 0

# turn off until later

langevinPiston on

run 10000000

1. Connolly,M.L. "solvent-accessible surfaces of proteins and nucleic-acids" (1983) Science, 221, 709–713 [↑](#footnote-ref--1)