

MACROMODEL: HOW TO

¿Quieres utilizar *maestro* y no volverte loco? ¿Estás listo para adentrarte en el abismo de la mente humana y mirar lo que hay allí? ¿Sin volverte loco? ¿Sin perder cordura? “*He visto cosas que vosotros humanos no podéis imaginar*” dijo el cyborg en Blade Runner: y una de esas era *maestro*.

MAESTRO: super-short survival guide for beginners

- 1) Project → Import Structure → aquí filtras los ficheros por la extensión que tienen... Te aconsejo importar ficheros con formato .mol2 por qué estos los lee muy bien, y los .xyz muchas veces no. Molden guarda ficheros en formato .mol2.
- 2) Applications → Macromodel → Conformational Search
Aparecerá una ventana con muchas opciones; yo pongo normalmente:
 -) Potencial: no
 -) Constraints: congelas todos los átomos o las distancias (a según de lo que necesites)
 -) substructure: no
 -) Mini: maximum iterations: 1000
convergence threshold: 0.001
 -) Csearch: aquí también aparecerán muchas opciones. Yo buscaba rotaciones y torsiones, entonces ponía:
 -) Torsional rotations: y seleccionas las rotaciones que quieras
 -) Comparison atoms: heavy atoms + OH, SH
- 3) Ahora haces un write → nombre file (sin extensión!!!)
Escribirá un file nombrefile.com que es tu input
- 4) Ahora lanzas el comando: `mm.sh input` (sin extensión!!!) *cola*
Yo tenía este script (mm.sh) que no sé si es de *maestro* o si alguien lo hizo; esto tienes que preguntárselo a Carles
- 5) Ouputs: .log y ...out.mae: aquí hay tus estructuras con sus energías!
- 6) Import → Structures: abres tu nombrefile_out.mae!
- 7) Project → Show table
Aquí encontrarás todas las estructuras que ha creado con sus energías y cuantas de cada una!!!!
- 8) Coge la estructura más estable y Export structure
- 9) Si quieres hacer un análisis de cuantas familias hay de estructuras y cosas así, hay la opción X_cluster (Applications → Macromodel → Xcluster) donde especificas cuantas subdivisiones quieres y te hace el gráfico al final! Te acuerdas ese dibujito con las familias y cosas así?
- 10) Ya STA! Happy Maestro!