

Paquetes auxiliares para el uso del programa Gromacs 4.5.4.

José G. Parra F.

14 de Abril del 2014

Uno de los problemas más básicos que se presenta para usar gromacs, es la construcción de configuraciones de partida para realizar las simulaciones. Para ello es necesario el uso de algunos programas de construcción de geometrías moleculares y de conversión de coordenadas xyz y pdb a coordenadas tipo *.gro. A continuación, se mostrarán algunos programas que utilizamos en el laboratorio de química computacional de la Universidad de Carabobo para trabajar con Gromacs.

1. El programa Avogadro.

Este es un programa libre, que permite construir sistemas moleculares simples que pueden ser optimizados usando diferentes modelos de energía potencial. A su vez, permite construir entradas para realizar cálculos en programas de química cuántica como Gamess-US y Gaussian. El programa puede ser bajado en sus versiones de windows y linux de la siguiente página web: <http://avogadro.openmolecules.net/>

La instalación del programa es un poco compleja y requiere de diferentes programas antes de ser instalado. En Ubuntu, puede ser instalado usando el ubuntu software center. En windows es mucho más fácil la instalación pero siempre se recomienda trabajar en linux por el uso de gromacs.

Con este programa, se pueden construir las moléculas a utilizar en la simulación las cuales pueden ser guardadas en los formatos xyz ó pdb. A continuación, se muestra un dimero de agua diseñado usando el programa avogadro y la data del mismo en formato xyz y pdb:

El formato *.xyz del sistema agua es el siguiente:

6

O	0.04800	3.00693	0.09720
H	0.96887	3.27341	-0.03942
H	0.12955	2.02787	0.12741
O	0.43736	0.27940	0.21929
H	0.92530	-0.45444	-0.19080
H	-0.25567	-0.17975	0.72560

El formato *.pdb elaborado con Avogadro es el siguiente:

```
COMPND      Agua
AUTHOR      GENERATED BY OPEN BABEL 2.3.2
HETATM      1  O   HOH      1      0.048  3.007  0.097  1.00  0.00      O
HETATM      2  H   HOH      0      0.969  3.273 -0.039  1.00  0.00      H
HETATM      3  H   HOH      0      0.130  2.028  0.127  1.00  0.00      H
HETATM      4  O   HOH      2      0.437  0.279  0.219  1.00  0.00      O
HETATM      5  H   HOH      0      0.925 -0.454 -0.191  1.00  0.00      H
HETATM      6  H   HOH      0     -0.256 -0.180  0.726  1.00  0.00      H
CONNECT     1    2    3
CONNECT     2    1
CONNECT     3    1
CONNECT     4    5    6
CONNECT     5    4
CONNECT     6    4
MASTER           0    0    0    0    0    0    0    0    0    6    0    6    0
END
```

Se puede ver en este caso como Avogadro usa Openbabel 2.3.2 para la construcción de los sistemas moleculares simples en cuanto al formato de las coordenadas. En el formato pdb, se muestra la conectividad de los átomos en la molécula y el tipo de molécula según el force field utilizado. En cambio, en el formato xyz se observa solamente las coordenadas cartesianas de los átomos.

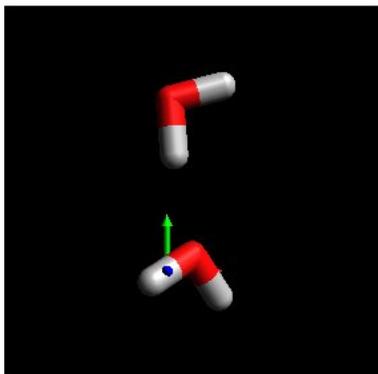


Figura 1: Moléculas de agua elaboradas con el programa Avogadro.

2. El programa Openbabel.

Este es un programa que permite la conversión de un formato a otro de diferentes geometrías moleculares. En nuestro caso es utilizado para convertir las coordenadas de una molécula que están en formato xyz o pdb al formato que usa gromacs que es el *.gro.

El programa puede ser bajado de la página web: <http://openbabel.org/>. En windows puede ser instalado automáticamente. Sin embargo, en linux se requieren de los siguientes paquetes y librerías para su instalación:

- cmake, versión 2.6 en adelante.
- Un compilador C++, versión más actualizada.
- wxWidgets 2.8. es requerido para la instalación de openbabel.gui.
- libxml2, zlib, Eigen versión 2 y libcairo2-dev.

Para realizar una instalación y esperando no tener problemas, se puede hacer de la siguiente forma en un terminal:

```
$ tar xzf openbabel-2.3.2.tar.gz # (Esto crea openbabel-2.3.2)
```

```
$ mkdir build
```

```
$ cd build
```

```
$ cmake ../openbabel-2.3.2
```

```
$ make
```

Luego como root:

```
$ make install
```

Luego con el programa bien instalado, en un terminal se puede proceder con el comando `obgui` para utilizar la interfaz gráfica de openbabel.

Desde un terminal también se puede hacer la conversión a otro formato usando el siguiente comando:

```
$ babel dimeroagua.xyz -O dimeroagua.gro
```

En este comando estamos llevando del formato `*.xyz` al formato `*.gro`. La estructura del formato de gromacs es la siguiente y así debe quedar:

```
dimeroagua.xyz
```

```
6
```

```
1HOH      O      1      0.005      0.301      0.010
1HOH      H      2      0.097      0.327     -0.004
1HOH      H      3      0.013      0.203      0.013
2HOH      O      4      0.044      0.028      0.022
2HOH      H      5      0.093     -0.045     -0.019
2HOH      H      6     -0.026     -0.018      0.073
0.00000    0.00000    0.00000
```

En este archivo se indica que hay dos moléculas de agua con el nombre HOH, un total de 6 átomos y las coordenadas de la celda xyz iguales a cero.

3. El programa de visualización VMD (Visualization Molecular Dynamics).

Este es un programa diseñado para analizar sistemas biológicos como proteínas, ácidos nucleicos y membranas lipídicas. También puede ser usado para visualizar muchas moléculas en general.

Este programa puede ser bajado de la siguiente página web:

<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>.

El usuario debe registrarse previamente para bajar el código fuente del programa. En el caso de gromacs, permite visualizar los archivos *.gro y leer las trayectorias de una simulación para tener una idea de como queda la configuración espacial en el tiempo de simulación.

La instalación es muy simple y es como sigue:

```
$ tar xzf vmd-1.9.1.tar.gz
```

Cambiarse a la carpeta vmd-1.9.1, abrir un terminal y proceder con:

```
$ ./configure
```

```
$ cd scr
```

```
$ make install
```

Este programa es muy útil para verificar las configuraciones iniciales que se van a simular en gromacs. Adicionalmente, se recomienda usar el programa pymol para las visualizaciones de los archivos de gromacs.