
Utilisation du logiciel *Macromodel*

1. Construction des structures de départ (menu INPUT)

DRAW -> dessiner la structure.

Modifier la structure en utilisant les atomes et fragments moléculaires dans le Menu.

ROTAT -> Fixer la valeur des angles dièdres.

H ADD -> Ajouter les hydrogènes.

H DEL -> Supprimer les hydrogènes.

DELET-> Supprimer l'objet (atome, molécule, etc.) de l'écran.

Scale-> Ajuster la taille de la molécule.

• Lire des structures à partir de fichiers.

READ -> *Open* (sélectionner le nom du fichier).

2. Calculs énergétiques (menu ENRGY)

• Calculs d'énergie d'un conformère

ENRGY -> **MINIM** -> **AMBER*** -> **START** (sélectionner *NEW* et entrer le nom de votre calcul, sans espace ni caractères particuliers)

• Calculs d'énergies en fonction de l'angle de torsion

ENRGY -> **MINIM** -> **AMBER*** -> **Drive** (sélectionner *1* dans le "Prompt" et puis sélectionner l'angle torsion de la molécule) -> **START**

• Calculs d'énergies en fonction des deux angles de torsion

ENRGY -> **MINIM** -> **AMBER*** -> **Drive** (sélectionner *2* dans le "Prompt" et puis sélectionner les deux angles de torsion de la molécule) -> **START**

• Affichage de la distribution des charges

ENRGY -> **ELECT** -> "Display and modify charges" -> "Display all charges"

• Calculs avec contraintes des angles torsion

ENRGY -> **CNTR** -> **Reset** -> "All constrains" -> **CTors** -> "Enter desirable angle" -> "Enter tolerance (0.0)"

puis

ENRGY -> **MINIM** -> **AMBER*** -> **START**

pour plus d'informations sur une commande vous obtiendrez le menu **HELP** en cliquant avec le bouton droit de la souris sur la commande.

2. Dynamique Moléculaire (menu ENRGY)

- *DM à la température normale*

ENRGY -> **DYNMC** -> **AMBER*** -> **MDyn** (sélectionner *Automatic Setup*) -> **Sampl** -> **START**

- *DM à haute température*

ENRGY -> **DYNMC** -> **AMBER*** -> **MDyn** (ne pas sélectionner *Automatic Setup*) -> **SimulT** -> **Sampl** -> **START**

4. Analyse des calculs (menu ANLYZ)

- *Mesure des paramètres géométriques d'une structure*

ANLYZ -> **ADist** (distances)
-> **BAngl** (angles de liaisons)
-> **DAngl** (angles dièdres)

- *Analyse de la variation d'énergie en fonction de l'angle de torsion*

ANLYZ -> **Plt1D** -> *Open* -> sélectionner le nom du fichier

- *Analyse des cartes de Ramachandran*

ANLYZ -> **Plt2D** -> *Open* -> sélectionner le nom du fichier

- *Visualisation de Structures sauvegardées*

READ -> *Open* -> sélectionner le nom de votre calcul (*.dat ou *.out).

pour plus d'informations sur une commande vous obtiendrez le menu **HELP** en cliquant avec le bouton droit de la souris sur la commande.
