

RETURN TO ISSUE | APPLICATION NOTE | NEXT >

MCPB.py: A Python Based Metal Center Parameter Builder

Pengfei Li and Kenneth M. Merz, Jr.*

View Author Information ▾

Cite this: *J. Chem. Inf. Model.* 2016, 56, 4, 599–604

Publication Date: February 25, 2016 ▾

<https://doi.org/10.1021/acs.jcim.5b00674>

Copyright © 2016 American Chemical Society

[RIGHTS & PERMISSIONS](#)

Article Views

7067

Altmetric

10

Citations

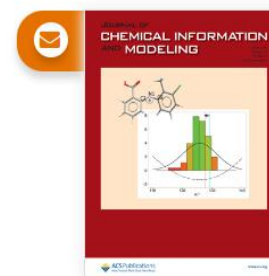
236

[LEARN ABOUT THESE METRICS](#)

Share

Add to

Export

Journal of Chemical
Information and
Modeling

Read Online

PDF (1 MB)

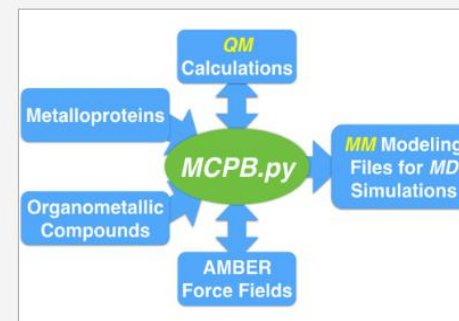
SI

Supporting Info (2) »

SUBJECTS: Ions, Metals, Molecular mechanics, Peptides and proteins, Software

Abstract

MCPB.py, a python based metal center parameter builder, has been developed to build force fields for the simulation of metal complexes employing the bonded model approach. It has an optimized code structure, with far fewer required steps than the previous developed MCPB program. It supports various AMBER force fields and more than 80 metal ions. A series of parametrization schemes to derive force constants and charge parameters are available within the program. We give two examples (one metalloprotein example and one organometallic compound example), indicating the program's ability to build reliable force fields for different metal ion containing complexes. The original version was released with AmberTools15. It is provided via the GNU General Public License v3.0 (GNU_GPL_v3) agreement and is free to download and distribute. MCPB.py provides a bridge between quantum mechanical calculations and molecular dynamics simulation software packages thereby enabling the modeling of metal ion centers. It offers an entry into simulating metal ions in a number of situations by providing an efficient way for researchers to handle the vagaries and difficulties associated with metal ion modeling.



H																	He														
Li	Be											B	C	N	O	F	Ne														
Na	Mg											Al	Si	P	S	Cl	Ar														
K	Ca	Sc	Ti	V	Cr	Mn	Fe	Co	Ni	Cu	Zn	Ga	Ge	As	Se	Br	Kr														
Rb	Sr	Y	Zr	Nb	Mo	Tc	Ru	Rh	Pd	Ag	Cd	In	Sn	Sb	Te	I	Xe														
Cs	Ba	La	Hf	Ta	W	Re	Os	Ir	Pt	Au	Hg	Tl	Pb	Bi	Po	At	Rn														
Fr	Ra	Ac																													
																		Ce	Pr	Nd	Pm	Sm	Eu	Gd	Tb	Dy	Ho	Er	Tm	Yb	Lu
																		Th	Pa	U	Np	Pu	Am	Cm	Bk	Cf	Es	Fm	Md	No	Lr

Figure 3. Metal ions currently supported by the MCPB.py program. The metals with a blue background use the VDW parameters from Li et al.,^{6,39,40} whereas the metals with a green background use the VDW parameters adapted from UFF.⁴¹

Software yang dibutuhkan

- 1) *AmberTools versi 2022*
- 2) *Anaconda*
- 3) *Gromacs 2022.2*

1. Proses Ekstraksi File Hasil Simulasi

- a. Ketikkan perintah di terminal:

```
gmx trjconv -s md.tpr -f md.xtc -o md_center.xtc -center -pbc mol -ur compact
```

- b. Selanjutnya tekan angka "1" untuk memilih "protein" sebagai center dan

- c. tekan angka "0" untuk memilih "system" sebagai output

- d. Untuk melakukan ekstraksi file berdasarkan tiap ns (nanosecond). Contoh untuk mengekstrak frame pertama ($t = 1$ ns) dari lintasan gunakan trjconv -dump dengan lintasan terbaru seperti dibawah ini:

```
gmx trjconv -s md.tpr -f md_center.xtc -o start1ns.pdb -dump 1000
```

Selanjutnya tekan angka nol

0

- e. Untuk visualisasi yang lebih halus, dapat dilakukan pemasangan parameter rotasi dan translasi. Jalankan perintah ini di terminal:

```
gmx trjconv -s md.tpr -f md.xtc -o md.xtc -fit rot+trans
```

pilih "Backbone"

4

Selanjutnya pilih "System"

0

Analisis Hasil RMSD

- a. Penyiapan file trajectory untuk analisis:

```
gmx trjconv -s md.tpr -f md.xtc -o analisis.xtc -pbc mol -ur compact
```

- b. Pilih "System" dengan cara ketik perintah angka (nol) diterminal:

0

- c. Analisis RMSD sistem:

```
gmx rms -s md.tpr -f analisis.xtc -o rmsd.svg -tu ns
```

a. Ketik angka empat pada terminal untuk memilih “Backbone”:

4

e. Selanjutnya ketik angka empat, pilih “Backbone” lagi

4

f. Visualisasi dengan menggunakan grace dengan mengetikkan perintah ini di terminal:

xmgrace rmsd.xvg

Jika ingin memvisualisasikan RMSD Protein-Ligand yaitu dengan

gmx rms -s md.tpr -f analisis.xtc -o rmsd_pro_lig.xvg -tu ns

b. Ketik angka empat pada terminal untuk memilih “Protein”:

1

f. Selanjutnya ketik angka empat, pilih ligand “MSI”

Visualisasi dengan menggunakan grace dengan mengetikkan perintah ini di terminal:

xmgrace rmsd_pro_lig.xvg

17

untuk metal ion

gmx rms -s md.tpr -f analisis.xtc -o rmsd_pro_metal.xvg -tu ns

c. Ketik angka empat pada terminal untuk memilih “Protein”:

1

g. Selanjutnya ketik angka empat, pilih ligand “ZN1”

16

Jalankan perintah berikut

xmgrace rmsd_pro_metal.xvg

6. Analisis Hasil RMSF

a. Analisis RMSF sistem tiap Atom:

gmx rmsf -s md.tpr -f analisis.xtc -o rmsf_atom.svg

b. Ketik angka empat pada terminal untuk memilih “Backbone”:

4

c. Visualisasi dengan menggunakan grace dengan mengetikkan perintah ini di terminal:

xm grace rmsf_atom.svg

d. Analisis RMSF sistem tiap Residu:

gmx rmsf -s md.tpr -f analisis.xtc -res -o rmsf_rec.svg

e. Ketik perintah di terminal untuk memilih “Backbone”:

4

f. Visualisasi dengan menggunakan grace dengan mengetikkan perintah ini di terminal:

xm grace rmsf_rec.svg