

Normal-Coordinate Structural Decomposition Engine

Por/by Dr. Arkaitz Fidalgo Marijuan*

¿Te interesa la bioinorgánica estructural o eres un apasionado de la química inorgánica macromolecular? Si es así, quizás te interese el portal web del *Normal-Coordinate Structural Decomposition Engine (NSD engine)*. Este portal, que fue desarrollado hace algunos años por L. Sun y J. A. Shelnut (del Pacific Northwest National Laboratory y del Sandia National Laboratories, respectivamente, ambos de EE.UU.) dispone de una valiosa herramienta para calcular la distorsión de cualquier macrociclo porfirínico.

La importancia biológica de las estructuras porfirínicas no planares propició el desarrollo de esta herramienta, que permite clasificar las distorsiones del macrociclo en seis tipos: saddle (*sad*, B_{2u}), ruffle (*ruf*, B_{1u}), dome (*dom*, A_{2u}), wavy(x) (*wav(x)*, $E_{g(x)}$), wavy(y) (*wav(y)*, $E_{g(y)}$) y propeller (*pro*, A_{1u}) (figura 1). Además, debido a que la distorsión que presenta la porfirina está directamente relacionada con el ion metálico del interior, así como con los sustituyentes de las posiciones meso del anillo, es posible establecer relaciones entre la distorsión y diferentes parámetros estructurales.

Uno de los aspectos más importantes para trabajar con el programa es el tipo de archivo de entrada, que debe ser una lista de coordenadas atómicas en formato PDB (The Protein Data Bank). Si solo se dispone de un archivo CIF (Crystallographic Information File) es posible convertirlo a PDB usando un sencillo programa para la

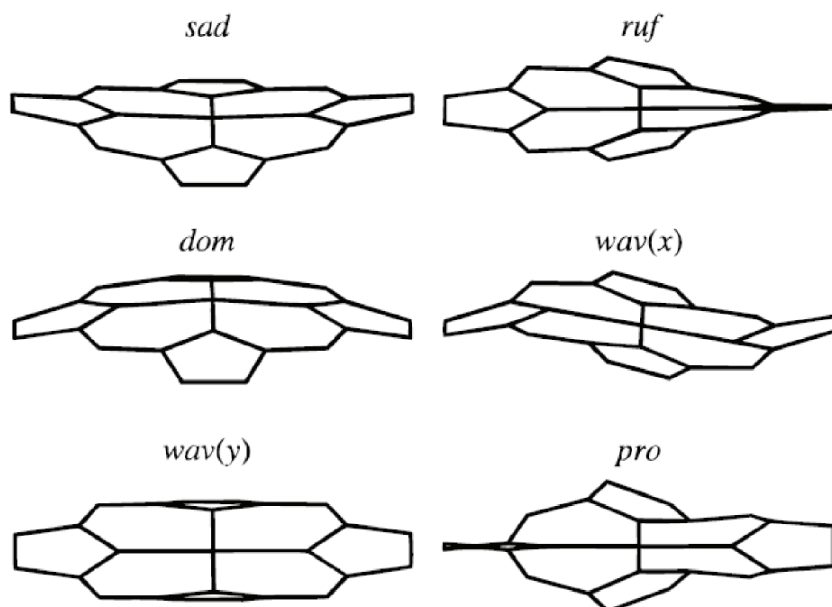


Figura 1. Ilustración de cada una de las deformaciones utilizadas para describir las distorsiones no planares de las porfirinas. Imagen modificada con permiso de Jentzen, W.; Song, X.-Z. y Shelnut, J. A.: Structural Characterization of Synthetic and Protein-Bound Porphyrins in Terms of the Lowest-Frequency Normal Coordinates of the Macrocycle. *J. Phys. Chem. B*, 1997, 101(9), 1684-1699. © 1997 American Chemical Society.

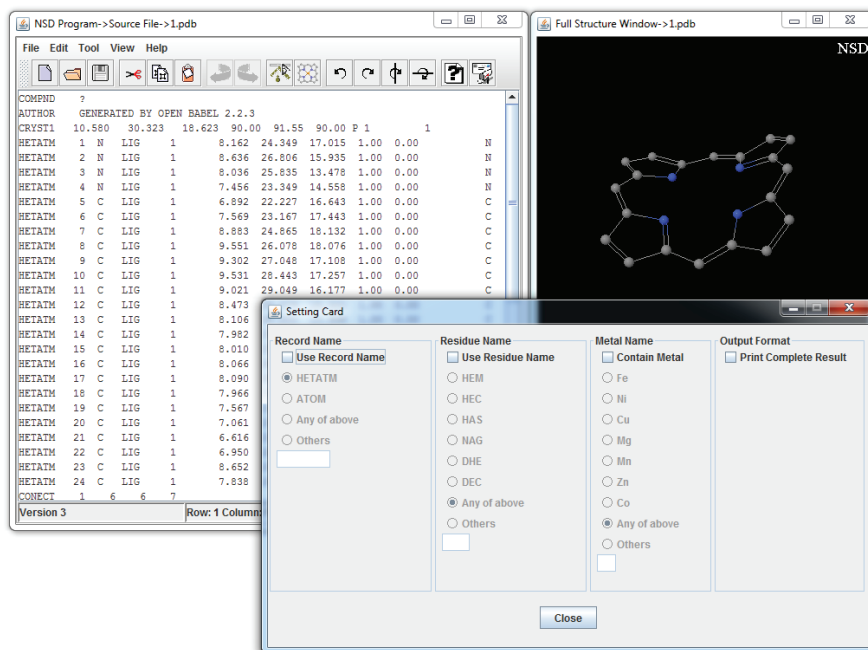


Figura 2. Vista del programa una vez hemos subido nuestro archivo PDB, donde se observan los ajustes de la *Setting Card* del menú Tool para anillos porfirínicos sin metal.

* Dpto. Mineralogía y Petrología
Facultad de Ciencia y Tecnología
Universidad del País Vasco
Euskal Herriko Unibertsitatea
Leioa, España
(e-mail: arkaitz.fidalgo@ehu.es)

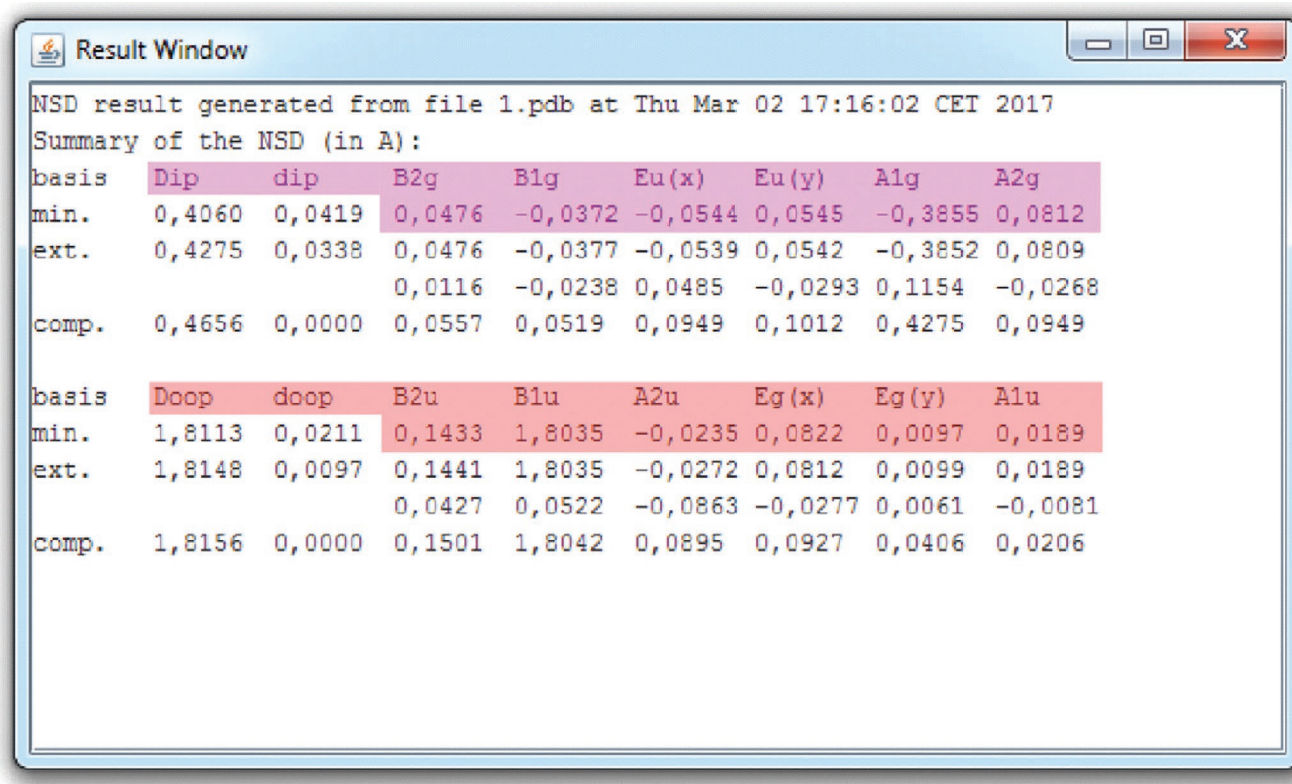


Figura 3. Ventana de resultados donde se observan los valores de la distorsión en el plano (morado) y fuera del plano (rojo).

conversión de archivos cristalográficos como el OpenBabelGUI (*poner este link en el programa <https://openbabel.org/wiki/OpenBabelGUI>*).

Pero es importante que el PDB únicamente contenga las coordenadas de los 4 átomos de nitrógeno y 20 de carbono de la porfirina a estudiar, aunque podemos introducir también información del metal si lo indicamos en los ajustes del programa. La figura 2 muestra la ventana de ajustes que nos permite indicar al programa la información que contiene nuestro PDB, donde típicamente se deberán marcar las opciones que se observan en la Setting Card de la figura para trabajar

con PDBs obtenidos a partir de la conversión de CIFs.

Una vez ajustados los parámetros, solo queda pulsar el botón "Run NSD on data" para obtener los resultados de la distorsión. En la figura 3 se muestra la ventana de resultados donde se recogen los valores para cada tipo de distorsión en el plano (Dip) o fuera del plano (Dooop). De esta manera el valor más alto se corresponde con la distorsión predominante en el macrociclo estudiado.

El mayor inconveniente del programa es que no se puede descargar sino que es una aplicación web

basada en Java y está depositada en una página que ya no está en funcionamiento pero es accesible a través de web.archive.org. Asimismo, la página donde se encuentra solo es accesible usando el navegador Internet Explorer y es necesario configurar Java con una excepción de seguridad que incluya la página web siguiente: <http://web.archive.org>. Si se está dispuesto a pasar por esos obstáculos, es probable que quede muy satisfecho con el rendimiento de esta aplicación.

<http://web.archive.org/web/20100624082125/http://jasheln.unm.edu/jasheln/content/nsd/NS-Dengine/start.htm>