

MODELISATION MULTI-ECHELLE

TP QM/MM amber

Faire le tutorial: <http://ambermd.org/tutorials/advanced/tutorial2/>

En suivant les instructions suivantes:

Ne pas utiliser xleap mais tleap
La commande Edit de xleap ne marche pas.

Pour les commandes dans tleap ou xleap:
les fichiers sont
leaprc.tip3p et non leaprc.water.tip3p
leaprc.ff14SB et non leaprc.protein.ff14SB

Pour faire la relaxation, dans tleap :
Select NMA
Relax NMA

Pour visualiser ce qu'on a créer:
Savepdb NMA NMA-solvate.pdb