

FORMAT FILE CONVERTER → PDB TO PQR

El programa FFC-PDBtoPQR está diseñado para, a partir de dos archivos, uno tipo .pdb y otro tipo .rtf, generar un archivo tipo .pqr. Esta utilidad se aplica sobre todo a la hora de calcular potenciales electrostáticos: muchos programas requieren como “input” un archivo de tipo .pqr. Los archivos de tipo .pqr son bastante similares a los de tipo .pdb; la única diferencia, es que los primeros presentan dos columnas, con información relativa a la carga y el radio de cada átomo, mientras que los segundos dedican ese espacio a mostrar la ocupancia y los factores B de cada átomo. Una vez conocido el radio atómico de cada tipo atómico, las cargas respectivas (siendo esta última información proporcionada por el archivo de tipo .rtf), y empleando las herramientas de programación adecuadas, se puede preparar un pequeño código que funcione relativamente bien a la hora de generar archivos .pqr. Este es el propósito del programa mencionado.

FFC-PDBtoPQR cuenta con tres versiones: una versión original, escrita en Perl; y dos versiones compiladas: una, directamente ejecutable en Linux, y otra, directamente ejecutable en Windows. La versión original requiere tener Perl instalado en el ordenador para poder ser ejecutada; la versión de Perl a instalar debe ser posterior a Perl 5.14 (no se recomienda instalar Perl 6). Una vez instalado, su ejecución tan solo requiere escribir lo siguiente en la consola de comandos/terminal:

```
perl FFC-PDBtoPQR.pl molecula.pdb molecula.rtf molecula.pqr
```

Sustituyendo “molecula” por el nombre adecuado. Los archivos molecula.pdb y molecula.rtf deben existir previamente en el directorio donde se encuentre el programa, y deben contener su información en el formato adecuado, coherente con su extensión. Si esto no fuese así, la ejecución del programa daría lugar a resultados anómalos. Por otro lado, el archivo molecula.pqr no tiene por qué existir: será creado durante la ejecución. En el caso de existir un archivo .pqr con el mismo nombre previo a la ejecución, será reescrito.

En el caso de las versiones compiladas, su ejecución es todavía más sencilla. De nuevo, tan solo es necesario recordar que los archivos .pdb y .rtf deben existir y estar presentes en el directorio de trabajo, donde también debe encontrarse el programa. Se ejecutan de la siguiente manera:

```
FFC-PDBtoPQR.exe molecula.pdb molecula.rtf molecula.pqr (“cmd” de Windows)
```

```
./FFC-PDBtoPQR molecula.pdb molecula.rtf molecula.pqr (terminal de Linux)
```

El programa cuenta con un control de errores rudimentario, que emite avisos en caso de que alguna extensión sea incorrecta. Si se ejecuta el programa sin el número adecuado de argumentos (los tres archivos correspondientes), el programa emitirá un mensaje de ayuda, mostrando la manera correcta de ejecutarlo. Merece la pena mencionar que el orden en que se escriben los archivos no es importante: pueden escribirse en el orden que se desee, ya que el propio programa reconoce la extensión de los archivos, independientemente del lugar que ocupe.

CARGAS

Las cargas escritas en el archivo .pqr proceden del archivo .rtf proporcionado. No se produce ningún cálculo interno; el programa simplemente se limita a leer la carga de cada línea que empiece por “ATOM”, y se la asigna a la línea correspondiente del archivo .pqr que empiece por “ATOM” o por “HETATM”, de tal manera que se respete la relación entre las cargas y los átomos que las poseen.

RADIOS ATÓMICOS

Los radios atómicos son generados a partir de una amplia colección de radios guardados. Este programa tampoco realiza cálculos respecto al radio atómico; tan solo utiliza el archivo .rtf para reconocer los tipos atómicos, y asigna un radio en función del tipo atómico reconocido.

Los tipos atómicos reconocidos por el programa son aquellos asociados al campo de fuerzas MMFF94 (Merck Molecular Force Field), cuya nomenclatura para tipos atómicos es la utilizada por el servidor SwissParam (<http://www.swissparam.ch/>). SwissParam utiliza tanto MMFF como CHARMM (Chemistry at HARvard Macromolecular Mechanics) para realizar los cálculos de parámetros tales como la carga o las fuerzas de Van der Waals. Dichos tipos atómicos pueden ser encontrados en la página: <http://towhee.sourceforge.net/forcefields/mmff94.html>. En la versión actual del programa tan solo se consideran 10 tipos atómicos: 3 tipos de carbonos (carbonos con hibridación sp³, carbonos con hibridación sp² y al menos 1 hidrógeno enlazado, y carbonos con hibridación sp² y ningún hidrógeno enlazado), 2 tipos de oxígenos (oxígenos con hibridación sp³, y oxígenos con hibridación sp²), 2 tipos de hidrógenos (hidrógenos enlazados a carbonos, e hidrógenos enlazados a otros tipos atómicos), 1 tipo de nitrógeno, 1 tipo de azufre, y 1 tipo de fósforo. Los radios atómicos asociados a cada uno de los 10 tipos atómicos son los siguientes:

- Carbonos sp³ → 2.175 Å
- Carbonos sp² con H → 2 Å
- Carbonos sp² sin H → 1.9924 Å
- Oxígenos sp³ → 1.77 Å
- Oxígenos sp² → 1.7 Å
- Hidrógenos enlazados a C → 1.35 Å
- Hidrógenos enlazados a O/S/P → 0.2245 Å
- Nitrógenos → 1.85 Å
- Fósforos → 2.15 Å
- Azufres → 2 Å

En versiones posteriores, se aumentarán los tipos atómicos, incluyendo los aniones de halógenos, y los cationes metálicos (tan solo aquellos de mayor relevancia en bioquímica). De manera adicional, en versiones posteriores se mostrará, en forma de comentario en el propio código, la información relativa a cada tipo atómico. De esta manera, se evitará la necesidad de tener que consultarla en la página proporcionada, pudiendo acceder a ella con tan solo mirar el código.