Commands for Project

gmx pdb2gmx -f 4mod\_nowaters.pdb -o 4mod.gro -ignh

gmx editconf -f 4mod.gro -o 4mod\_box.gro -c -d 2 -bt cubic

gmx solvate -cp 4mod\_box.gro -cs spc216.gro -o solv.gro -p topol.top

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

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

gmx grompp -f minim.mdp -c ions.gro -p topol.top -o em.tpr

gmx mdrun -v -deffnm em &

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

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

gmx mdrun -v -nt 8 -deffnm nvt &

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

gmx mdrun -v -nt 8 -deffnm npt &

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

gmx mdrun -v -nt 8 -deffnm md &