

# MODELISATION MULTI-ECHELLE

## Dynamique Moléculaire

### Contexte

Nous allons utiliser la suite de programme AMBER <http://ambermd.org/> pour effectuer une dynamique moléculaire d'un peptide (2 acides aminés) et analyser cette dynamique.

### Instructions

Vous allez suivre le tutoriel <http://ambermd.org/tutorials/basic/tutorial0/>.

Pour le **point 6** du tutoriel et points suivants, il est préférable que vous utilisiez tleap au lieu de xleap. Attention xleap ne connaît pas le clavier numérique et ne connaît pas les copier coller.

Pour le **point 7**, leaprc.protein.ff14SB n'existe pas dans votre système. Pour savoir où se trouve le fichier qu'on veut, il suffit de regarder quand on lance tleap ou xleap dans quels répertoires le logiciel dit qu'il va chercher ses données. On a l'info qu'il va chercher dans les répertoires qui sont dans :

```
/usr/local/apps/amber14/dat/leap/
```

Regarder les fichiers qui sont dans les répertoires.

Le fichier leaprc qu'on veut utilisé et qui est installé dans le système est leaprc.ff14SB. Il se trouve dans le répertoire /usr/local/apps/amber14/dat/leap/cmd.

Pour le **point 10**, il faut remplacer leaprc.water.tip3p par leaprc.tip3p pour les mêmes raisons que pour la question 7.

Pour le **point 11**, avant de quitter Xleap (ou tleap si vous êtes sur tleap),

Après avoir créer les fichiers d'entrée d'Amber :

```
> saveamberparm foo prmtop inpcrd
```

afin de sauver le peptide sous format pdb, tapez :

```
> savepdb foo peptide.pdb
```