

# 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 la **question 7**, vérifier que le fichier de champs de force pour le champs de force FF14SB est bien le fichier `leaprc.protein.ff14SB`. Si ce n'est pas le cas, utiliser le nom correspondant installé sur l'ordinateur.

Pour la **question 8** et suivantes, si vous préférez, vous pouvez utiliser `tleap` au lieu de `xleap`.

Pour la **question 10**, vérifier que le fichier de champs de force pour le champs de force de l'eau TIP3P est bien le fichier `leaprc.water.tip3p`. Si ce n'est pas le cas, utiliser le nom du fichier installé sur votre ordinateur.

Pour la **question 11**, avant de quitter `Xleap`, afin de sauver le peptide sous format `pdb`, tapez :

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