

使用 MolAICal 计算纳米管和蛋白质孔道半径的教程

作者：MolAICal（update 2020-07-10）

更多教程（含英文教程）请见如下：

MolAICal 官方主页：<https://molaical.github.io>

MolAICal 文章介绍：<https://doi.org/10.1093/bib/bbaa161>

MolAICal 中文博客：<https://molaical.github.io/cntutorial.html>

MolAICal blogspot：<https://qblab.blogspot.com>

1. 简介

本教程介绍使用 MolAICal 计算纳米管和蛋白质半径的方法。共分为三个部分：纳米管半径计算，蛋白质孔道半径计算和肽通道半径的计算。最后一个教程是肽通道半径的测量，如果你熟悉 VMD 和 NAMD，可以使用由 CHARMM 力场产生的 PDB 和 PSF 文件来测量肽通道的半径，当然也可以只使用肽段的 PDB 文件进行肽通道半径的测量。

2. 工具

2.1. 所需软件下载地址

1) MolAICal: <https://molaical.github.io>

2) VMD: <https://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd>

2.2. 操作示例文件

所有用到的操作教程文件均可在下面的网站下载：

<https://github.com/MolAICal/tutorials/tree/master/005-radiiCal>

3. 操作流程

3.1. 纳米管半径计算

1) 在 VMD 软件中构建纳米管：Extensions→Modeling→Nanotube Builder (如图 1)。

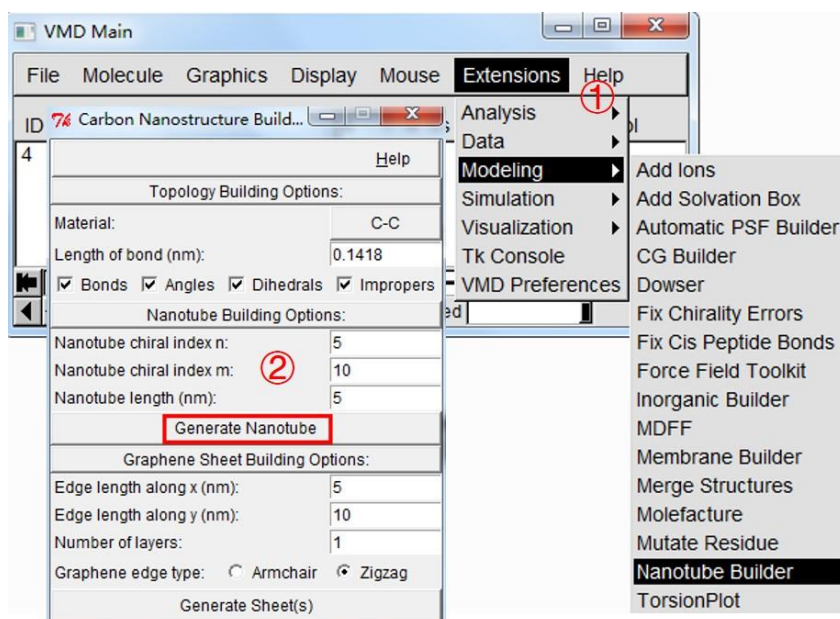


图 1. 构建纳米管

2) 使用类似图 1 的方法打开 VMD Tk Console: Extensions→Tk Console。在 Tk Console 中使用 cd 命令切换到含有文件“nanotube.pdb”和“parameter.dat”的目录，例如：

```
#> cd d:/005-radiiCal/nanotube
```

3) 使用如下命令在 Tk Console 中保存生成的纳米管文件，并命名为“nanotube.pdb”

```
#> set all [atomselect top all]
```

```
#> $all writpdb nanotube.pdb
```

4) 选择已构建纳米管内的任意点。你可以在纳米管孔道内表面选择 2 个不同的原子，然后将这两个原子的连线中心作为“cpoint”。在本教程中，选择的点坐标为-0.2015 0.4185 30.147。打开“005-radiiCal\nanotube”文件夹中的“parameter.dat”，将以上所选点坐标添加到“cpoint”。然后按下文所示修改“vector”参数：

```
-----
cpoint      -0.2015 0.4185 30.147
vector      0.00 0.00 1.00
-----
```

“0.00 0.00 1.00”表示沿着 Z 轴方向的半径测量。“0.00 1.00 0.00”表示沿着 Y 轴方向的半径测量。“1.00 0.00 0.00”表示沿着 X 轴方向的半径测量。通道可大致沿任意轴方向放置，即和 vector 的方向大致一致。

5) 在 Windows DOS 或 Linux console 中运行如下命令计算半径：

```
#> molaical.exe -channel radii -cpp parameter.dat
```

命令运行会生成“channel_radii.dat”，“dot.vmd_plot”和“surf.vmd_plot”文件。“dot.vmd_plot”和“surf.vmd_plot”可通过 VMD 软件展示通道表层。类似图 1 的方式打开 VMD Tk Console：Extensions→Tk Console。然后运行以下命令：

```
#> source dot.vmd_plot
```

本教程省略了纳米管卡通图的做法，你可以根据自己的偏好自行设置。你将看到如图 2 所示的通道点曲面：

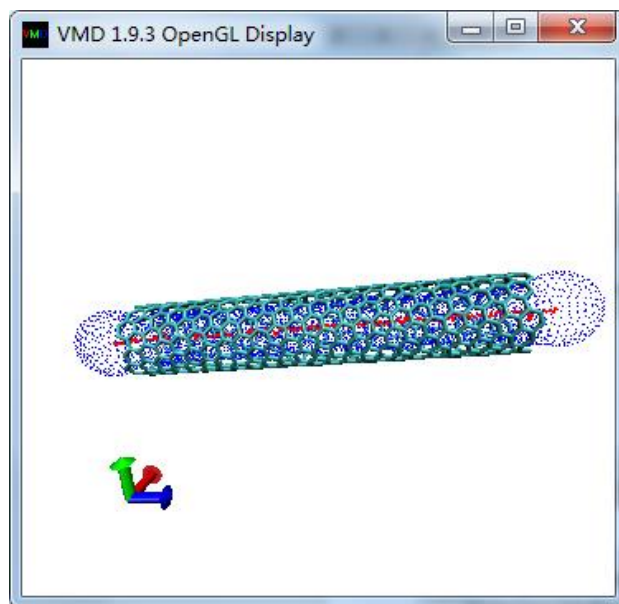


图 2. 纳米管通道表面

文件“channel_radii.dat”包含了反应坐标和半径值。文件“channel_radii.dat”中的第一列是反应坐标，第二列是半径值。可以使用 OriginLab, Microsoft Excel 等工具将其绘制成图。绘制结果如图 3 所示：

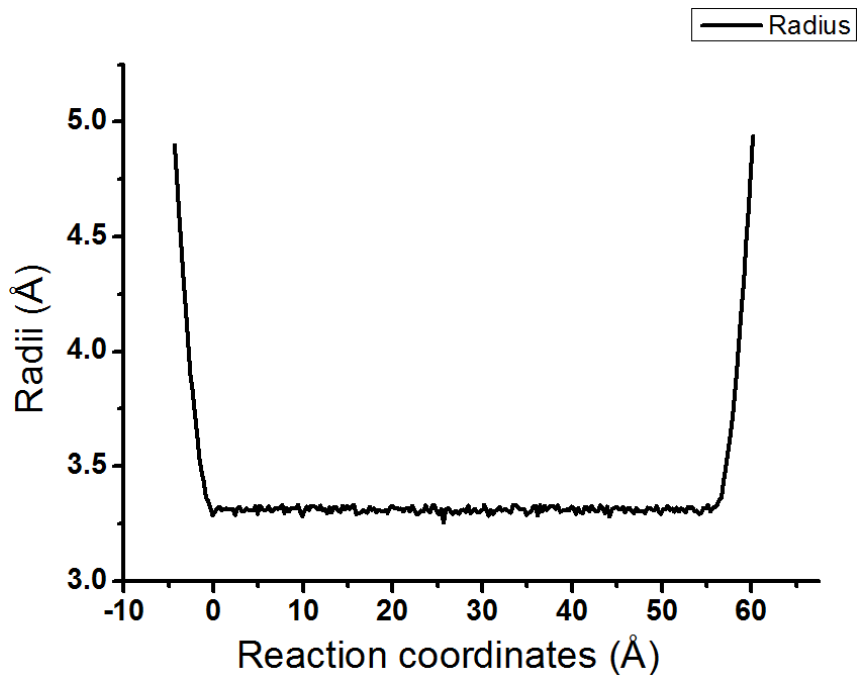


图 3. 半径对反应坐标作图结果

3.2. 蛋白孔道半径计算

转至教程所在目录下：

```
#> cd 005-radiiCal/KcsA
```

在蛋白通道中选择任意点，然后在参数文件“parameter.dat”中，将参数“cpoint”设置成为所选点的坐标。按照下文所示设置参数“cpoint”和 “vector”：

```
-----  
cpoint    0.001    0.006    1.927  
vector    0.00 0.00 1.00  
-----
```

“0.00 0.00 1.00”表示沿着 Z 轴方向的半径测量。“0.00 1.00 0.00”表示沿着 Y 轴方向的半径测量。“1.00 0.00 0.00”表示沿着 X 轴方向的半径测量。通道可大致沿任意轴方向放置，即和 vector 的方向大致一致。

1) 在 Windows DOS 或 Linux console 中运行如下命令计算半径：

```
#> molaical.exe -channel radii -cpp parameter.dat
```

2) 本运算也会生成“channel_radii.dat”，“dot.vmd_plot”和 “surf.vmd_plot”文件。类似图 1 的方式打开 VMD Tk Console：Extensions→Tk Console。然后运行以下命令：

```
#> mol load pdb KcsA.pdb
```

```
#> source dot.vmd_plot
```

本教程省略了蛋白卡通图的做法，你可以根据自己的偏好自行设置。你将看到图 4 所示点曲面：

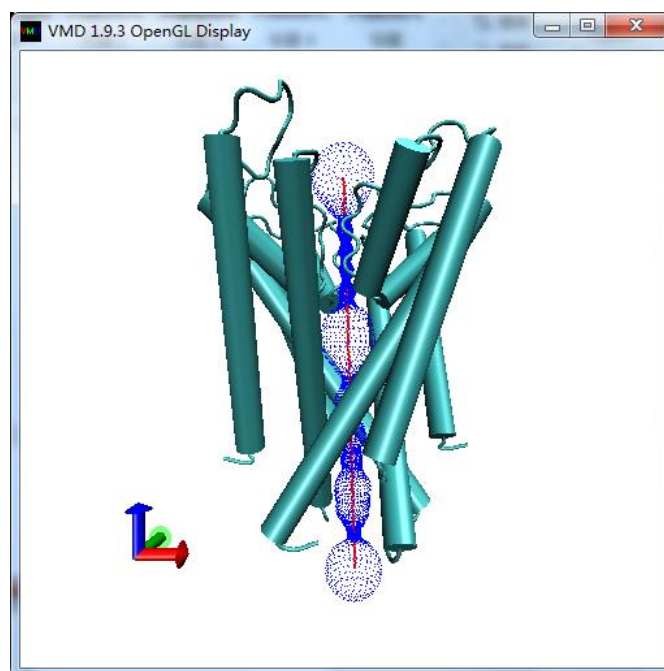


图 4. 蛋白通道的点曲面

文件 “channel_radii.dat” 包含了反应坐标和半径值。文件“channel_radii.dat”中的第一列是反应坐标，第二列是半径值。可以使用 OriginLab, Microsoft Excel 等工具将其绘制成图。半径绘制如图 5 所示：

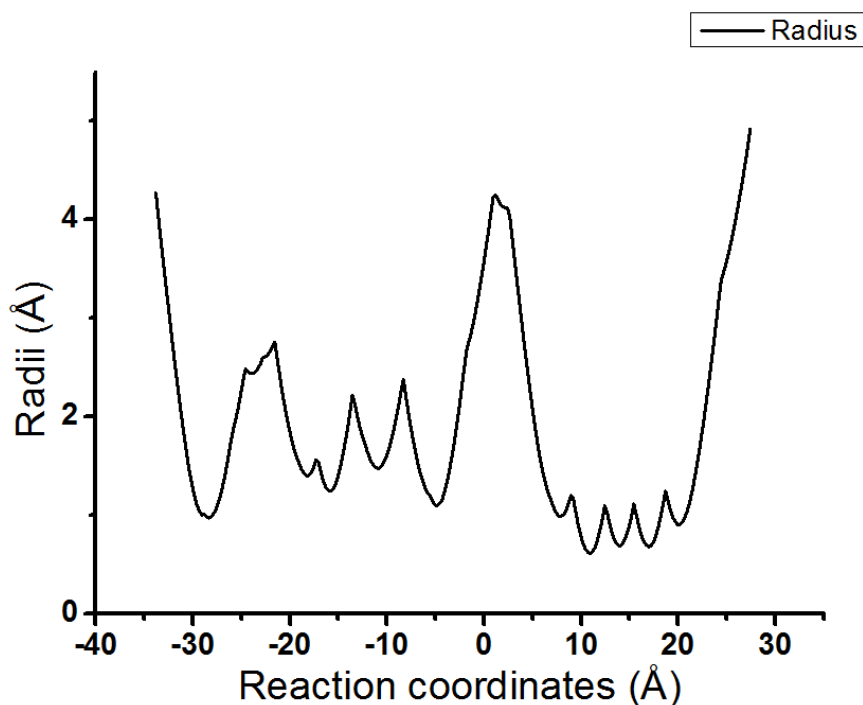


图 5. 半径对反应坐标作图结果

注意事项：文件“parameter.dat”中的参数“conpar”是一个控制参数，参数“conpar”的默认值是 0.15，其数值的增加可以提升随机测量的概率。在这种情况下，有可能出现一些奇怪的测量路线。如果你的蛋白孔道比较规则且大致沿着 X, Y, Z 轴的某一个方向，你可以减少参数“conpar”的数值，比如设置成 0.04，但是参数“conpar”不能设置成 0，这样你就能得到较为规整的测量通道。

3.3. 半径计算的高级教程

本部分示例利用由 CHARMM 力场产生的 PDB 和 PSF 文件计算多肽孔道半径。转至教程所在目录：

```
#> cd 005-radiiCal/GramicidinA
```

选择多肽孔道中的任意点。将参数“cpoint”设置为所选任意点的坐标。按照下文所示设置参数“pdbpath”，“psfpath”，“cpoint”和“vector”：

```
-----
pdbpath    1JNO.pdb
psfpath    1JNO.psf
cpoint     0.1625 -0.629 -1.838
vector     0.00 0.00 1.00
-----
```

“0.00 0.00 1.00”表示沿着 Z 轴方向的半径测量。“0.00 1.00 0.00”表示沿着 Y 轴方向的半径测量。“1.00 0.00 0.00”表示沿着 X 轴方向的半径测量。通道应大致沿任意轴方向放置，即和 vector 的方向大致一致。

1) 在 Windows DOS 或 Linux console 中运行如下命令计算半径：

```
#> molaical.exe -channel radii -cpp parameter.dat -fc charmm
```

2) 本次运算也会生成 “channel_radii.dat”, “dot.vmd_plot” 和 “surf.vmd_plot” 文件。类似图 1 的方式打开 VMD Tk Console : Extensions→Tk Console。运行以下命令:

```
#> mol load pdb 1JNO.pdb
```

```
#> source surf.vmd_plot
```

本教程省略了多肽卡通图的做法, 你可以根据自己的偏好自行设置。你将看到图 6 所示多肽通道 (如图 6 所示):

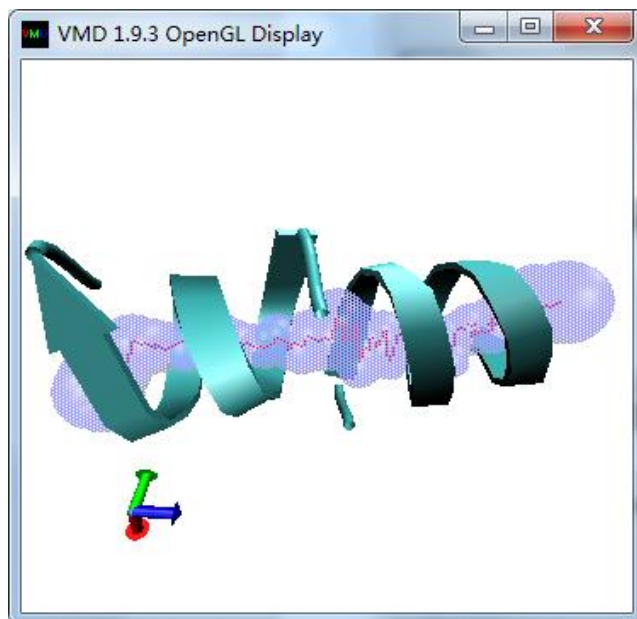


图 6. 多肽通道

文件 “channel_radii.dat” 包含了反应坐标和半径值。文件 “channel_radii.dat” 中的第一列是反应坐标, 第二列是半径值。可以使用 OriginLab, Microsoft Excel 等工具将其绘制成图。半径绘制如图 7 所示:

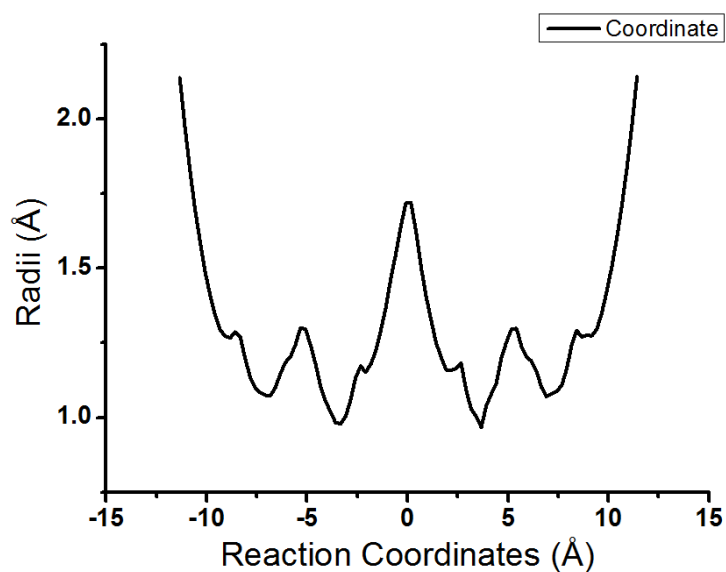


图 7. 半径对反应坐标作图结果