Preparação:

Gromacs. Bat

C:\gromacs\bin\cd..

C:\gromacs\mkdir simu

Vá ao explorer e colar o arquivo 4or0.pdb na pasta c:\gromacs\simu

Depois:

C:\gromacs\cd simu

O prompt deve aparecer assim:

C:\gromacs\simu

**1) gmx pdb2gmx -ff gromos53a6 -f 4or0.pdb -water spc -o 4or0.gro**

arquivo Gerado: 4or0.gro

**2) gmx editconf -f 4or0.gro -o box.gro -bt cubic -d 1.0**

Arquivo Gerado: box.gro

topol.top

**3) gmx solvate -cp box.gro -cs spc216.gro -p topol.top -o solv.gro**

Arquivo Gerado: solv.gro

**4) gmx grompp -f ions.mdp -c solv.gro -p topol.top -o ions.tpr**

Arquivo Gerado: ions.tpr

5) **gmx genion -s ions.tpr -o solv\_ions.gro -p topol.top -pname NA -nname CL -neutral**

Vai aparecer o menu. **Digite 13 1**

Texto

Descrição gerada automaticamente

Arquivo Gerado: solv\_ions.gro

**6) gmx grompp -f em.mdp -c solv\_ions.gro -p topol.top -o em.tpr**

Arquivo Gerado: em.trp

**7) gmx mdrun -v -deffnm em**

Arquivo Gerado: em.edr. sair para tomar café/cerveja, o que seja!

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

Arquivo gerado potential.xvg (tabela de dados)

Texto

Descrição gerada automaticamente

Digital 10 ( energia potencial) e dar dois enters. O gráfico pode ser gerado no Excel. Abrir no Bloco de Notas e limpar as linhas antes dos dadas.

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

Arquivo gerado: nvt.tpr

10) gmx mdrun -deffnm nvt

Arquivo gerado: nvt.edr

Aqui tá começando a rodar de verdade. CAFÉ! CAFÉ!

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

12) gmx mdrun -deffnm npt -v

CAFÉ!

13) gmx grompp -f md.mdp -c npt.gro -t npt.cpt -p topol.top -o md\_0\_1.tpr

14) Passo final para executar:

gmx mdrun -deffnm md\_0\_1 -v

CAFÉ!