

Tutorial — Montagem de solução filmogênica com PVA + quercetina no GROMACS

Objetivo

Montar um sistema com **10 moléculas de PVA** e **3 moléculas de quercetina**, solvatado em água (modelo SPC), pronto para simulação com restrições de posição aplicadas à quercetina.

Etapa 1 – Criar caixa e inserir moléculas do filme

1.1 Criar uma caixa cúbica de 10 nm:

```
gmx editconf -f pva.gro -o box.gro -c -box 10 10 10
```

Isso cria uma caixa vazia de 10x10x10 nm³, centralizando a molécula de PVA.

1.2 Inserir 9 moléculas adicionais de PVA (total = 10):

```
gmx insert-molecules -f box.gro -o filme_inicial.gro -ci pva.gro -nmol 9
```

1.3 Inserir 3 moléculas de quercetina:

```
gmx insert-molecules -f filme_inicial.gro -o filme_final.gro -ci quercetina.gro -nmol 3
```

Etapa 2 – Editar o arquivo .top

Abra o arquivo **filme.top** no editor de texto e, ao final do arquivo, adicione:

```
[ molecules ]
; Compound      #mols
PVA              10
QRC              3
```

Certifique-se de que os arquivos **.itp** do PVA e da quercetina estejam incluídos corretamente no início do **.top**.

Etapa 3 – Solvatar o sistema com água (modelo SPC)

```
gmx solvate -cp filme_final.gro -cs spc216.gro -o solucao_filmogenica.gro -p film.top
```

Etapa 4 – Minimização de energia

4.1 Gerar o arquivo de entrada:

```
gmx grompp -f ./mdp/em.mdp -c solucao_filmogenica.gro -p film.top -o em.tpr -maxwarn 2
```

4.2 Rodar a minimização:

```
gmx mdrun -v -deffnm em
```

Etapa 5 – Criar grupo de átomos da quercetina (sem hidrogênios)

```
gmx make_ndx -f quercetina.gro -o index_qrc.ndx
```

No prompt que abrir, digite:

```
0 & ! a H*  
q
```

Isso cria um grupo com todos os átomos da quercetina **exceto os hidrogênios**.

Etapa 6 – Gerar restrições de posição para a quercetina

```
gmx genrestr -f quercetina.gro -n index_qrc.ndx -o posre_qrc.itp -fc 1000 1000 1000
```

No prompt, digite:

3

Etapa 7 – Adicionar restrições de posição no .top

No arquivo **filme.top**, logo após a linha:

```
#include "quercetina.itp"
```

adicione:

```
; Ligand position restraints
#ifdef POSRES
#include "posre_qrc.itp"
#endif
```

Etapa 8 – Simulações de Equilíbrio

8.1 NVT (temperatura constante)

```
gmx grompp -f ./mdp/nvt.mdp -c em.gro -r em.gro -p film.top -o nvt.tpr -maxwarn 3
```

```
gmx mdrun -deffnm nvt -v
```

8.2 NPT (pressão e temperatura constantes)

```
gmx grompp -f npt.mdp -c nvt.gro -t nvt.cpt -r nvt.gro -p film.top -o npt.tpr -maxwarn 3
```

```
gmx mdrun -deffnm npt -v
```

Etapa 9 – Preparar para simulação com evaporação (casting)

Copie os arquivos necessários para a próxima pasta:

```
cp npt.gro npt.cpt film.top 4_md/
```

```
cd 4_md/
```

Etapa 10 – Iniciar a simulação com evaporação

Na pasta 4_md, execute:

```
./run_evapore_loop.sh
```

Esse script executa a simulação em ciclos e remove solvente progressivamente, simulando o processo de **casting por evaporação**.

Boa sorte!