

## MODELISATION MULTI-ECHELLE

### Analyse d'une dynamique

#### Contexte

Le but de ce TP est de visualiser et analyser une trajectoire de dynamique moléculaire.

#### Exercice 1: visualisation d'une dynamique CHARMM

Récupérez la structure alanin.pdb sur le site : <http://alpha.univ-mlv.fr/MODELISATION-MASTER/alanin.pdb>

Et le fichier alanin.dcd sur : <http://alpha.univ-mlv.fr/MODELISATION-MASTER/alanin.dcd>

Alanin.dcd est un fichier de trajectoire de dynamique créé par le programme CHARMM, c'est à dire l'ensemble des structures lors d'une simulation de la molécule qui bouge.

Dans VMD ouvrir alanin.pdb

Avec un clic gauche pour sélectionner et un droit sur alanin.pdb écrit dans la fenêtre « VMD Main », choisir « Load data into molecule » et chercher le fichier alanin.dcd que vous avez téléchargé. Le fichier .dcd est l'ensemble des nouvelles coordonnées lors de la dynamique avec le programme CHARMM.

Maintenant, dans « Frames », on doit voir 100 Frames, soit 100 pas de dynamique. Dans VMD Main, on peut regarder les différentes conformations avec le curseur ou choisir un défilé automatique.

Faire apparaître et observer les liaisons H qui se forment et se cassent.

Dans Extensions /Analysis, Hydrogen bond, faire l'analyse du nombre de liaison H par pas de dynamique.

#### Exercice 2 : visualisation d'une dynamique AMBER

Nous allons analyser la dynamique faite sur un peptide de tryptophane : TRPcage. Récupérez le fichier topologique TRPcage.prmtop qui est un fichier topologique de AMBER, qui donne les paramètres du champs de force AMBER utilisé et la topologie (liaisons, angles, dièdres) associée, et le fichier TRPcage.inpcrd qui donne les coordonnées des atomes :

<http://ambermd.org/tutorials/basic/tutorial2/files/TRPcage.prmtop>

<http://ambermd.org/tutorials/basic/tutorial2/files/TRPcage.inpcrd>

Allez sur la page : <http://ambermd.org/tutorials/basic/tutorial2/section4.htm> et commencez les instructions à partir de « So, delete this molecule so that we can load a prmtop instead. »

Sautez la section 5 et suivez les instructions de la section 6:

<http://ambermd.org/tutorials/basic/tutorial2/section6.htm>

Pour dézipper sous window : double cliquer sur le fichier et décompressez. Sinon, ouvrez le programme 7-zip et cherchez le fichier .gz que vous voulez décompresser (le chemin doit être celui de l'emplacement où vous avez mis le fichier). Puis choisir « Extract ».

Puis : section suivante

<http://ambermd.org/tutorials/basic/tutorial2/section7.htm>

Puis :

<http://ambermd.org/tutorials/basic/tutorial2/section8.htm>

Vous pouvez aussi si vous avez le temps en utilisant le menu « Analysis » sur VMD, visualiser le diagramme de Ramachandran, ou bien des distributions radiales de molécules d'eau autour de certains atomes ou résidus, ou encore faire des statistiques sur les liaisons H.