

Uso de las herramientas genbox y editconf en el programa Gromacs 4.5.4.

Prof. José G. Parra F.

17 de Abril del 2014

En este tutorial se van a construir una caja y una capa de agua usando las herramientas genbox y editconf del programa gromacs. La idea básica es aprender a realizar configuraciones iniciales para desarrollar una simulación. Para este tutorial, vamos a utilizar un archivo *.xyz construido en el programa avogadro y luego usando openbabel haremos la conversión al formato *.gro.

1. Construcción de la molécula de agua usando Avogadro.

Con el programa avogadro dibujar una molécula de agua y optimizar su geometría usando el modelo de energía potencial mmff94. Luego, guardar el archivo usando la extensión xyz. El archivo agua.xyz tendrá la siguiente información (abrir con un editor de texto, por ejemplo gedit):

3

O	-0.00232	1.98208	0.01651
H	0.96557	1.95596	-0.02187
H	-0.28117	1.45993	-0.75067

Usando el programa openbabel 2.3.3 se puede convertir este archivo al formato *.gro con el siguiente comando en un terminal:

```
$ obabel agua.xyz -O agua.gro
```

El archivo agua.gro, tendrá la siguiente información:

```

agua.xyz
3
  1HOH      O    1  -0.000   0.198   0.002
  0HOH      H    2   0.097   0.196  -0.002
  0HOH      H    3  -0.028   0.146  -0.075
0.00000  0.00000  0.00000

```

Seguidamente, haremos una modificación a dicho archivo. Cambiaremos el título del archivo de agua.xyz y le pondremos agua. Los ceros al lado de *HOH* los cambiaremos por el número uno porque dichos átomos pertenecen a la molécula de agua. El archivo final debe quedar como:

```

agua
3
  1HOH      O    1  -0.000   0.198   0.002
  1HOH      H    2   0.097   0.196  -0.002
  1HOH      H    3  -0.028   0.146  -0.075
0.00000  0.00000  0.00000

```

Este archivo agua.gro modificado es el que vamos a utilizar para la construcción de la celda de agua.

2. Construcción de una celda de agua usando la herramienta genbox.

La herramienta genbox de gromacs, permite realizar tres cosas particulares:

- Generar una caja de solvente.
- Solvatar una configuración en particular de un soluto.
- Insertar un número de moléculas en posiciones aleatorias en una celda.

Abrimos un terminal en la carpeta que contiene el archivo agua.gro y ejecutamos el comando siguiente:

```
$ genbox -h
```

Este comando permite ejecutar la ayuda de la herramienta genbox con sus diferentes opciones. Hay tres comandos fundamentales en genbox que son: -cp , -ci y -cs. El comando -cp permite leer las moléculas de soluto, -ci permite insertar un conjunto de moléculas y -cs se utiliza para solvatar un soluto en particular.

Supongamos que deseamos construir una caja de dimensiones xyz iguales a $3 \times 3 \times 3 \text{ nm}^3$. Una molécula de agua tiene un volumen de 30 angstrom al cubo, entonces podemos colocar en la celda un total de 900 moléculas de agua de tal manera que la densidad sea igual a 1 g/cm^3 . Para ello, abrimos un terminal en la carpeta donde se encuentra el archivo agua.gro y escribimos el siguiente comando:

```
$ genbox -ci agua.gro -nmol 900 -box 3 3 3 -o aguabox.gro
```

Con esta línea de comando insertamos 900 moléculas de agua de manera aleatoria en una celda $3 \times 3 \times 3$. El archivo de salida ahora contiene 2700 átomos. En la figura 1, se observa como queda la celda de agua final.

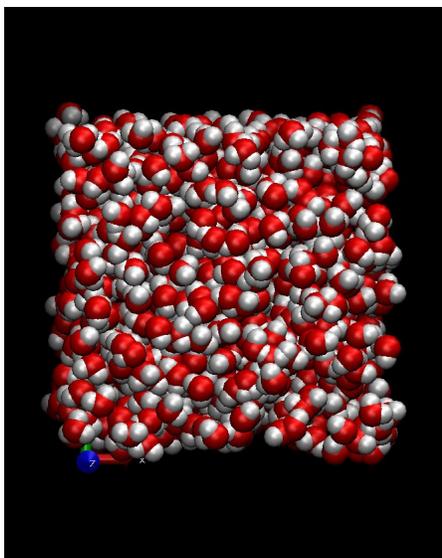


Figura 1: Caja de agua obtenida usando el comando -ci de la herramienta genbox. La imagen fue hecha con VMD.

Ahora, vamos a abrir el archivo agua.gro con el editor gedit y hacerle la siguiente modificación en las dimensiones de la celda:

```

agua
3
  1HOH      O    1  -0.000  0.198  0.002
  1HOH      H    2   0.097  0.196 -0.002
  1HOH      H    3  -0.028  0.146 -0.075
0.31000  0.31000  0.31000

```

En este caso, colocamos la molécula de agua en una caja con dimensiones $0.31 \times 0.31 \times 0.31 \text{ nm}^3$. Ahora usamos este archivo para utilizar la siguiente línea de comandos:

```
$ genbox -cs agua.gro -nmol 900 -box 3 3 3 -o aguabox.gro
```

En la figura 2, se muestra como queda la celda de agua.

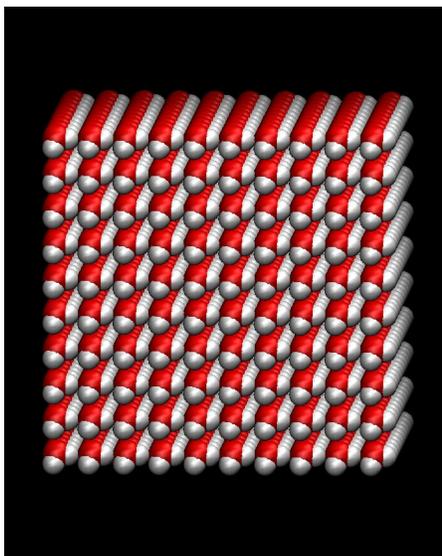


Figura 2: Caja de agua obtenida usando el comando `-cs` de la herramienta `genbox`. La imagen fue hecha con `VMD`.

A diferencia del comando `-ci`, este introduce 1000 moléculas de agua de manera ordenada en la celda. La densidad fue de 1.107 g/mL . El comando `-cp` no presta atención a la orden `-nmol`.

A continuación usaremos el comando `-cp` en la herramienta `genbox`. Para ello vamos a utilizar la siguiente línea de comando:

```
$ genbox -cp agua.gro -nmol 900 -box 3 3 3 -o aguabox.gro
```

El resultado que encontramos es que el comando `-cp` sólo introduce una sola molécula de agua dentro de la celda $3 \times 3 \times 3$. Esto se puede observar en la figura 3.

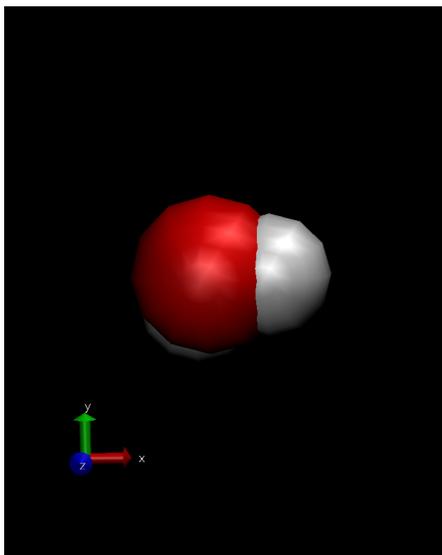


Figura 3: Caja de agua obtenida usando el comando `-cp` de la herramienta `genbox`. La imagen fue hecha con `VMD`.

Para el comando `-cp` tampoco es necesario indicar el número de moléculas a introducir.

3. Construcción de una capa de agua usando la herramienta `editconf`.

La herramienta `editconf` permite editar cualquier archivo de configuración de `gromacs` y modificar la celda usada.

En este caso, vamos a modificar la celda de agua para crear una capa de agua con espacio vacío a los extremos. Usaremos el archivo de configuración aleatoria `aguabox.gro` para construir una capa a lo largo del eje `z`. Usamos el siguiente grupo de comandos para ampliar la caja a $3 \times 3 \times 30$:

```
$ editconf -f aguabox.gro -box 3 3 30 -center 1.5 1.5 15 -o aguaboxcapa.gro
```

Con esta línea de comandos se coloca la caja de agua en el centro de la celda dejando un espacio vacío a ambos lados de la capa de agua. La figura 4, muestra la capa de agua en la celda.

Para garantizar que la capa de agua quede en el centro de la nueva celda, las dimensiones se dividen entre dos.

A su vez, podemos colocar la capa en el fondo de la celda usando la siguiente línea de comando:

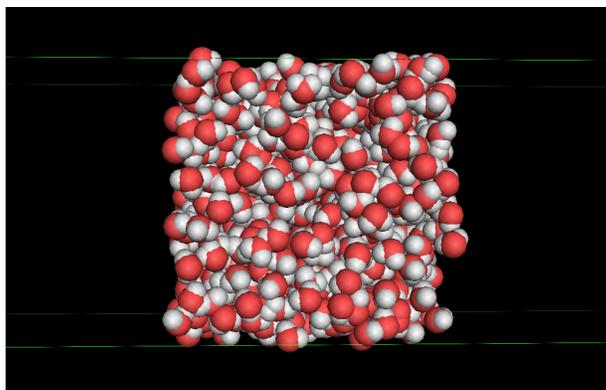


Figura 4: Caja de agua centrada en el medio de la celda usando la herramienta editconf. La imagen fue hecha con pymol.

```
$ editconf -f aguabox.gro -box 3 3 30 -center 1.5 1.5 1.5 -o aguaboxcapa.gro
```

Como la celda tiene dimensiones de 3 nm, la mitad de la capa de agua es 1.5 nm. En la figura 5, se muestra como queda la capa en la celda:

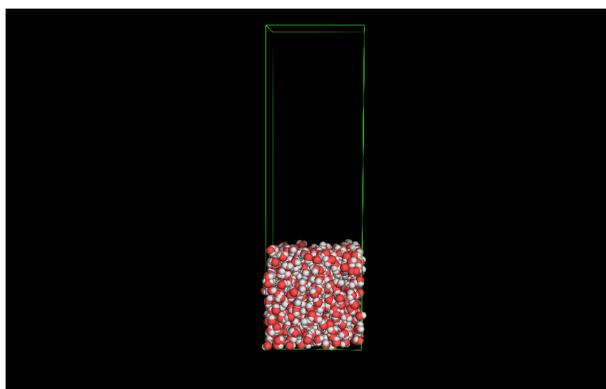


Figura 5: Caja de agua en el fondo de la celda usando la herramienta editconf. La imagen fue hecha con pymol.

3. Construcción de una caja de PEO solvatada con agua usando las herramientas genbox y editconf.

Usando Avogadro, dibujamos una molécula ejemplo de PEO. Esta molécula la guardamos en formato xyz y la convertimos en formato de gromacs usando el siguiente comando:

```
$ obabel peo.xyz -O peo.gro
```

La molécula usada en este ejemplo se muestra en la figura 6.

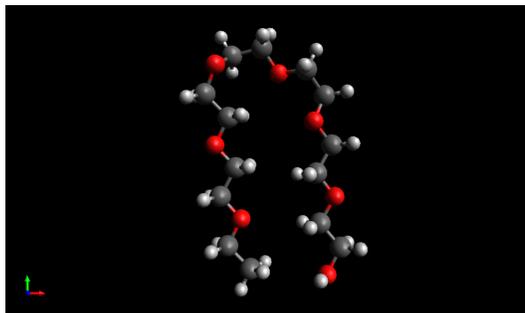


Figura 6: Molécula de PEO construída con el programa Avogadro.

Usando la herramienta editconf, vamos a colocar la molécula de peo en el centro de una caja de dimensiones $4 \times 4 \times 4 \text{ nm}^3$. Usemos la siguiente línea de comandos:

```
$ editconf -f peo.gro -box 4.0 4.0 4.0 -center 2.0 2.0 2.0 -o peobox.gro
```

En la figura 7, se muestra la molécula centrada en la celda.

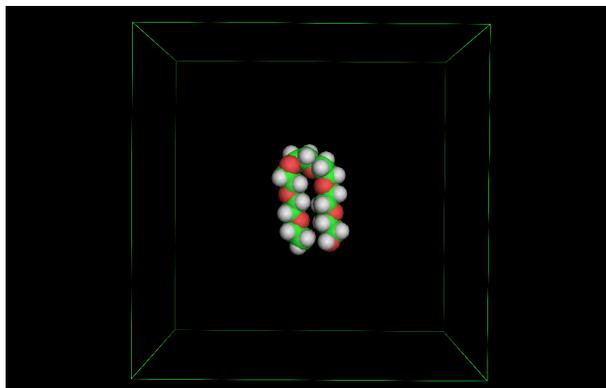


Figura 7: Molécula de peo centrada en la celda.

Para solvatar la molécula de peo usaremos el archivo aguabox.gro construído en este mismo tutorial. La siguiente línea de comando usando la herramienta genbox:

```
$ genbox -cp peobox.gro -cs aguabox.gro -o peosolvado.gro
```

El número de moléculas de agua adicionadas a la caja es igual a 1727 y la densidad final es 815.29 g/mL. Esto genera el siguiente archivo de configuración que se muestra en la figura 8.

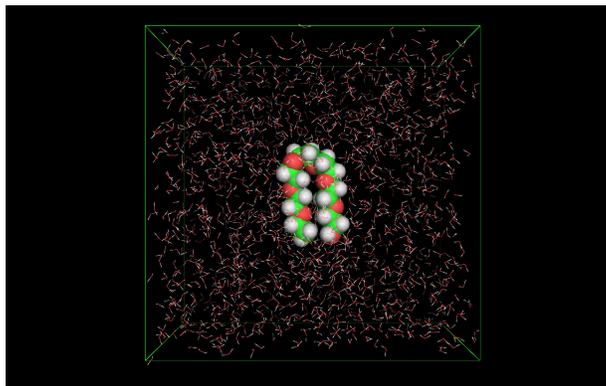


Figura 8: Molécula de peo solvatada con agua.

En este caso, la densidad está por debajo de la real esperada para el agua. Sin embargo, con un buen modelo de energía potencial y una dinámica tipo NPT se puede estimar la densidad del sistema.

Podemos colocar una capa de solvente alrededor del soluto usando el siguiente comando:

```
$ genbox -cp peobox.gro -cs aguabox.gro -shell 1 -o peosolvatado.gro
```

Este comando coloca una capa de agua alrededor de la molécula de soluto. El archivo peosolvatado.gro se muestra en la figura 9.

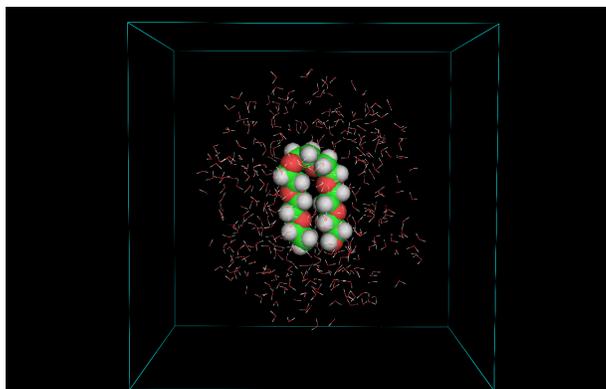


Figura 9: Molécula de peo solvatada con una capa de agua.

La densidad en la caja es más baja y a su vez eliminando la celda podemos utilizar este tipo de configuraciones para determinar la energía de solvatación de ciertas moléculas.

Las herramientas genbox y editconf tienen muchas utilidades para construir sistemas iniciales que pueden ser simulados usando la técnica de dinámica molecular.