

在 cluster 上交分子动力学模拟作业的步骤：

1.准备复合物的参数文件(.top, .crd)

(1)计算小分子配体的电荷 (amber 不提供小分子的电荷参数)

可以用 amber 自带的 bcc 电荷, antechamber -i ***.mol2 -fi mol2 -o ***_bcc.mol2 -fo mol2 -c bcc

也可采用外部程序计算的电荷, 如 gaussian, 先计算静电势, 然后拟合 RESP 电荷。具体步骤:

利用 antechamber 产生计算静电势的文件, antechamber -i ***.mol2 -fi mol2 -o ligand.gjf -fo gcrt

修改 ligand.gjf, 去掉#HF 行中的 opt。然后用 gaussian 计算: g03 ligand.gjf。计算完毕产生 ligand.log 文件 拟合 resp 电荷 antechamber -i ligand.log -fi gout -o resp.mol2 -fo mol2 -c resp 将 resp.mol2 中的电荷部分拷贝到原始的 mol2 文件, 即***.mol2

(2)小分子参数文件

如果是计算 bcc 电荷, antechamber -i ***_bcc.mol2 -fi mol2 -o ligand.prep -fo prepi
parmchk -i ligand.prep -f prepi -o ligand.frcmod

如果计算 resp 电荷, antechamber -i ***.mol2 -fi mol2 -o ligand.prep -fo prepi
parmchk -i ligand.prep -f prepi -o ligand.frcmod

注: 此处的***.mol2 中电荷部分已经修改过

(3)将小分子***.mol2 与蛋白分子***.pdb (没有氢原子) 合并成一个复合物, 存成 pdb 文件, 可命名为 temp.pdb

(4)产生复合物的参数文件

命令: tleap -s -f tleap.in

tleap.in 内容:

source leaprc.gaff

loadamberprep ligand.prep

loadamberparams ligand.frcmod

check LIG (注: 为***.mol2 文件中的分子子结构的命名, 一个配体对应唯一的子结构命名)

saveamberparm LIG lig.top lig.crd (小分子参数文件)

source leaprc.ff03

com=loadpdb temp.pdb (导入复合物文件)

check com

saveamberparm com com.top com.crd

solvatebox com TIP3PBOX 10.0 (加水盒子)

addions com Na+ N (或者 Cl-, 看复合物带什么电性, N 取决于复合物所带的电荷, 使它保持中和)

saveamberparm com complex.top complex.crd (加了模型水的复合物参数)

2cluster 上计算分子动力学模拟

先把 complex.top complex.crd 两个文件传到 cluster

上传 mini.in heat.in 和 md.in 输入文件, 分别计算结构优化, 加热和平衡过程, 文件中的具体参数设置见 amber manual

交作业命令: qsub md.pbs

删作业命令: qdel N (N 是作业的编号)

看作业计算情况: qstat -f N

根据该命令提供的信息找到作业所在的节点，如 c0-12

则 `ssh c0-12`

`cd /data/$username/N.....`

可进入文件夹访问