

Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích
Zdravotně sociální fakulta

Bakalářská práce

Software pro zobrazování molekulárních struktur

Autor práce: Krohová Lucie

Vedoucí práce: RNDr. Milan Předota, Ph.D.

2011

Title of the Bachelor's Thesis:

Software for visualization of molecular structures

Abstract:

The thesis is focused on visualization and modification of molecular structures. The aim is to get familiar with the work with software that are used for the molecular structures imaging, solving several model problems in those applications and subsequent evaluation of individual programs, their options, ease of use and recommendation of appropriate solutions to specific tasks.

The first chapter presents an introduction to the visualization of molecules, ie. describes the transition from physical models to today's software applications for imaging molecular structures. The other chapter deals with the file formats for storing molecular structures. The third chapter describes the functions of commercial program DS ViewerPro 5.0 and open source applications DS Visualizer 3.0, Visual Molecular Dynamics (VMD) and Rasmol. The fourth chapter contains several model problems solving. In the final chapter I compare the different programs. This work could serve to quickly familiarize with the browser and help in selecting the program for specific tasks.

Prohlašuji, že jsem bakalářskou práci na téma Software pro zobrazování molekulárních struktur vypracovala samostatně pouze s použitím pramenů a literatury uvedených v seznamu citované literatury.

Prohlašuji, že v souladu s § 47b zákona č. 111/1998 Sb. V platném znění souhlasím se zveřejněním své bakalářské práce, a to v nezkrácené podobě/ v úpravě vzniklé vypuštěním vyznačených částí archivovaných Zdravotně sociální fakultou elektronickou cestou ve veřejně přístupné části databáze STAG provozované Jihočeskou univerzitou v Českých Budějovicích na jejich internetových stránkách, a to se zachováním mého autorského práva k odevzdanému textu této kvalifikační práce. Souhlasím dále s tím, aby toutéž elektronickou cestou byly v souladu s uvedeným ustanovením zákona č. 111/1998 Sb. Zveřejněny posudky školitele a oponentů práce i záznam o průběhu a výsledku obhajoby kvalifikační práce. Rovněž souhlasím s porovnáním textu mé kvalifikační práce s databází kvalifikačních prací Theses.cz provozovanou Národním registrem vysokoškolských kvalifikačních prací a systémem na odhalování plagiátů.

V Českých Budějovicích

podpis studenta

Ráda bych vyjádřila svou vděčnost a poděkování vedoucímu mé bakalářské práce, **panu RNDr. Milanu Předotovi, Ph.D.**, za čas a úsilí, které mi věnoval v průběhu sestavování této práce a zejména za jeho cenné rady a připomínky, týkající se jejího obsahu

Obsah	strana
ÚVOD	6
1. Úvod do vizualizace molekul.....	7
1.1 Historie	7
1.1.1 Fyzické modely	7
1.1.2 Počítačová vizualizace	7
1.2 Použité molekuly	8
1.2.1 Myoglobin	8
1.2.2 Alanin	9
2. Formáty souborů.....	10
3. Prohlížeče a jejich funkce.....	17
3.1 DS ViewerPro 5.0	18
3.2 DS Visualizer 3.0	30
3.3 VMD	51
3.4 Rasmol	58
4. Modelové úlohy a jejich výsledky.....	64
4.1 Měření vzdálenosti dvou atomů	64
4.2 Měření úhlů	66
4.3 Měření torzního úhlu	69
4.4 Kreslení molekul	72
4.5 Zobrazení vodíkových vazeb	73
4.6 Porovnávání dvou konfigurací	76
5. Diskuze.....	80
6. Závěr.....	82
7. Seznam použitých zdrojů.....	84
8. Klíčová slova.....	90
9. Přílohy.....	91

ÚVOD

Téma „Software pro zobrazování molekulárních struktur“ jsem pojala tak, abych zmapovala přehlednost, jednoduchost a funkčnost programů sloužících pro zobrazování atomů, molekul a struktur z nich vzniklých, což je důležité pro pochopení jejich funkce a určování mnoha strukturních parametrů.

Cílem této práce bylo seznámit se s prací ve čtyřech programech pro zobrazování molekul, následně vyřešit několik modelových úloh a nakonec jednotlivé programy zhodnotit a porovnat.

Práci jsem rozdělila do pěti stěžejních kapitol. První kapitolu jsem věnovala pohledu do historie vizualizace molekul, kde vysvětlím, jak se přecházelo od prvních fyzikálních modelů až k počítačovým molekulárním strukturám. Krátce zde také uvedu, jaké molekuly budu používat k modelovým úlohám.

Druhá kapitola je zaměřena na objasnění důležitých formátů, které se k programům vztahují.

Ve třetí kapitole popisuji všechny vybrané programy z hlediska jednoduchosti ovládání a jejich funkcí.

V následující čtvrté kapitole uvedu pár modelových úloh, od kterých se bude rozvíjet cíl mé práce, tzn. porovnávání zvolených programů.

V diskuzi, které patří pátá kapitola, porovnáím výsledky, kterých jsem v práci docílila a doporučím programy ke konkrétním úlohám.

1. Vizualizace molekul

1.1 Historie

1.1.1 Fyzické modely

Pro první zobrazování molekulárních struktur se v minulosti používaly fyzické modely. Historicky první model vytvořil v roce 1958 John Kendrew. Jednalo se o prototyp makromolekuly myoglobinu v měřítku 5 cm na Angström vyrobený z mosazného drátu, který byl sestaven na základě rentgenové struktury molekuly. Díky optickému srovnávací vytvořenému v roce 1968 F. Richardsem se zjednodušila tvorba Kendrewových modelů. Na konci 70. let byl zkonstruován stroj, který umožňoval ohyb drátu, podle uspořádání hlavního řetězce proteinu.

Na konci 60. let se ke slovu dostávají počítače a vizualizace fyzických modelů se stává již spíše uměním nebo didaktikou. Vzniklo tak molekulové sochařství, které bylo reprezentováno B. Rubinem (v roce 1973 zvítězil v umělecké soutěži se svým modelem ruberdoxinu). Mezi další příznivce molekulového sochařství patřili E. Meyer nebo K. Eward.^[23]

1.1.2. Počítačová vizualizace

Do popředí se v 60. a 70. letech dostali dostatečně technicky zdokonalené počítače. Prvním průkopníkem v počítačovém zobrazování molekulárních struktur byl C. Levinthal. V roce 1964 vytvořil systém, jenž na osciloskopu vizualizoval rotující drátový model struktury makromolekul. J. a D. Richardsonovi využili krystalografického studia molekulové struktury a zobrazili molekulu pouze pomocí počítače. V roce 1977 byl uveden „Atlas struktur molekul“ od T. K. Portera. Pro nákladnost barevného zobrazování se používalo „stereo slides“ čili dvojice diapozitivů

[23] Srov. VAŘEKOVÁ, R. *Historie počítačové chemie*. [online]. Brno : Masarykova Univerzita, Fakulta informatiky, 2002. Dostupné na WWW: <<http://www.fi.muni.cz/usr/jkucera/pv109/2002/xvarekov.htm>>.

(základní poloha, pootočená poloha). V roce 1980 T. Merchant uveřejnil metodiku zvanou TAMS (Teachig Aids for Macromolecular Structure). Šlo o speciální brýle pro sledování stereo slidů. Následovalo hlavní plodné období počítačové vizualizace. V 80. letech Evans a Sutherland vytvořili třídu vektorových počítačů. Tyto počítače dokázaly zpracovávat krystalografická data. K těmto počítačům byl vytvořen vizualizační softwarový balík FRODO T. A. Jonesem v roce 1978. Další program vytvořili J. a D. Richardsonovi a dali mu název CHAOS. Tento program byl mnohem vyspělejší než FRODO. V roce 1992 naprogramovali bratři Richardsonovi programy MAGE a PREKTIN, které sloužili pro práci s animacemi molekul.

1.2 Použité molekuly

Zde uvedu základní informace o molekulách, které použiji pro modelové úlohy v kapitole čtyři.

1.2.1 Myoglobin

Myoglobin je červené barvivo obsažené ve svalech, nazývané též svalový hemoglobin. Jde o monomerní protein, který zastává stejnou funkci jako hemoglobin v krvi, tzn. přenáší kyslík. Na rozdíl od hemoglobinu, který přenáší kyslík do celého těla, myoglobin rozvádí kyslík do svalových buněk a tkání. Je vytvářen hlavně v srdeční svalovině, ale můžeme jej nalézt i v některých kosterních svalech, přičemž jeho relativní molekulová hmotnost je rovna $1,77 \cdot 10^4$.

Celou molekulu myoglobinu můžeme považovat za strukturní doménu v molekule, která obsahuje 153 zbytků aminokyselin.

Struktura

Myoglobin se skládá z jednoho peptidového řetězce, molekuly hem a sulfátových iontů. Je tvořen osmi α -šroubovicemi.^[19]

1.2.2 Alanin

Systematickým názvem se jedná o kyselinu 2-aminopropionovou. Patří mezi neesenciální aminokyseliny a mezi jedny z nejjednodušších α -aminokyselin vůbec. To je dáno α -uhlíkem, který se váže na methylovou skupinu. Je nepolární, tzn. nemísí se s vodou. Jedná se o nejběžnější aminokyselinu obsaženou v bílkovinách.

Vzniká transaminací pyruvátu nebo z aminokyselin s alifatickým řetězcem (leucin, valin, izoleucin).

Alanin je opticky aktivní, což je dáno tím, že obsahuje chirální uhlík. Jsou známé dvě formy alaninu, jimiž jsou L-alanin a D-alanin. Podílí se na hydrofobních interakcích přes vlákno proteinu.^[1]

[19] Srov. *Struktura hemoglobinu a myoglobinu* [online]. 2006. Dostupné na WWW: <<http://www.scumdoctor.com/Czech/anatomy/circulatory-system/cardiovascular-organ/blood/hemoglobin/Structure-Of-Hemoglobin-And-Myoglobin.html>>.

[1] Srov. *Alanin*. In Wikipedie – otevřená encyklopedie [online]. Poslední aktualizace 3. 4. 2011. Dostupné na WWW: <<http://cs.wikipedia.org/wiki/Alanin>>.

2. Formáty souborů

Formáty souborů uchovávají data v elektronické podobě a rozdělují se podle toho, jaká data chceme uchovávat.

- Grafické formáty uchovávají různé obrázky nebo fotografie
- Textové formáty využíváme k uložení textových dat
- Binární formát ukládá data jako tzv. sekvenci bitů, má svůj vlastní řád a zabírá méně místa

V kapitole uvádím formáty spojené s programy, které jsou zahrnuty v této bakalářské práci.^[7]

BMP

Bitmap neboli bitmapová mapa oken je velmi jednoduchý, ale dobře dokumentovaný soubor binárního formátu. Dokáže být otevřen ve velkém množství jednoduchých grafických aplikací. BMP nepoužívá kompresi, proto je obvykle mnohem větší než soubory využívající kompresi. Dnes se používají spíše novější formáty typu GIF, PNG aj. za účelem uchování všech informací. BMP má 4 varianty formátu, které souvisejí s kompetentními operačními systémy. Jsou jimi Microsoft Windows 1.X a 2.X, OS/2 1.X, Microsoft Windows 3.X a OS/2 2X.^[2]

Uspořádání souboru:

1. verze formátu je složena ze souborové hlavičky o délce 16 bytů a nekomprimovaných bitmapových dat. 3. verze formátu BMP je zkomponována z bitmapové hlavičky dlouhé 14 bytů, informační hlavičky o délce 40 bytů, paletu a bitmapu, přičemž volitelná je pouze paleta barev.

^[7] Srov. *Grafické formáty*. In Google sites [online]. Poslední aktualizace: 28. 4. 2011. Dostupné na WWW:

<<http://sites.google.com/site/xgrafika/graficke-formaty>>.

Zbývající část souboru obsahuje vlastní bitmapová data. Obrazová data jsou psána v levém dolním rohu.^[2]

JPEG

JPEG neboli celým názvem Joint Photographic Experts Group se nazývá podle svých zakladatelů. Jedná se o binární soubor, který patří mezi rastrové grafické formáty. Vznikl, aby mohl zobrazovat obrázky nebo fotografie obsahující hodně barev, umí totiž zobrazit až 16 777 216 barev. Jde se o formát se ztrátovou kompresí což znamená, že po uložení obrázku do souboru se zmenší objem dat a méně důležité informace se nenávratně ztratí. Kompresi si můžeme libovolně před uložením nastavit. Po opakovaném ukládání se kvalita obrázku bude stále zhoršovat.^{[18][26]}

GIF

Celým názvem Graphic Interchange Format je rastrový formát s prioritou bezztrátové komprese. GIF je binární soubor a na rozdíl od JPEGu opakované ukládání obrázku nevede ke snížení jeho kvality, zůstává stále stejná. GIF je určen pro obrázky s maximálně 256 barvami a podporuje transparentní a animované obrázky. Umožňuje dokonce uložení více obrázků do jednoho souboru.

^[2] Srov. *BMP* [online]. 2008. Dostupné na WWW: <<http://referaty-seminarky.cz/bmp/>>. ISSN 1802-422X.

^[18] Srov. STARGEN, *SLOVNÍČEK - Grafický formát JPEG* [online]. Praha, 2000 – 2009. Dostupné na WWW: <<http://www.stargen.cz/slovník/format-jpg/>>.

^[26] Srov. *Ztrátová komprese*. In Wikipedie – otevřená encyklopedie [online]. Poslední aktualizace 3. 1. 2009. Dostupné na WWW: <http://www.multimediaexpo.cz/wiki/Ztr%C3%A1tov%C3%A1_komprese>.

PICT

PICT využívá RGB barev s jedním alfa kanálem, který udává hodnotu průhlednosti pixelu. Dále využívají režimů indexovaných barev při nízkých barevných hloubkách, stupňů šedi nebo bitových map bez alfa kanálů.

PPM

Portable PixelMap, zkratkou PPM, je grafický soubor pracující s obrázky v true color formátu, které využívají RGB modelu barev. RGB model je zastoupeni barvami červenou, zelenou a modrou.

PNG

Grafický formát Portable Network Graphics byl primárně založen pro využití v internetu, má ale mnohem širší uplatnění. PNG uchovává rastrové obrazy, využívá RGB barev, indexovaných barev a stupňů šedi.^[9]

VRML

Celým názvem Virtual Reality Modeling Language je dalším grafickým formátem. Je založený na deklarativním programovacím jazyce, díky němuž dokáže popisovat 3D objekty. Rozlišujeme tři typy formátu VRML. Jsou jimi VRML 1, VRML 2 a VRML VRML 97, přičemž poslední dva jsou téměř shodné. VRML zobrazuje složitější molekulární struktury nebo přímo simulace.

^[9] Srov. JANÁK, R. *PNG - dokonalý formát pro přenos obrazových dat* [online]. Dostupné na WWW: <<http://interval.cz/clanky/png-dokonalý-format-pro-prenos-obrazovych-dat/>>.

CRD

ColdRED skript soubor popisující souřadnice patří mezi binární formáty.

MDL

MDL řadíme mezi binární formáty. Skládá se z hlavičky a vlastních dat. Veškeré informace k manipulaci s daty jsou obsaženy v hlavičce souboru.^[8]

NAMD

NAMD se podobá formátu CRD, popisuje souřadnice a patří do binárních formátů.

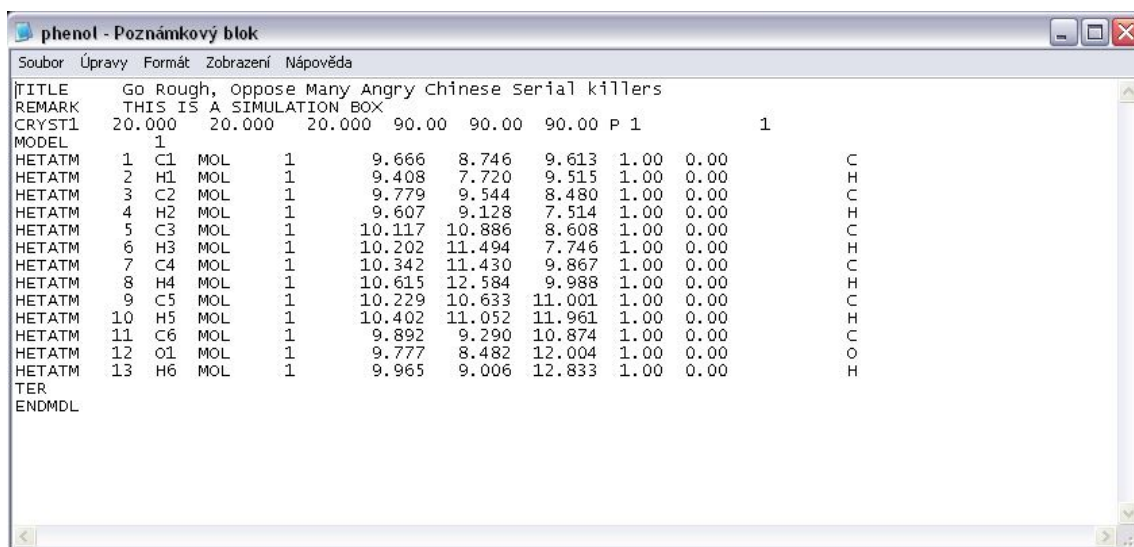
XYZ

XYZ patří mezi nejjednodušší textové formáty. Umí popsat body v 3D prostoru a to tak, že definuje polohy atomů v XYZ souřadnicích pomocí kartézské soustavy. Formát obsahuje informace i počtu všech atomů. Typ atomu se do formátu zapisuje pomocí své chemické značky a nebo podle svého atomového čísla. Jedná se tedy o textový soubor. Číslo v prvním řádku vyjadřuje z kolika atomů se molekula skládá. V našem případě se molekula vody skládá ze tří atomů. Druhá řádka vyčísluje energii vody. V prvním sloupci jsou zapsány jednotlivé atomy, v následujících sloupcích souřadnice soustavy xyz.

^[8] Srov. HENRY, D. *MDL file format (Quake's models)* [online]. Poslední aktualizace 20. 12. 2004. Dostupné na WWW: <<http://tfc.duke.free.fr/coding/mdl-specs-en.html>>.

PDB

Tento textový soubor slouží k reprezentaci 3-D strukturálních dat biomolekul jako jsou proteiny a nukleové kyseliny. Jedná se o tzv. fixed formát, což znamená, že každá data mají své specifické místo. Soubor je buď vstupním nebo výstupním formátem pro většinu programů k počítačovému modelování, např.: VMD, PyMOL, YASARA, Chimera a jiné.^{[14][25]}



```
phenol - Poznámkový blok
Soubor Úpravy Formát Zobrazení Nápověda
!TITLE      Go Rough, Oppose Many Angry Chinese serial killers
REMARK      THIS IS A SIMULATION BOX
CRYST1      20.000  20.000  20.000  90.00  90.00  90.00 P 1      1
MODEL
1
HETATM      1  C1  MOL  1      9.666  8.746  9.613  1.00  0.00      C
HETATM      2  H1  MOL  1      9.408  7.720  9.515  1.00  0.00      H
HETATM      3  C2  MOL  1      9.779  9.544  8.480  1.00  0.00      C
HETATM      4  H2  MOL  1      9.607  9.128  7.514  1.00  0.00      H
HETATM      5  C3  MOL  1     10.117  10.886  8.608  1.00  0.00      C
HETATM      6  H3  MOL  1     10.202  11.494  7.746  1.00  0.00      H
HETATM      7  C4  MOL  1     10.342  11.430  9.867  1.00  0.00      C
HETATM      8  H4  MOL  1     10.615  12.584  9.988  1.00  0.00      H
HETATM      9  C5  MOL  1     10.229  10.633  11.001  1.00  0.00      C
HETATM     10  H5  MOL  1     10.402  11.052  11.961  1.00  0.00      H
HETATM     11  C6  MOL  1      9.892  9.290  10.874  1.00  0.00      C
HETATM     12  O1  MOL  1      9.777  8.482  12.004  1.00  0.00      O
HETATM     13  H6  MOL  1      9.965  9.006  12.833  1.00  0.00      H
TER
ENDMDL
```

Obrázek 1

Každý řádek obsahuje nejprve znaky, které určují typ dat na právě zmíněném řádku. V prvním sloupci si můžeme všimnout výrazu HETATM, sloužící pro atomy nestandardních residuí (molekula vody, ionty apod.) Pokud by se jednalo o standardní residuum, zaznamenali bychom místo HETATM značku ATOM. V tomto případě by se

^[14] SROV. PROKOP, M. *Načítání a zápis PDB souboru*. In National Centre for Biomolecular Research [online]. Brno, Masarykova univerzita, 2009. Dostupné na WWW: <http://ncbr.chemi.muni.cz/~martinp/C3220/PCChem_C8.pdf>.

^[25] Srov. ZELENÝ, T. *Souřadnicové systémy používané ve výpočetní chemii - Úvod do molekulárního modelování* [online]. Olomouc, Univerzita Palackého. Poslední revize 17. 2. 2008. Dostupné na WWW: <http://fch.upol.cz/skripta/momo/souradne_systemy.pdf>.

jednalo o atomy základních aminokyselin nebo nukleotidů. Výraz CONECT určuje vazby mezi atomy a zpravidla se vyskytuje u nestandardních residuí. REMARK udává nějakou poznámku k molekule.

Druhý sloupec je věnován atomovému číslu, čili pořadovému číslu atomu (vždy pouze celé číslo).

Další informací je pro nás tzv. atomová identita vyjadřující jméno atomu. Je sestavena z maximálně 4 znaků.

Následuje náhradní pozice atomu dána znakem.

Důležitým datem, které nesmí chybět je jméno samotného residua vyjádřeno třemi znaky.

Pokračují data, které vyjadřují znakem identifikátor proteinového řetězce, pořadové číslo residua v sekvenci a kód určující vložení residua.

Velmi důležité jsou tři sloupce obsahující souřadnice x,y a z z množiny reálných čísel.

Sloupec v našem případě, který je celý zaplněný číslem 1.00 určuje obsazenost. Obsazení atomu je míra frakce molekul v krystalu, ve kterém atom skutečně zabírá určitou pozici. Pokud jsou všechny molekuly v krystalu přesně totožné, obsazenost pro všechny atomy je 1,00.

Teplotním faktorem může být myšlena míra, jakou atom kmitá nebo vibruje okolo své pozice v modelu. Atomy v postranních vazbách vykazují větší svobodu pohybu než v hlavních řetězcích a tento pohyb nutí atom šířit se přes malou oblast prostoru. Difrakce je ovlivněna touto variantou, a proto se přiřazuje teplotní faktor každému atomu.

K úplnému doplnění PDB souboru chybí již jen symbol prvku zarovnaný napravo s maximálně dvěma znaky a formální náboj atomu.

SMI

Synchronized Multimedia Integration Language je užitečný k vytváření audiovizuálních prezentací. Umí sjednotit audio s obrázky a textem. Formát je možno zapsat v textovém editoru.^[6]

XTC

XTC formát slouží k přenosu trajektorií.^[24]

TRR

Tento formát obsahuje souřadnice, rychlost a sílu a využívá se stejně jako XTC k trajektoriím.

^[6] Srov. File Extension SMI [online]. Dostupné na WWW: <<http://filext.com/fileextension/SMI>>.

^[24] Srov. XTC file format. In Pittsburgh Supercomputing Centre[online]. Verze 4.0. Pittsburgh, poslední aktualizace 18. 1. 2009. Dostupné na WWW: <<http://www.psc.edu/general/software/packages/gromacs/online/xtc.html>>.

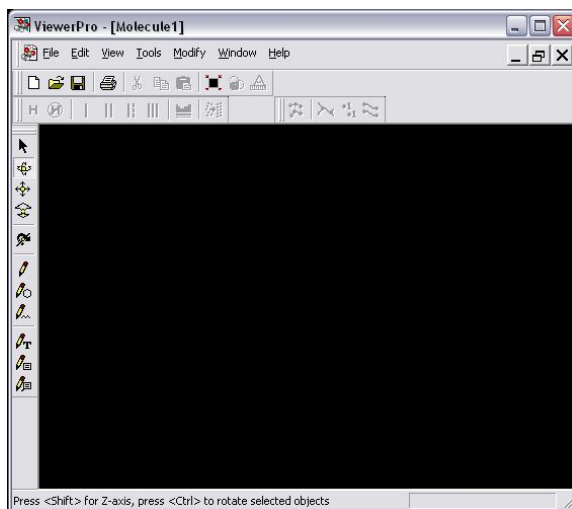
3. Prohlížeče a jejich funkce

3.1 DS ViewerPro 5.0

Základní informace

DS ViewerPro 5.0 je produkt společnosti Accelrys, součást skupiny programů tvořících Discovery Studio. Program umožňuje kromě zobrazování molekul také jejich vytváření a editaci. Spolupracuje s operačním systémem Windows. Jedná se o placenou verzi (300 \$), která se již v dnešní době na trhu nevyskytuje. Programu jsem se věnovala poměrně dlouhou dobu, a proto ho zde také uvádím alespoň pro přehled.^[13]

Popis programu



Obrázek 2

Program pracuje s jedním oknem, které obsahuje výchozí nástrojovou lištu (Tool Bar) v horizontální části a paletu nástrojů (Tool Palette) pro tvorbu molekuly ve vertikálním směru. Viditelnost dalších nástrojových lišt lze nastavit.

[13] Srov. Molecular library. In Chemical Education Server, University of Pittsburgh [online]. Pittsburgh : University of Pittsburgh, Department of Chemistry. Dostupné na WWW: <<http://chemed.chem.pitt.edu/molecules/default.htm>>.

Základní ovládání

První tlačítko na paletě nástrojů se nazývá select (F5). Jde o kurzor, díky kterému můžeme označit jednotlivé atomy, vazby nebo i celou molekulu a označenou část posunout. Objekty označujeme metodou levým stiskem klávesy myši + táhnout. Rotate (F6) nám otáčí celou molekulu. Díky Translate (F7) dokážeme uchopit molekulu a posouvat ji. Přiblížení nebo oddálení molekuly docílíme pomocí Zoom (F8). Při držení levého tlačítka myši a posouváním směrem dolů, budeme molekulu oddalovat. Při sunutí kurzoru nahoru se nám bude molekula přibližovat. Nástroj torze (F9) se využívá k otáčení atomů kolem vazeb.

Menu a jeho funkce

File (Soubor) umožňuje otevřít nový soubor (*Ctrl + N*), již existující soubor (*Ctrl + O*), zavřít molekulu (*Ctrl + W*), uložit (*Ctrl + S*) nebo uložit jako. Strukturu můžeme exportovat do formátů:

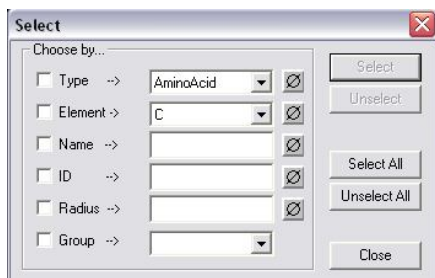
- Viewer (*.msv)
- Brookhaven PDB Files (*.pdb, *.ent)
- MDL MOL Files (*.mol, *.sdf, *.sd, *.mdl),
- XYZ Coordinate (*.xyz),
- Catalyst Query Files (*.chm),
- VRML World Files (*.wrl),
- POV-RAY Scene Files (*.pov),
- Smiles Files (*.smi) nebo GIF File (*.gif).

File dále nabízí tisk (*Ctrl + P*) a odeslání molekuly pomocí Microsoft Office Outlook.

Edit zahrnuje úpravy, jako jsou krok dopředu (*Ctrl + Y*) a krok dozadu (*Ctrl + Z*). Dalšími možnostmi jsou vystřihnutí (*Ctrl + X*), kopírování (*Ctrl + C*), vložení (*Ctrl*

+ *V*) a smazání (*Del*) označené celé molekuly, atomu, vazby nebo části molekul. *Paste from* přidá k zobrazené molekule jinou ze souboru.

Select All (*Ctrl + A*) označí všechny objekty. Nabídka *Select...* zobrazí dialogové okno, které se používá pro složitější výběry.

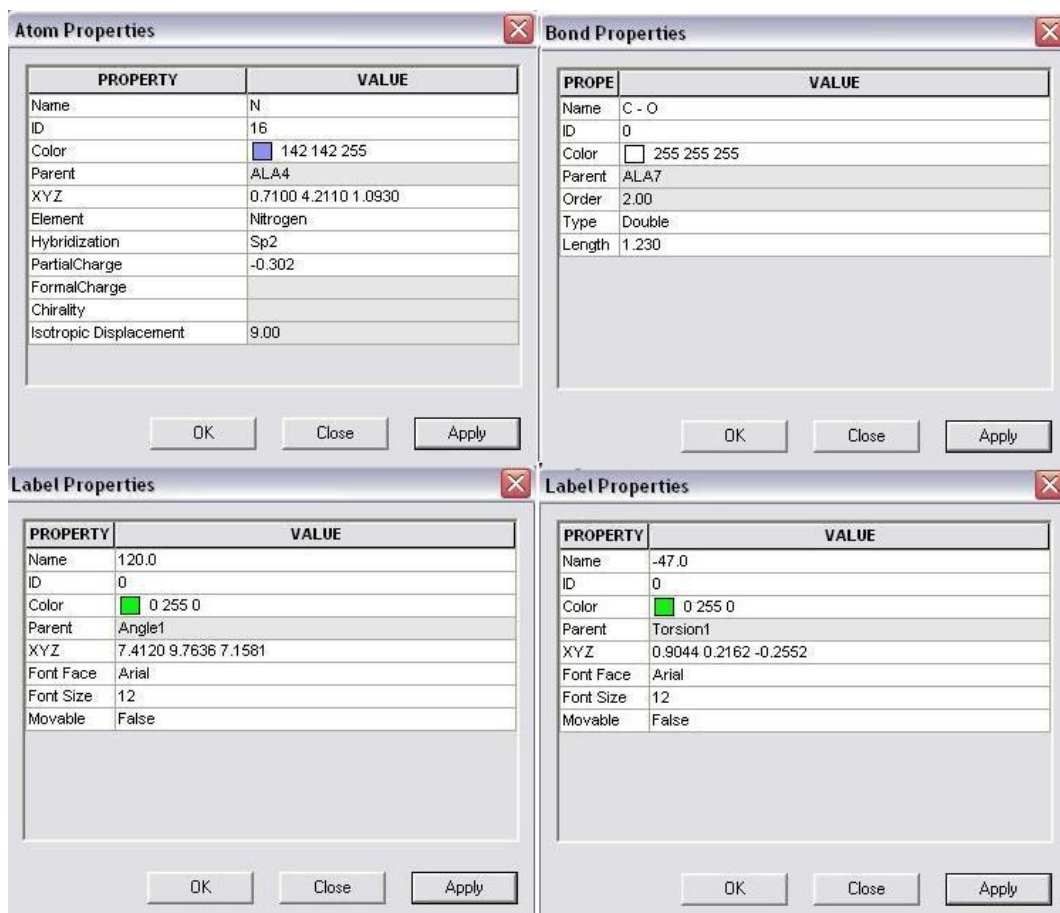


Obrázek 3

Volbu provádíme podle typu (aminokyselina, aminokyselinový řetězec, atom, vazba, skupina, molekula a proteinová sekvence) nebo podle prvku, přičemž při tomto výběru musí být zvolen typ atom. Pokud budeme vybírat podle názvu, musíme ho dát do uvozovek. Například pokud budeme chtít zobrazit skupinu ALA6, musíme ji zapsat jako „ALA6“, protože bez uvozovek by se nám označily všechny skupiny ALA. Musíme si dát také pozor na psaní velkých a malých písmen. Můžeme vybrat i objekty podle ID čísla. Radius zobrazí všechny objekty v určené vzdálenosti od označeného atomu nebo vazby. Group vybírá skupiny acidic (kyselá), backbone (páteří), basic (základní), hydrophilic (hydrofilní), hydrophobic (hydrofobní) a side chain (postranní řetězec). Do nabídky se zařadí také uživatelem definované skupiny, viz následující bod.

Group... vyobrazí okno Edit Group. Pokud označíme část molekuly a otevřeme toto okno, můžeme si naši označenou část pojmenovat jako skupinu.

Edit obsahuje také Properties (vlastnosti). Pokud označíme jeden atom a zvolíme možnost Properties, zobrazí se nám informace o námi zvoleném atomu. Kdybychom vybrali třeba úhel nebo torzní úhel, tabulka Properties zobrazí informace i o těchto objektech.



Obrázek 4

View (zobrazení) ve svém výčtu možností obsahuje *Display Style* (*Ctrl + D*), který zobrazí tabulku, která se skládá ze dvou záložek, atomu a proteinu. U atomu změním styl zobrazení na Off, Line, Stick, Ball and Stick, Scaled Ball and Stick, CPK nebo Polyhedron. Je zde možnost změny parametrů jako jsou Stick size, Ball size nebo CPK scale (měřítko). Dále můžeme atom obarvit buď podle Element (prvek), kdy každý prvek atomu má svoji definovanou barvu. Parent Color (Rodičovská barva) udává atomu barvu podle objektu, kterému náleží. U Charge (náboj) je barva brána z gradientu, který jde od červené záporné k modré kladné. Záložka protein obsahuje styly zobrazení Ca Wire, Off, Ca Stick, Line Ribbon, Flat Ribbon, Solid Ribbon, Tube a Schematic. Obarvení se provádí podle residua, hydrophobicity (hydrofobnost), pKa (hodnoty residua), CAplha (obarvení residua podle obsaženého atomu alfa uhlíku),

Secondary Type (Barva podle sekundární struktury – šroubovice červené, beta listy azurové, závity zelené a cívky bílé), AminoAcidChain (aminokyselinový řetězec) a podle molekuly.

Pokud si označíme atom, vazbu nebo část molekuly a z nabídky vybereme Color, obarvíme tak vybranou část na jednu barvu.

Reset Rotation otočí zpět molekulu do své původní pozice při načtení molekuly do programu.

Fit to screen přizpůsobí velikost zobrazení molekuly stránce.

Pokud označíme celou molekulu nebo pouze nějakou její část a zvolíme z nabídky Center, vypočte se geometrický střed vybrané části a přeloží do středu okna.

Spin slouží k zapnutí a vypnutí otáčení molekuly dokola.

Full Screen (F2) nastaví celoobrazový režim. Pro jeho vypnutí použijeme buď klávesu F2 nebo v pravém dolním rohu vypneme okýnko s ikonou Full Screenu.

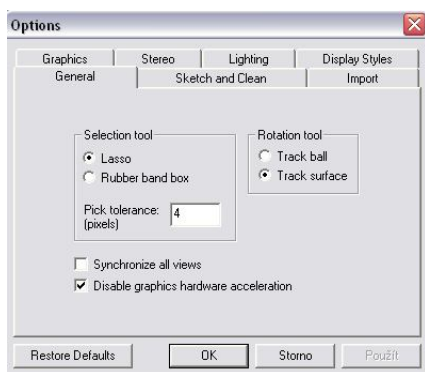
Split Screen Stereo nám vyrobí druhý pohled naší otevřené molekuly. Pokud budeme chtít provádět výběr objektů v molekule, budeme to moci provést jen na levém pohledu a výběr se nám zobrazí i v molekule napravo. Pro nastavení sterea odkazují do View → Options → záložka Stereo.

Díky Clipping Planes (ořezové roviny) můžeme postupně „odloupávat vrstvy“ z molekuly a zkoumat tak struktury, které byly dříve za nyní námi odejmutou vrstvou schované. Mohou nám k tomu posloužit Front Clipping Plane a Back Clipping Plane (přední a zadní ořezová rovina).

Následuje série příkazů jako Hide, který schová označený objekt. Pokud chceme objekt znovu vidět, vybereme Show. Kdybychom poschovávali pár objektů za sebou a vybrali Show, zobrazí se nám pouze poslední schovaný objekt, zvolíme tedy Show All k zobrazení všech skrytých objektů. Existuje ještě jedna možnost, a to Show Only, kdy nám zůstane viditelná právě jen označená část molekuly.

Toolbar obsahuje všechny panely nástrojů a my si zde můžeme nastavit, které chceme mít zobrazené pořád. Jedná se o panely:

Builder Tools (stavební nástroje), kde si můžeme zvolit typ vazby (jednoduchá, dvojná, trojná, aromtická), změnit prvek atomu, provést tzv. Clean Structure (Vyčistí se geometrie všech nebo vybraných molekul. Pokud vybereme pár atomů, vyčistí se ty molekuly, které tyto atomy obsahují.), zobrazit a skrýt vodíky. *Alignment Tools* (nástroje zarovnání), Query Tools, Animation Tools, Window Tools, Full Screen Tools, Tree Tools, Atom Style Tools, Amino Acid Style Tools, Main Tools, Tool Palette a Status Bar.



Obrázek 5

Options.. (Možnosti) otevírají dialogové okno. V záložce General si upravíme nástroje výběru (Lasso, které provádí přesnější výběr jakéhokoliv tvaru, Rubber band box výběr obdélníkového tvaru a jejich pixelovou toleranci. Při snižování tolerance se přesnost výběru zvyšuje.), nástroje rotace (Track Ball, Track Surface), synchronizovat všechny pohledy a zakázat hardwarovou akceleraci grafiky. *Grafické možnosti* stanovují vzhled molekul. Můžeme zde vybrat mezi ortografickým a perspektivním režimem. V ortografickém režimu se nám zdá, že všechny objekty jsou stejné velikosti bez ohledu na to, jak jsou daleko od pozorovatele. Objekty, které jsou dál od pozorovatele a jeví se jako menší než ty, které jsou pozorovateli blíže, vysvětlují perspektivní režim. Nachází se tu volba barvy pozadí a kvalita, ve které se molekula zobrazuje. Při zaškrtnutí políčka

Depth Cue se více osvítí přední molekuly a ty zadní s menším osvětlením jakoby mizí v dálce. Fast Render on move znamená změnu zobrazovacího stylu molekuly, zatímco je rotována nebo přenášena, což umožňuje rychlejší zobrazení.

Sketch and Clean upravuje chování programu během kreslení molekul. Clean Only Selected Atoms zakřížkujeme, pokud chceme „vyčistit“ pouze část molekuly a ne vždy celou. U označení Include Intermolecular Forces algoritmus „čištění“ bere v úvahu mezimolekulární síly. Při vypnutí je molekula „čištěna“ nezávisle na ostatních. Perceive and Update Aromaticity (aktualizace aromaticity) způsobí, že se program pokusí determinovat aromatickou strukturu a změny vazeb na aromatické při „čištění“ molekuly. Tyto tři možnosti můžeme zařadit do úkolů programu, pokud provádíme Clean Structure. Co ale program dělá, když kreslíme molekulu? Automatically Clean Molecule způsobuje, že se molekula vyčistí při každém našem kroku vytváření molekuly. Add and Update Hydrogens přidává a aktualizuje vodíky ve vazbách, aby po každém našem například přidání nějakého atomu nebo smazání zůstal počet vodíků správný vzhledem k vaznosti atomů. Default Sketch Style slouží k nastavení výchozího stylu zobrazení při kreslení molekuly. Na výběr máme Line, Stick, Ball and Stick a Scaled Ball and Stick.

Import zahrnuje rozšířené možnosti importu, které vystihují to, co program dělá v průběhu a po načtení molekuly ze souboru. Convert 2D Molecules to 3D znamená, že při otevření molekuly se okamžitě převede do 3D. Add Hydrogens přidá vodíky po načtení molekuly do programu. Display Unit Cell zobrazí všechny informace o buňce, které lze ze souboru přečíst. Pokud zaškrtneme Use Atom Charges from File, program bude využívat parciálních nábojů ze souboru. Pokud se tato možnost vypne, program spočítá všechny parciální náboje pro každou molekulu. Create Animation from Multiple Molecules umožňuje vytvoření animace objektu, pokud je zjištěna více než jedna konfigurace molekuly při čtení souboru formátu MOL, XYZ, CPD nebo SMI. Animaci můžeme přehrát pomocí Animation Toolbar.

Pokud máme aktivní Use PDB Secondary Structure, program definuje sekundární strukturu z PDB souboru. Pokud tuto možnost označenou nemáme, aplikace

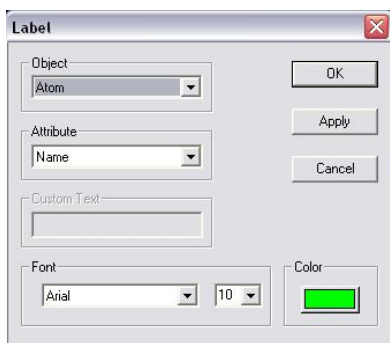
používá své sekundární struktury. Díky Perceive Aromaticity program rozpozná aromaticnost v molekulách a přidá aromatické vazby tam, kde jsou nezbytné.

Display Styles slouží k nastavení stylu zobrazení importovaných molekul. Neplatí to ovšem pro *.msv, protože tento formát už má informace o zobrazení definované přímo v souboru. Atom Display Style nastaví styl zobrazení atomu při importu. Na výběr máme Line, Off, Stick, Ball and Stick, Scaled Ball and Stick a CPK. Protein Display Style provádí to samé, ale s proteinem. (Off, Ca Wire, Ca Stick, Line Ribbon, Flat Ribbon, Solid Ribbon, Tube, Schematic). Zobrazovací styl pro import DNA/RNA tedy možnost DNA/RNA Display Style může být Off, Arrows, ArrowLadder, ArrowRings, Tubes, TubeLadder, TubeRings.

Stereo obsahuje možnost Split Screen (rozdělení obrazovky) na Relaxed eyes (uvolněné oči), který vytváří 3D dojem při pohledu za zobrazení stereo obrazu a Crossed eyes (překřížené oči), při kterém se díváme před dvojicí molekul pro 3D efekt. Úhlem upravujeme rotaci mezi oběma vizualizacemi ve stereu.

Záložka *Lighting* upravuje směr světla a barvu. Můžeme si vybrat ze čtyř světél a dokonce všechny čtyři najednou. Nemají ale žádný vliv na Lines zobrazení. Tlačítko Restore Defaults použijeme, pokud budeme chtít obnovit původní nastavení. Vyskytuje se v každé záložce.

Tools (nástroje) jsou jednou z hlavních složek menu. *Hydrogens* řídí procesy vodíků v molekule. Příkaz Hydrogens umí vodíky molekule přidat, odejmout, ukázat nebo schovat. Add Polar Hs neboli vodíkové můstky objevíme tam, kde negativní části jiných molekul přitahují vodík se slabým kladným nábojem, tzn. vodík v polární vazbě.



Obrázek 6

Označeným objektům můžeme přiřadit *Labels* (štítky). Samozřejmě nám možnost Labels nabízí i remove (odebrání) štítků. Pokud zvolíme Add (přidat), otevře se nám tabulka Label. Seznam Object zahrnuje všechny typy objektů, které můžeme v naší otevřené molekule najít. Do objektů patří Cell (buňka), Molecule (molekula), Protein, Sequence, Nucleic Acid (nukleová kyselina), Nucleic Acid

Chain (řetězec nukleové kyseliny), Atom, Bond (vazba), Amino Acid (aminokyselina), Amino Acid Chain (aminokyselinový řetězec), Label, Chain (řetězec), residue a Solid Surface (pevný povrch). Attribute obsahuje seznam atributů, které jsou specifické pro námi vybraný objekt v této tabulce. Objeví se zde například Name (název), ID, Color (barva), Parent (nadřazený objekt), Partial Charge (parciální náboj), XYZ, Isotropic Displacement (izotropní posunutí). Můžeme také využít kolonku Custom Text (vlastní text). Nakonec je zde také možnost nastavení barvy písma štítku, velikost a typ fontu.

Další nabídkou je *Monitors*. Možnost *Distance* (vzdálenost) nám slouží k měření vzdálenosti mezi dvěma atomy. Nejprve označíme dva atomy s podržením klávesy Shift a zvolíme Distance. Atomy nám spojí štítek a zobrazí se nám jejich vzdálenost v jednotkách Ångström ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$). Pokud jeden z atomů posuneme, program automaticky vzdálenost přepočte.

Angle slouží k měření úhlu mezi třemi atomy. Pro měření úhlu máme více způsobů. Můžeme označit tři atomy (s pomocí Shiftu), dvě vazby nebo jeden atom a jednu vazbu. Následně zvolíme Angle v nabídce menu a zobrazí se nám úhel ve °.

Torsion monitor zobrazuje torzní úhel mezi čtyřmi atomy. Máme opět více možností. Můžeme označit jednu vazbu, dvě vazby, které jsou od sebe ob jednu vazbu, tři sousední vazby, jednu vazbu a dva sousední atomy nebo čtyři atomy. Poté zvolíme Torsion. Pokud provede menší změnu geometrie molekuly, torzní úhel se automaticky přepočítá.

Centroid nám umožňuje najít těžiště. Pokud označíme celou molekulu, najde nám těžiště oné molekuly; pokud pouze část, ukáže se nám těžiště právě vybrané části molekuly. Těžiště se nám zobrazí zeleně.

Možnost *Chirality* (chiralita) označí chirální atomy písmenky „R“ nebo „S“.

HBond (vodíková vazba) vzniká u sloučenin, ve kterých se atom vodíku váže na atomy prvků o vysoké elektronegativitě (fluor, kyslík, dusík). Tyto atomy obsahují volný elektronový pár.^[1] Vodíkové vazby se nám zobrazují v celé molekule přerušovanými zelenými čarami. Pokud si označíme jednu vodíkovou vazbu, označí se nám

automaticky všechny. Pravým tlačítkem myši si můžeme otevřít tabulku HBondMonitor Properties, kde zjistíme počet vodíkových vazeb v molekule.

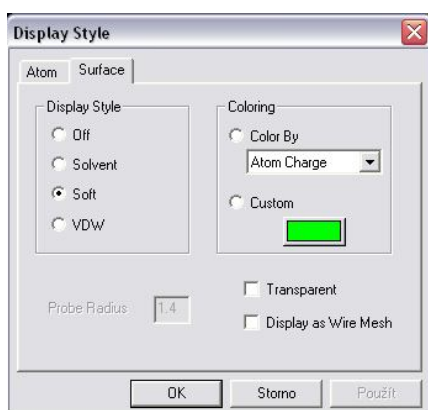
Bump se snaží sblížit existence atomů vodíku, které nemají naplněnou valenční vrstvu. Ukazují se jako růžové přerušované čáry. I zde platí, že celkový počet Bump vazeb zjistíme přes pravé tlačítko na vazbu v BumpMonitor Properties.

Structure nám ukazuje pevnost molekuly. Zobrazená azurové kolečka jsou přiřazována atomům s nenaplněnou valencí. Červený rámeček pak patří atomům s přeplněnou valencí.

Pokud bychom chtěli všechny tyto zobrazovací možnosti smazat, stačí zvolit další možnost v menu, a tím je *Remove*.

Surfaces (povrchy) přidá celé molekule nebo pouze jen označeným objektům ve struktuře povrch, který je zobrazován na základě různých vzorců a barevných schémat.

[2] Pokud označíme celý povrch, pravým tlačítkem a volbou Display Style zobrazíme tabulku, kde zvolíme záložku Surface a zde můžeme měnit nastavení povrchu.



Obrázek 7

Zobrazit povrch můžeme jako Off, což znamená vypnuto. Další možností je Solvent (rozpuštědlo), což připomíná povrch Conollyho rozpuštědla. Probe Radius (sonda poloměru) reguluje poloměr atomu, který je k popisu povrchu používán. Soft (měkký) povrch je velmi podobný solventovému. VDW povrch určují van der Waalsově poloměry atomů. Dále si zde můžeme vybrat styl barvení povrchu. K dispozici máme Parent Color (rodičovská barva), který obarví povrch podle rodičovského objektu. Electrostatic Potential (elektrostatický potenciál) je výchozí možností. Můžeme nechat nabarvit povrch i podle Atom Charge (náboj atomu) nebo Atom Color (barva atomu). Pokud zakřížkujeme Transparent (transparentní), povrch bude průhledný. Display as Wire Mesh (drátové pletivo) nám povrch zobrazí jako pletenec drátů.

Pokud budeme chtít zobrazení povrchu z molekuly odebrat, zvolíme *Remove*. *Markers* slouží k přidávání značek pro polymery. Můžeme označit *Head* (hlava), *Tail* (ocas) a *RGroup* (R skupina). Nejdříve musíme označit nějaký objekt nebo část molekuly a poté můžeme zvolit, jakou značku chceme k molekule připojit. Pokud chceme značky odstranit, nenecháme nic označené a zvolíme *Remove*.

Crystal Cell.. otevře dialogovou tabulku. V záložce *Preferences* se doporučuje zachovat *Symmetry Style* (styl symetrie) na *Positions* a *View Range* (rozsah zobrazení, tj. počet replik) na jedničce pro A, B i C. ^[2] Mezi další možnosti *Symmetry Style* patří *Default* (výchozí), *One Cell* (jedna buňka) nebo *Original* (původní). V záložce *Cell Parameters* si nastavujeme parametry krystalové buňky či celého zobrazového systému (boxu). Možnosti zobrazení buňky nastavíme v záložce *Style*, kde máme na výběr z barvy buňky nebo stylu zobrazení (*Off*, *Line*, *Stick*).

Element Properties.. nám zobrazí periodickou tabulku prvků. Pokud máme označený nějaký atom, můžeme ho díky této tabulce změnit na jiný atom prvku. Dá se zde také změnit barevné označení prvků a jejich VDW poloměr.

Enter Command.. zobrazí textové okno pro psaní příkazů. Touto pokročilou volbou se v této práci nezabývám, stejně jako související následnou volbou

Play Script.. slouží pro spouštění skriptů.

Modify (modifikace, změny) obsahují možnosti změn v molekule. U volby *Element* jsou vypsané nejvíce používané prvky atomů a je zde odkaz i na periodickou tabulku prvků. Pokud označíme v molekule jeden nebo více atomů, touto nabídkou můžeme změnit atom prvku na jiný.

Bond slouží ke změně vazby na Single (jednotná), Double (dvojná), Triple (trojná), Aromatic (aromatická) a Partial Double (částečná dvojná). Označíme si vazbu, kterou chceme změnit a pomocí Bond ji změníme.

Charge viz Charge u DS Visualizer 3.0

Hybridization (hybridizace) mění hybridizaci, tzn. prostorovou orientaci elektronových orbitalů označeného atomu a jejich energii. *sp* odpovídá lineární geometrii, *sp²* trigonální geometrii (rovnostranný trojúhelník) a *sp³* tetraedru.

Insert Atom (vlození atomu) použijeme, pokud budeme chtít mezi dva atomy spojené vazbou přidat ještě další. Provedeme to tak, že označíme vazbu, do které budeme chtít atom vložit a vybereme v nabídce Insert Atom.

Contract Bond naopak slouží k vyjmutí přilehlého atomu z vazby. Můžeme tak například šestičlenný heterocykl převést na pětičlenný.

Fuse slučuje atomy nebo vazby z více molekul. Máme otevřenou jednu molekulu a pomocí Paste from k ní otevřeme jinou. Označíme si na každé molekule jeden atom nebo vazbu a použijeme Fuse.

Align Structures (zarovnání struktury) nabízí jako jednu z možností *Define Tether*. Otevřeme si v programu nějakou molekulu a k ní si pomocí Paste from přidáme další. Označíme si dva atomy, z každé molekuly jeden. Přes možnost Define Tether se nám atomy očíslovají stejným číslem. Tento krok provedeme ještě tak dvakrát a poté zvolíme *Align Molecules*. Obě molekuly se nám zarovnají. Možnost *Hide Tethers* nám čísla u atomů nebo vazeb schovají. Naopak *Show Tether Lines* nám je zpět ukáže.

Clean Structure vyčistí geometrii vybraných nebo všech molekul v prohlížeči. Pokud vybereme některé atomy, program vyčistí geometrii těch molekul, do kterých

tyto atomy náleží. Způsob vyčištění geometrie závisí na nastavení v položce *Sketch and Clean* popsané výše. Sketch a Clean nastavují možnosti čištění.

Window obsahuje *New 3D Window* (nové 3D okno), které nám otevře nové 3D okno s načtenou molekulou a všemi úpravami, které provádíme v prvním okně.

New Hierarchy Windows (*Ctrl + H*) zobrazí okno, ve kterém je reprezentována celá struktura molekuly. Jsou zde vypsané a pojmenovány všechny části molekuly a všechny atomy. Pokud bychom chtěli vidět vazby, použijeme pravé tlačítko myši. Okno hierarchie je založeno na systému jednotek a podjednotek.

New Data Table (*Ctrl + G*) otevře tabulku, ve které jsou všechny informace o molekulě, kterou máme v programu načtenou. Tabulka obsahuje několik záložek, například Cell, Amino Acid Chain, Atom, Bond, Chain (řetězec), Label, Hbond Monitor a další.

	Name	ID	Parent
1	Backbone	0	alanin
2	Sidechain	0	alanin
3	Hydrophobic	0	alanin
4	Hydrophilic	0	alanin
5	Acidic	0	alanin
6	Basic	0	alanin

◀ ▶ ↻ ↻ AminoAcidChain ↻ AminoAcid ↻ Atom

Obrázek 8

Cascade uspořádá otevřená okna do kaskády, *Tile Horizontal* nad sebe, *Tile Vertical* vedle sebe a *Tile Molecules in Window* položí všechny načtené molekuly v okně vedle sebe.

Arrange Icons uspořádá ikony.

Close All zavře všechny okna načtených molekul.

Výčet formátů pro import

MSV, PDB, MOL, CAR, CSD, MSF, MSI, CPD, CHM, CIF, XYZ, SKC, GRD, SMI

Výčet formátů pro export

PDB, MDL, CPD, CHM (Accelrys, catalyst) soubor, SMI (SMILES), XYZ, GIF, JPEG, BMP, PNG, VRML,

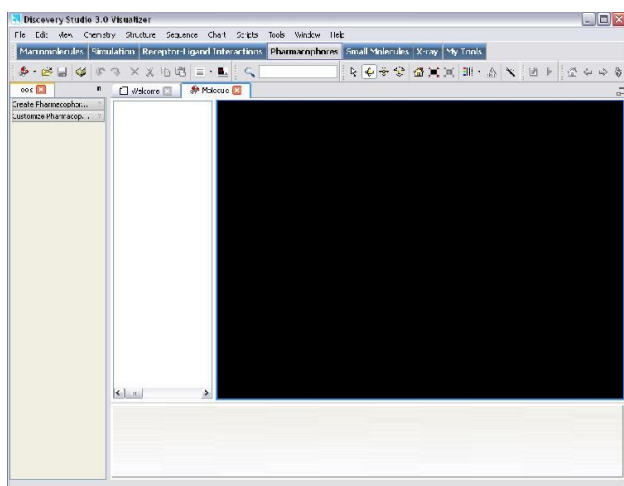
POV-Ray – soubor může být importován do POV-Ray ray tracing programu pro vytvoření vysoce kvalitního obrázku

3.2 DS Visualizer 3.0

Základní informace

DS Visualizer je produkt společnosti Accelrys, součást skupiny programů tvořících Discovery Studio. Jde o zcela bezplatný produkt, který se průběžně aktualizuje. Já pracuji s verzí DS 3.0 Visualizer. Oproti DS ViewerPro má tato aplikace mnoho různých vylepšení a funkcí.

Popis programu



Aplikace používá pouze jedno okno

Obrázek 9

Základní ovládání

Základní ovládání je totožné s ovládáním u programu DS ViewerPro 5.0. Pro označování objektů v molekule používáme výběrový kurzor, pro otáčení molekuly používáme rotační nástroj, pro přesun molekuly translační nástroj a pro přiblížení a oddálení slouží zoom. Všechny najdeme na nástrojové liště.

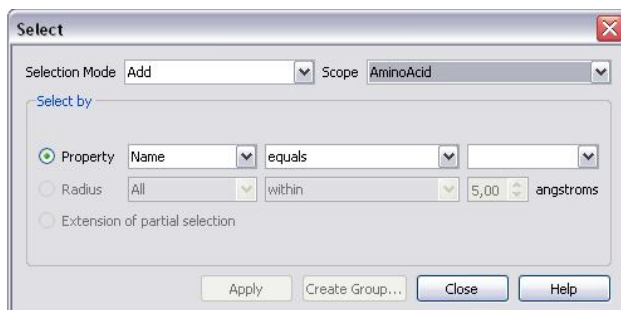
Menu nabídka a její funkce

File (Soubor) nabízí možnosti New (nový), která obsahuje *Molecule Window*, *Protein Sequence Window*, *Nucleotide Sequence Window* a *Script Window*. Pro nás bude standardní okno *Molecule Window*. Open (Otevřít)(*Ctrl + O*) otevře tabulku pro načtení molekuly do programu. Insert From (Vložit z) nabízí možnosti File (soubor), URL (internetová adresa), SMILES, který přidá molekulu z řetězce. Close (*Ctrl + W*) zavře okno s načtenou molekulou. Save (*Ctrl + S*) a Save As... uloží molekulu do souboru. Page Setup... nás zavede do nastavení stránky. Print Preview nám zobrazí rozložení stránky před tiskem. Print (*Ctrl + P*) otevře nastavení tisku. Pokud budeme chtít stránku zaktualizovat, vybereme možnost Refresh (*F5*). Properties zobrazí dialogové okno stejně jako DS ViewerPro 5.0. Nabídka File obsahuje i Recent Files (poslední soubory), tedy naposledy prohlížené soubory. Exit (*Alt + F4*) ukončí celý program.

Edit zahrnuje Undo Select (krok dozadu) (*Ctrl + Z*) a Redo (krok dopředu) (*Ctrl + Y*). Dalšími klasickými možnostmi jsou Cut (vyjmout) (*Ctrl + X*), Copy (kopírovat) (*Ctrl + C*), Paste (vložit) (*Ctrl + V*) a Delete (smazat) (*Del*).

Paste Special (Vložit jinak) lze použít, pokud pracujeme v *Sequence Window*.

Select All (Vybrat vše) (*Ctrl + A*) označí celou molekulu, Select... (*Ctrl + E*) zobrazí Select dialogové okno. Zde provedeme komplexní výběr a výběr objektů, které lze velmi těžko označit myší.



Obrázek 10

Zvolíme si rozsah z nabízených možností AminoAcid (aminokyselina), AminoAcidChain (aminokyselinový řetězec), AngleMonitor (úhel zobrazení), Atom, Bond (vazba), Cell (buňka), DistanceMonitor (zobrazení

vzdálenosti), Group (skupina), Label (štítky) a Molecule (molekula). Výběr můžeme provést pomocí vlastností. K dispozici máme Name (název) pro vlastnosti equals (je rovno), does not equal (není rovno), begins with (začíná s), does not begin with (nezačíná s), matches expression (odpovídá výrazu) a does not match expression (neodpovídá výrazu). Pro ID odpovídá equals (je rovno) a does not equal (není rovno), pro Visibility (viditelnost), Type (typ) a Secondary Type platí to samé.

Invert Selection (obrátit výběr) slouží k obrácení výběru. Pokud máme označenou část molekuly a zvolíme Invert Selection, označí se zbytek molekuly a naše označená část přestane být označena. Provedeme něco jako negativ.

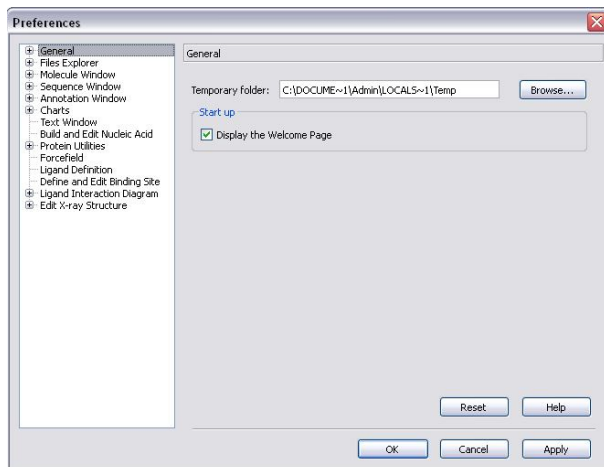
Group... slouží k označení skupiny pro vybranou část molekuly. Nejprve označíme část molekuly, poté zvolíme Group... a napíšeme název skupiny.

Find... (*Ctrl + F*) umožňuje nalezení textového řetězce v aktuálním dokumentu.

Add Attribute... (přidání vlastností) zobrazí dialogové okno, kam můžeme přidávat atributy.

Attributes... zobrazí dialogové okno (viz DS ViewerPro5.0, Edit → Properties)

Preferences... (předvolby) nabízí možnost úpravy široké palety funkcí v programu.



Obrázek 11

View obsahuje Display Style... (*Ctrl + D*) který zobrazí tabulku. V záložce *Atom* změním styl zobrazení na bez stylu zobrazení, Line, Stick, Ball and Stick, Scaled Ball and Stick, CPK nebo Polyhedron. Je zde možnost změny parametrů jako jsou Stick size, Ball size nebo CPK scale (měřítko). Dále můžeme atom obarvit buď podle Element (prvek), kdy každý prvek atomu má svoji definovanou barvu, Parent Color (Rodičovská barva) udává atomu barvu podle objektu, kterému náleží, Carbons Only (pouze uhlíky) předá barvu uhlíků, Molecule Color obarví atomy podle toho, které molekule náleží, AminoAcidChain (aminokyselinový řetězec) dodá barvu jednomu řetězci, další řetězec bude mít jinou barvu. Další možností je obarvení molekuly podle Partial Charge (parciální náboj), ID, Isotropic Displacement (izotropní posunutí), Molecular Volume (molekulární objem) a Weight (hmotnost), Net Formal Charge (Formální náboj), Net Partial Charge (parciální náboj), Number of atoms (počet atomů), Occupancy (obsazenost), Resolution (rozlišení), Tagged (označený), Visibility Locked (viditelnost) a podle X, Y a Z. Záložka *Protein* obsahuje styly zobrazení Ca Wire (drát), Off (vypnuto), Ca Stick, Line Ribbon, Flat Ribbon (ploché), Solid Ribbon (pevné pásky), Tube (Trubice) a Schematic. Obarvení se provádí podle residua, hydrophobicity (hydrofóbnost), pKa (hodnoty residua), CAlpha (obarvení residua podle obsaženého atomu alfa uhlíku), Secondary

Type (Barva podle sekundární struktury – šroubovice červené, beta listy azurové, závitky zelené a cívky bílé), AminoAcidChain (aminokyselinový řetězec), podle molekuly a Cell (buňka).

Lighting upravuje směr světla a barvu. Můžeme si vybrat ze čtyř světél a dokonce všechny čtyři najednou. Nemají ale žádný vliv na Lines zobrazení. Ambient Shadow (okolní stín) upravuje míru stínů z okolních prvků. Direct Shadow intenzitu stínů od světelného zdroje. Depth Blur (Hloubka rozostření) zlepšuje realistické vidění, pokud zanedbáváme vzdálenost. Hloubka rozostření je minimální ve středu zobrazení molekuly, naopak na přední a zadní ořezové rovině je maximální. Atom Outline (atomová osnova) pomáhá vizualizovat atomy tím, že je ohraničí.

V záložce *Materials* můžeme nastavit vlastnosti materiálu molekuly, což nám umožňuje pět posuvných lišt. Ambient (okolní) osvětí celou molekulu světlem beze směru. Diffuse (difuzní) nastavuje intenzitu světla. Umístění Specular (zrcadlový) světla je určováno směrem světla. Emission (emisní, vyzařující) dává objektu schopnost emitovat světlo. Shininess (odlesky) určuje, jakým způsobem objekt světlo odráží. Okno zobrazuje ještě předvolby materiálů jako Chalk (křída), Metallic (kov), Plastic (plastová hmota) a Rubber (pryž, guma).

Cell se objeví v Display Style pouze tehdy, pokud jsou v načtené molekule buňky. Pokud budeme mít označenou možnost Off, mřížka bude vypnuta, Line zobrazí mřížku s linkami a Stick sestaví mřížku z tyčí. Poloměr tyče zvolíme v kolonce Stick Radius. Label Axes nám zobrazí štítky os buňky a Color (barva) obarví linie buňky.

Color... otevře dialogové okno, ve kterém můžeme změnit barvu námi označeného objektu v molekule.

Transform (Transformace) nabízí možnosti jako *Zoom in* (zvětšit), který zvětšuje molekulu tak, že ji k nám přibližuje. *Zoom Maximum* zvětšuje zobrazení molekuly s cílem ukázat individuální residua. *Zoom out* zmenšuje molekulu na bázi vzdalování objektů od nás směrem pryč. *Reset Zoom* zruší všechny zoomy a vrátí molekulu zpět do původního zoomu. *Reset Rotation* zruší všechny námi provedené rotace molekuly. *Fit to screen* přenáší molekulu do středu obrazovky a velikost molekuly přizpůsobí obrazovce.

Center vybere geometrický směr celé molekuly nebo jen označeného objektu a vycentruje ho do středu obrazovky.

Spin spustí rotaci molekuly. Pokud budeme chtít otáčení zastavit, znovu klepneme na možnost spin nebo budeme rotaci molekuly ovládat přímo v grafickém okně myší. Metodou stisknout a táhnout můžeme rotaci molekuly zrychlovat, zpomalovat nebo otočit směr otáčení. Pokud budeme chtít rotaci vypnout, dvakrát poťukáme myší. *Rock* (houpat) rozhoupe molekulu podle osy Y. Pokud budeme chtít molekulu zastavit, stiskneme Rock znovu. Při zvolení *Wiggle* (kývání) se molekula zase kývat ze strany na stranu podél osy Y. Tato možnost je velmi podobná té předchozí s rozdílem, že tato má větší rychlost a menší úhel. Pokud budeme chtít kývání zastavit, zvolíme opět možnost Wiggle.

Storyboard pořídí snímek aktuální transformace molekuly a zobrazí se v Storyboard okně. Tato možnost nám může posloužit, pokud se budeme chtít zpětně podívat na nějakou transformaci molekuly. Pokud budeme mít snímků pořizovaných více, budou uloženy v tabulce všechny vedle sebe. Můžeme mezi nimi přepínat klasicky šipkami na klávesnici, pokud budeme mít okno Storyboard aktivní nebo zvolením v menu nabídce Rewind (přetočit) (*Ctrl + Home*), *Next Scene* (další) (*PgDown*) nebo *Previous Scene* (předchozí) (*PgUp*). *Storyboard (F12)* nám zobrazí uložené snímky.

Clipping Planes... otevře dialogové okno, kde se nastavují ořezové roviny, pouze u 3D molekul.

Stereo zobrazí molekulu z dvou pohledů, které slouží k vytvoření 3D efektu. *Hardware* zobrazí molekuly v okně jako stereo dvojice. Tato funkce je aktivní pouze tehdy, pokud systém počítače má hardware stereo schopnosti a je pro tuto funkci správně nakonfigurován. *Split Screen Stereo* (Rozdělená obrazovka stereo) vytvoří dva pohledy molekuly, přičemž si zobrazení můžeme vybrat mezi *Crossed eyes* (překřížené oči), při kterém se díváme před dvojicí molekul pro 3D efekt a *Relaxed eyes* (uvolněné oči),

který vytváří 3D dojem při pohledu za zobrazení stereo obrazu. Odpovídající úhel můžeme nastavit v Edit → Preferences v záložce Stereo.

Full Screen (F11) nastaví celoobrazový režim aktuálního okna. Pokud stiskneme pravé tlačítko myši, ukáže se nám nabídka, díky které můžeme manipulovat s molekulou i ve Full Screenu. Dá se zde provádět většina z možných úprav jako je označování objektů, vyjmutí, kopírování, rotace, translace, změna atomu prvku, přidávání štítků, úpravy v Display Stylu a další. Full Screen zavřeme pomocí klávesy F11 nebo Exit.

Visibility (viditelnost) ovládá viditelnost objektů. Visibility nabízí několik možností, musíme nejdříve ale označit nějaký objekt, se kterým chceme pracovat. *Hide* (skrýt) nám označený objekt skryje. Pokud ho budeme chtít zpětně zviditelnit, vybereme *Show* (zobrazit). Show není aktivní, jestliže nemáme žádný objekt schovaný. Kdybychom poschovávali postupně více objektů, Show nám zobrazí pouze poslední skrytý. Všechny skryté objekty tedy vyobrazíme pomocí *Show All* (zobrazit vše). Pokud budeme chtít nechat viditelný pouze označený objekt, zvolíme *Show Only* (zobrazit pouze) a ostatní neoznačené objekty se skryjí. Možnosti *Lock* (zamknout) a *Unlock* (odemknout) umožňují uzamknout nebo odemknout označený viditelný objekt.

Příkaz Graphics (Ctrl + G) patří grafickému oknu.

Hierarchy (Ctrl + H) zobrazí okno, ve kterém je reprezentována celá struktura molekuly. Jsou zde vypsány a pojmenovány všechny části molekuly a všechny atomy. Pokud bychom chtěli vidět vazby, stiskneme pravé tlačítko myši a zvolíme Display Bonds (zobrazí se všechny). Tato tabulka je založena na systému jednotek a podjednotek. Zavřeme ji stejně tak, jak jsme ji otevřeli.

Data Table (Ctrl + T) otevře tabulku, obsahující všechny informace o molekule, kterou máme načtenou. Skládá se z několika záložek, například Molecule (molekula),

Cell (buňka), AminoAcidChain (aminokyselinový řetězec), ProteinSequence (proteinové sekvence), AminoAcid (aminokyselina), Atom, Bond (vazba), Group (skupina) a další.

Name	ID	Visible	Visibility Locked	Parent	Size
1 Backbone	0	<input checked="" type="checkbox"/> Yes	<input type="checkbox"/> No	Protein Groups	50
2 Sidechain	0	<input checked="" type="checkbox"/> Yes	<input type="checkbox"/> No	Protein Groups	10
3 Hydrophobic	0	<input checked="" type="checkbox"/> Yes	<input type="checkbox"/> No	Protein Groups	10
4 Ligand 1	0	<input checked="" type="checkbox"/> Yes	<input type="checkbox"/> No	Ligand Groups	1

Molecule / Residue / Atom / AminoAcid / Bond / AminoAcidChain / ProteinSequence / Group

Obrázek 12

Explorers (průzkumníci) umožňuje přepínání mezi okny *Tools* a *File*. *File* slouží jako zrychlená volba pro import molekul a *Tools* pro nástroje.

Docks (zarovnání do bloku) zarovnává Explorers jako *All* (*Ctrl + 1*), kdy v levé části okna vidíme záložky *Tools* a *File* (pokud je máme aktivní) a pokud na ně ťukneme myší, objeví se detailní nabídka oné záložky. Další možností je *Left* (*Ctrl + 2*). Explorers jsou tak zarovnány v aplikaci vlevo. Docks je aktivní, pokud máme činný alespoň jeden z Explorers.

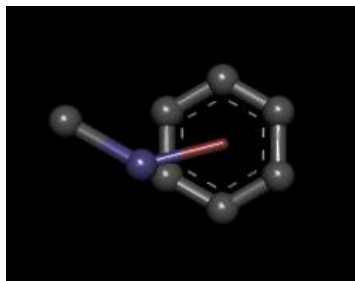
Toolbars řídí viditelnost všech panelů nástrojů. Jedná se o panely: Alignment (zarovnání), Animation (animace), Atom Colors (barvy atomů), Atom Display (zobrazení atomu), Chemistry (chemie), Feature Search (Funkce vyhledávání), Navigation (navigace), Nucleic Acid Structure Display (zobrazení struktury nukleové kyseliny), Protein Structure Display (zobrazení proteinové struktury), Query (dotazy), Scripting (skriptování), Sequence (zaměřuje se na rozložení a vzhled sekvenčního okna), Sketching (kreslení), Standard (zobrazuje běžné příkazy z nabídky *File* a *Edit*), *View* a *Status Bar*.

Chemistry nabídka obsahuje příkazy, které mohou měnit chemickou strukturu molekuly. Příkaz Hydrogens přidá vodíky na správné geometrické místo tam, kde nejsou explicitní vodíky. *Add* vodíky přidá, *Hide* skryje. Označíme si celou nebo část molekuly a zvolíme *Add Polar*, vodíky se přidají do nenaplněných valencí heteroatomů.

Show Polar zobrazí pouze polární vodíky. Na chirální atomy uhlíku dodáme vodíky pomocí příkazu *Add Chiral*. Chirální uhlík nemá rovinu symetrie, může mít pouze její osu. Vztah uhlíku a jeho obrazu je jako vztah pravé a levé ruky, tzn. není totožný se svým zrcadlovým obrazem. *Delete* odebere všechny vodíky z celé nebo jen označené části molekuly.

Element se stane aktivním, pokud označíme minimálně jeden atom a slouží ke změně prvku. *Element* nabízí nejběžnější prvky jako *C, H, O, N, P, S, F* a *Cl*, ale také má k dispozici periodickou tabulku prvků (*Table...*), ze které můžeme vybírat.

Bond mění námi označené vazby. K dispozici máme vazbu *Single* (jednotná), *Double* (dvojná), *Triple* (trojná), *Aromatic* (aromatická) a *Partial Double* (částečná dvojná). Aromatická vazba se používá k označení, že se jedná o aromatický systém. Částečnou vazbou se označuje existence několika rezonančních struktur, ve které je více typů vazeb. Není zde ovšem žádný náznak aromatického systému. Jak docílíme změny vazby? Označíme si jednu nebo více vazeb a pomocí příkazů v menu si vybereme typ.



Obrázek 13

Create π Bond (vytvoření π vazby) vytváří π vazbu. π vazba se účastní vzniku násobných vazeb a její největší elektronová hustota se nachází mimo spojnicí jader. ^[7] Příklad vytvoření π vazby: Nakreslíme si šestičlenný heteroatom a změníme všechny vazby na aromatické. O kousek dál nakreslíme jednu vazbu se dvěma atomy, přičemž jeden atom změníme na železo. Označíme si celý heterocykl a železo a zvolíme *Create π Bond*. Příkaz *Contract* smaže označenou vazbu. Mějme tedy například nakreslený cyklopentan a označme jednu vazbu. Vybereme možnost *Contract* a zrušením vazby se ním z cyklopentanu stane cyklobutan. *Fuse* dokáže sloužit atomy nebo vazby dvou molekul. Provedeme to tak, že označíme atom nebo vazbu jedné i druhé molekuly a zvolíme *Fuse*.

Hybridization (hybridizace) mění hybridizaci, tzn. prostorovou orientaci elektronových orbitalů označeného atomu a jejich energii. Ssp odpovídá lineární geometrii, Ssp² trigonální geometrii (rovnostranný trojúhelník) a Ssp³ tetraedru. Můžeme použít klávesové zkratky 3,2,1.

Stereochemistry se stane aktivním, pokud budeme mít označenou alespoň část molekuly. Přiřazuje uhlíku chiralitu S, R nebo neznámou.

Charge (náboj) obsahuje nastavení pro formální náboj atomu, ale umí také vypočítat Gasteiger parciální náboj pro vybrané atomy. Pokud nemáme vybrané žádné atomy, výpočet je pak proveden pro celou molekulu. Změna formálního náboje může být využita ke změně valence atomu. Příkazy +1 a -1 zvyšují nebo snižují formální náboj vybraného atomu. 0 nastaví náboj atomu na 0. Pokud je nějaký formální náboj přiřazený atomu podroben výpočtu parciálního náboje, bude přidán počátečnímu parciálnímu náboji Gasteiger – Marsili metodě. Součet konečných vypočtených parciálních nábojů se bude rovnat součtu formálních nábojů.

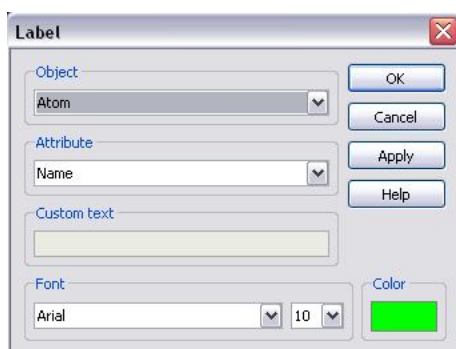
Insert Atom (Vložení atomu) vloží atom mezi dva označené atomy nebo do označené vazby.

Oxidation State (oxidační stav) umožňuje označit oxidační číslo k vybranému atomu. K dispozici máme oxidační čísla *-I* až *VIII*.

Calculate Basic Properties (Počítání základních vlastností) počítá tyto vlastnosti: Number of Atoms (počet atomů), Molecular Formula (molekulární vzorec), Molecular Composition (molekulární složení), Molecular Weight (molekulární hmotnost), Exact Mol. Weight Přesná mol. Hmotnost) a Net Formal Charge (formální náboj). Všechny tyto informace se jsou zapsané v datové tabulce.

Element Properties... zobrazí periodickou tabulku prvků, ve které dvojklikem levého tlačítka myši otevřeme další okno, ve kterém můžeme změnit barvu prvku a VDW poloměr. Restore Defaults (Obnovit výchozí) obnoví výchozí nastavení.

Structure (struktura) menu obsahuje příkazy, které mění strukturu molekuly.



Obrázek 14

Labels nabízí možnost Add, která zobrazí dialogové okno. Seznam Object zahrnuje všechny typy objektů, které můžeme v naší otevřené molekule najít. Do objektů patří Cell (buňka), Molecule (molekula), Atom, Bond (vazba), Amino Acid (aminokyselina), Amino Acid Chain (aminokyselinový řetězec), Distance Monitor. Attribute obsahuje seznam atributů, které jsou specifické pro naší vybraný objekt v této tabulce. Objeví se zde například Name (název), ID, Color (barva), Parent (nadřazený objekt), Partial Charge (parciální náboj), XYZ, Isotropic Displacement (izotropní posunutí). Můžeme také využít kolonku Custom Text (vlastní text). Nakonec je zde také možnost nastavení barvy písma štítku, velikost a typ fontu. Naopak možnost Label obsahuje i *Remove*, který odstraní všechny záložky. Pokud budeme mít označenou část molekuly, štítky se přiřadí pouze oné části. Bez označení se štítky přidají celé molekule.

Další nabídkou je Monitors. Možnost *Distance* (vzdálenost) nám slouží k měření vzdálenosti mezi dvěma libovolnými objekty. Nejprve označíme dva objekty s podržením klávesy Shift a zvolíme Distance. Objekty nám spojí štítek a zobrazí se nám jejich vzdálenost v jednotkách Ångström ($1 \text{ \AA} = 10^{-10} \text{ m}$). Pokud jeden z objektů posuneme, program automaticky vzdálenost přepočte. (viz 4. Modelové úlohy)

Angle slouží k měření úhlu mezi třemi atomy. Pro měření úhlu máme více způsobů. Můžeme označit tři atomy (s pomocí Shiftu), dvě vazby nebo jeden atom a jednu vazbu. Následně zvolíme Angle v nabídce menu a zobrazí se nám úhel ve $^{\circ}$. (viz 4. Modelové úlohy)

Torsion monitor zobrazuje torzní úhel mezi čtyřmi atomy. Máme opět více možností. Můžeme označit jednu vazbu, dvě vazby, které jsou od sebe ob jednu vazbu, tři sousední vazby, jednu vazbu a dva sousední atomy nebo čtyři atomy. Poté zvolíme *Torsion*. Pokud provede menší změnu geometrie molekuly, torzní úhel se automaticky přepočítá. (viz 4. Modelové úlohy)

Centroid nám umožňuje najít těžiště. Pokud označíme celou molekulu, najde nám těžiště oné molekuly; pokud pouze část, ukáže se nám těžiště právě vybrané části molekuly. Těžiště se nám zobrazí zeleně.

HBond (vodíková vazba) vzniká u sloučenin, ve kterých se atom vodíku váže na atomy prvků o vysoké elektronegativitě (fluor, kyslík, dusík). Tyto atomy obsahují volný elektronový pár. Vodíkové vazby se nám zobrazují buď v celé molekule nebo mezi označenými atomy přerušovanými zelenými čarami. Zde lze označit pouze jedna vodíková vazba. V Data Table (View → Data Table) v záložce *HBondMonitor* můžeme vidět počet vodíkových vazeb v molekule, měnit jejich atributy a v záložce *HBond* máme všechny vazby vypsané i s jejich vlastnostmi. Pokud změním pozici atomu, který nese vodíkovou vazbu, vazba bude automaticky přepočítána.

Intermolecular HBonds (mezimolekulární vodíkové vazby) jsou zobrazování mezi jednotlivými řetězci ve stejné molekule a mezi různými molekulami. Ve všem ostatním jsou stejné jako *HBonds*.

Bumps se snaží sblížit existence atomů vodíků, které nemají naplněnou valenční vrstvu. Ukazují se jako růžové přerušované čáry. Zobrazují se mezi označenými atomy nebo mezi všemi. Můžeme změnit atributy v Data Table.

Neighbors spojí zelenými čarami všechny sousední atomy s atomem, který my označíme. Nemusí se ale vůbec jednat pouze o jeden atom. Tento příkaz je tedy aktivní, pokud v grafickém okně je více než jeden atom a minimálně jeden máme označený. V dialogovém okně *Attributes...* můžeme změnit práh vzdálenosti sousedních atomů, výchozí hodnota je 5,0 Å. Ke zrušení zobrazení sousedních atomů použijeme jako u všech ostatních funkcí v záložce *Monitors Remove*.

Intermolecular Neighbors platí pro atomy, jež jsou z různých řetězců a molekul. Jinak fungují stejně jako *Neighbors*.

Dipole Monitor (dipólový moment) zobrazí vektor dipólového momentu. „Tento vektor je míra polarity molekuly a závisí na částečném rozložení náboje. Dipólový moment se vypočte jako:

$$D * \sum_{(i)} q_i (R_i - C);$$

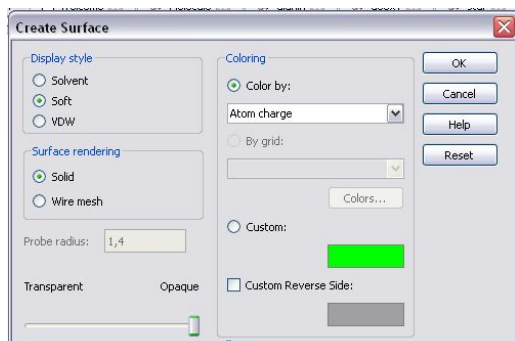
kde q_i je parciální náboj i -tého atomu, R_i jsou 3D souřadnice i -tého atomu, C je 3D souřadnice středu náboje, D je zkratka pro Debye jednotku. Platí:

- 1 Debye = 3.335641×10^{-30} Cm (coulomb-meters)
- 1 e = 1.602176×10^{-19} C (coulomb)
- 1 Å = 10^{-10} m (meters)^[27]

Možnost *Chirality* (chiralita) označí chirální atomy písmenky „R“ nebo „S“.

Valence platí pro označenou část molekuly nebo pro celou. U atomů s nenaplněnou valencí se objeví azurovým rámečkem, červený rámeček se nakreslí k atomům s přeplněnou valencí.

Animation obsahuje možnosti Play (hrát), Create (Vytvořit), Remove (Odstranit) a Load... (načíst).



Obrázek 15

Surface nabízí možnosti *Add* a *Remove*.

Nejdříve označíme ty atomy, u kterých budeme chtít vyrobit povrch a *Add* otevře dialogové okno, ve kterém si nastavíme zobrazení povrchu. Pokud nebudeme mít nic označené, povrch se vytvoří na celé molekule. *Display Style* zvolí styl zobrazení povrchu. Nabízí se

zde možnosti *Solvent* (rozpuštěný, solventní), *Soft* (měkký) a *VDW*. Jako *Surface rendering* (možnosti povrchu) můžeme vybírat z *Solid*, který vytváří pevný povrch nebo *Wire mesh* (drátěné pletivo), který molekulu zobrazí jako pletenec drátů. *Probe Radius* (sonda poloměru) udává změnu poloměru pro solventní povrch. Výchozí hodnota je 1,4 Å. *Transparent* (průhlednost) určuje posuvníkem úroveň průhlednosti. Posouváním

[27] Menu Structure Monitor Dipole; dostupný z help: qthelp://accelrys.discoverystudio.30.Client_dsv/Client/menu_structure_monitor_dipole.

doprava se snižuje průhlednost povrchu. Reverse Side (zadní, rubová strana) zaškrtneme, pokud budeme chtít povolit průhlednost zadní strany povrchu. Coloring (zbarvení) může obarvit povrch podle: Parent Color (rodičovská barva), Interpolated Charge (interpolovaný náboj), Atom Charge (atomový náboj) nebo Atom Color (barva podle atomu). Obarvení by Grid (podle souřadnice) zabarví plochy pomocí 3D souřadnic. Můžeme si zvolit vlastní barvu přes Custom (vlastní). Díky Custom Reverse Side (vlastní zadní strana) přiřadíme vlastní barvu zadní straně povrchu. Zbývá vybrat typ povrchu. Closed (uzavřený) je povrch zakrývající všechny atomy. Opakem je povrch Open (otevřený). Pokud budeme chtít povrch zrušit, vybereme *Remove*.

Solvent Accessibility... (Dostupnost rozpouštědla) počítá dostupnost rozpouštědla proteinových reziduí. Výpočet se provádí pro všechny vybrané rezidua. Výsledky jsou zobrazeny v tabulce Data View.

Query Features... zobrazí dialogové okno, které použijeme k přidání Catalys nebo ISIS funkce do 3D dokumentu. Pomocí Query Features můžeme vytvořit funkce se specifikovaným názvem nebo atributy. Funkcemi, které nám Query Features pomůže vytvořit mohou být Angle (úhel), Centroid (těžiště), Dihedral (dihedrální úhel), Distance (vzdálenost), ExclusionSphere, Line, Location (lokalizace), Normal, RingAromatic, Plane, Point, PointOffset, Acceptor (akceptor), Donor (dárce), Shape (tvar), QueryAtom, QueryBond nebo Vector (vektor).

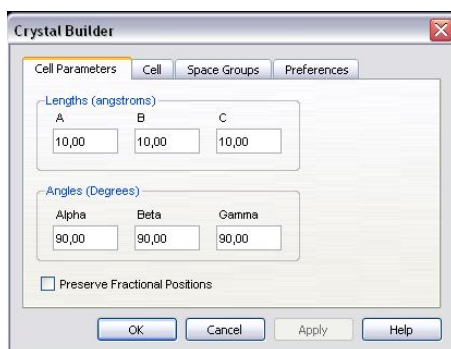
Show by Radius... (zobrazit poloměrem) použijeme, pokud budeme chtít zvětšit poloměr atomu. Tuto možnost můžeme použít pro všechny atomy v molekule nebo i jen pro část molekuly. Nejprve označíme atomy, u kterých budeme měnit poloměr, a pak zvolíme Show by Radius... a do tabulky udáme velikost poloměru.

Update Coordinates (aktualizace souřadnic) slouží k aktualizace souřadnic například po rotaci nebo translaci, kdy se souřadnice sami nezmění.

Clean Geometry vyčistí geometrii vybraných nebo všech molekul v prohlížeči. Pokud vybereme některé atomy, program vyčistí geometrii těch molekul, do kterých tyto atomy náleží. Tuto možnost můžeme upravit v Preferences → Molecule Window → Sketch and Clean. Můžeme si zde vybrat z nabídek Clean only selected atoms (vyčistit pouze vybrané atomy), Include intermolecular forces (zahrnout intermolekulární síly) a Perceive and update aromaticity (vnímat a aktualizovat aromaticitu). Zvolit můžeme všechny tři nabízené funkce najednou.

Superimpose (překrýt) nám nabízí možnosti Add Tether, Remove Tethers, By Center of Geometry, By Tether, Edit Transformation Matrix... a Apply Transformation Matrix... By Center of Geometry (podle centra geometrie) vypočítává střed vybrané molekuly, všechny molekuly, které nejsou obsaženy v krystalové mřížce se přemístí a pak se provede zobrazení. Otevřeme si dvě molekuly, které chceme porovnávat. Pomocí By Tether označíme vždy jeden atom z obou molekul, měly by stačit označit v každé molekule asi čtyři. Poté zvolíme Alignment (zarovnat).

RMSD umožňuje vypočítat RMSD struktury vzhledem k porovnávané struktuře. *All Atoms* (všechny atomy) vypočítává RMSD pro všechny atomy v okně, *Heavy Atoms* (těžké atomy) pro všechny těžké atomy a *Set Reference* provádí nastavení. Tyto příkazy slouží pro malé molekuly. Tato nabídka nám umožňuje ještě příkazy *Biopolymer Structures...* (biopolymerní struktury) a *By Sequence Alignment* (od sekvenčních urovnání). *Biopolymer Structures...* vypočte RMSD pro biopolymerní strukturu a různé konformace jedné struktury. Otevřeme si dva polymery do jednoho grafického okna, obě molekuly označíme, vybereme příkaz a zvolíme, které atomy budou pro výpočet použity. *By Sequence Alignment* vypočítá RMSD pro soubor sekvencí a zarovná proteinové struktury buď podle vybrané porovnávané struktury nebo podle všech.



Obrazek 16

Crystal Cell nabízí možnosti *Create Cell* (vytvořit buňku), *Edit Parameter...* (úpravy parametrů), *Create Atom...* (vytvořit atom), *Make P1* a *Remove Cell*. *Create Cell* nám vytvoří standardní buňku o rozměrech 10 Å a úhlech 90°. *Edit Parameter...* nám zobrazí dialogové okno, kde můžeme nastavit všechny parametry buňky (viz *Crystal Cell* u *DS ViewerPro 5.0*). *Create Atom...* dokáže atomu vytvořit souřadnice. Možnost *Make P1* odstraňuje symetrie a periodicity z vybraných atomů, které vznikly rozšířením buňky. Možnost *Remove Cell* nám buňku z grafického okna odebere.

Show 2D Structure otevře nové okno s molekulou ve 2D struktuře.

Sequence upravuje nukleové kyseliny a proteiny. *Chain* (vazba) nabízí možnosti *Swap Domains*, která mění pořadí po sobě jdoucích dvou řetězců. Před provedením příkazu musíme vybrat alespoň jedno reziduum v každém řetězci. *Insert Chain Break* vkládá řetězec do proteinové sekvence. Umístíme kurzor mezi dvě rezidua nebo označíme dvě rezidua a vložíme řetězec. *Remove Chain Break* odebere vybrané řetězce. *Shift Domain Up* posouvá řetězce do bloku. *Shift Domain Down* posouvá vybrané řetězce na další domény. *Copy By Alignment* kopíruje řetězce od zdroje sekvence. Tyto příkazy jsou aktivní v *Sequence Window*, při zvoleném stylu zobrazení *Chain*.

Gaps (mezery) obsahuje *Remove Gaps*, který odstraní mezery z vybrané části sekvence, *Remove Aligned Gaps* odstraní mezery z pozic, kde všechny sekvence obsahují mezery. Tento příkaz můžeme použít pro odstranění velké mezery, aniž by došlo ke změně nastavení. *Insert Gaps from PDB Info* vkládá mezery při porovnání s informací v PDB souboru. Tento příkaz funguje pokud je sekvence spojená se strukturou.

Features (Funkce) se skládají z příkazů *Add* (přidat), *Edit* (upravit), *Remove* (odstranit), *Join* (připojit) a *Split* (rozdělit). *Add* otevře funkce v editorovém dialogu, který umožňuje vytvářet nové funkce. *Edit* v tomto dialogu mění pořadí funkcí. *Remove* odstraňuje zvolené prvky sekvence. *Join* připojuje dva nebo více vybraných prvků a vytváří takovou posloupnost funkcí. *Split* dělí funkce s více částmi do nových sad funkcí.

Strand (vlákno) umožňuje vybrat sekvenci nukleové kyseliny, upravit ji a provádět na ni základní operace orientace. *Reverse* obrátí sekvenci nukleové kyseliny. *Complement* převádí vybrané sekvence nukleových kyselin k jejich doplnění. *Reverse Complement* převádí vybrané sekvence na opačný doplněk.

Rename Sequence... přejmenovává sekvence.

Alignment obsahuje příkazy pro zarovnání sekvence. *Update Alignment* aktualizuje zarovnání sekvencí. *Create from Superimposed Proteins* vytváří nový protein. Musíme k tomu ale mít otevřené dva proteiny v jednom okně. *Calculate Similarity Matrix* počítá sekvenční podobnosti mezi dvojicemi sekvencí. Výsledky jsou zobrazeny v tabulce Table View. *Calculate Identity Matrix* počítá sekvenční identity mezi dvojicemi sekvencí. Výsledky budou v Table View.

Secondary Structure předpovídá sekundární strukturu vybraným proteinovým sekvencím nebo všem. Pokud není vybraná žádná, přijde na řadu metoda DSC, přičemž její výstup se zobrazí v textovém okně.

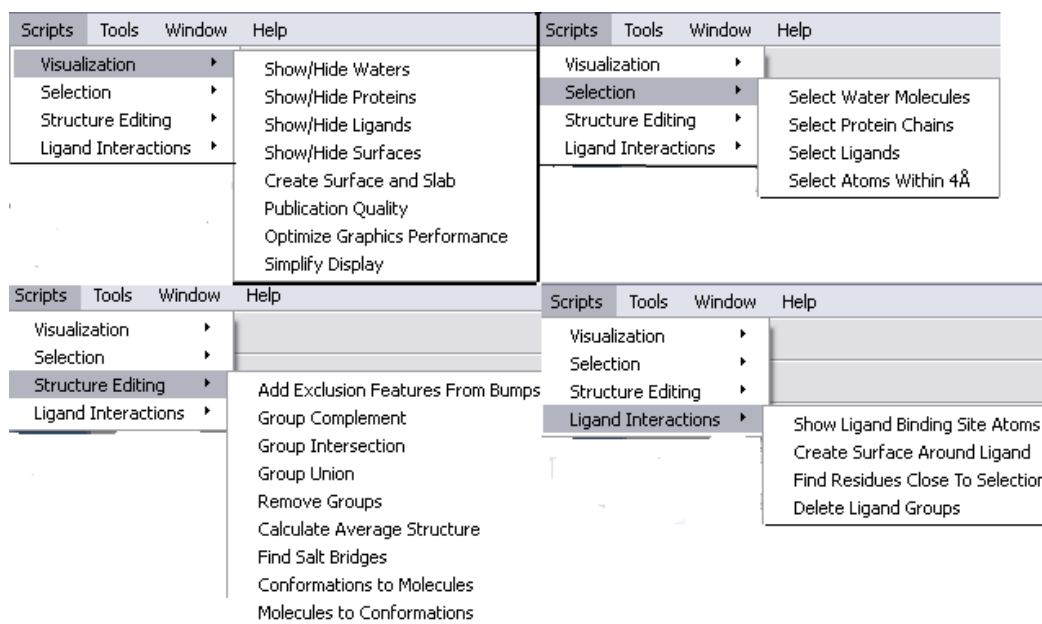
Translation překládá sekvence nukleových kyselin do sekvencí aminokyselin (do nového okna sekvence)

Show Sequence (*Ctrl + Q*) umožňuje zobrazit všechny sekvence bílkovin a nukleových kyselin do nového okna.

Show Annotations umožňuje upravovat a zobrazovat pořadí anotací.

Chart (graf) umožňuje sestavení grafů. Line Plot obsahuje datové body ve 2D. The Point Plot zobrazuje data ve 2D, ty jsou používány ke zkoumání vztahů mezi molekulárními vlastnostmi aktuálně načtených molekul. 3D Point Plot zobrazuje data ve 3D a mají stejný účel jako 2D Point Plot. Heat Map zakresluje mapu tepla- Jedná se o dvou-dimenzionální barevnou mapu.

Script nabízí možnosti pro běžné úkoly. Tuto nabídku si můžeme přizpůsobit vlastním potřebám, tzn. zahrnout naše skripty, odstranit skripty nebo skrýt. Pro přehled viz obrázek.



Obrázek 17

Tools panel obsahuje nástroje pro běžné používání. Jsou rozděleny do oblastí. Macromolecules nabízí možnost *Build and Edit Nucleic Acid* (stavba a úpravy nukleových kyselin), *Build and Edit Protein* (stavba a úpravy proteinu). U obou těchto možností se nám v levé části programu otevře nabídka Tools s potřebnými nástroji. *Superimpose Proteins* slouží k překrývání proteinů, což můžeme použít pro

porovnávání dvou proteinů. *Search Side-Chained Rotamers* slouží k hledání postranních řetězců rotamerů. *Pharmacophores* obsahuje *Create Pharmacophore Manually* a *Customize Pharmacophore Features* (přizpůsobení funkcí). Tato možnost v menu slouží k vytváření Pharmacophore modelů z ligandu, receptoru nebo receptoru-ligand komplexu. Tyto nástroje můžeme také využít k analýze. Dále můžeme přizpůsobovat Pharmacophore funkce. *Receptor-Ligand Interactions* se používají pro analýzu vazebných míst receptorů a fragmentů. Nabízí možnosti *Define and Edit Binding Site* (vymezení a úpravy vazebných míst) a *Analyze Complexes* (analýza komplexů), *Simulation* (simulace) nástroje se používají pro spouštění simulace a analýzu výsledků. Nabídka Simulation obsahuje *Setup Constraints* (změna nastavení) a *Change Forcefield* (omezení silového pole). *Small Molecules* nabízí nástroje pro *Sketch Molecules* (kreslení molekul), *Build Fragment* (stavbu fragmentu), *Align Small Molecules* (zarovnání malých molekul) a *Molecule Browser* (prohlížeč molekul). *X-ray* dokáže kontrolovat abnormality proteinových struktur a stavět a vylepšovat struktury bílkovin podle elektronové hustoty. Poskytuje k tomu možnosti *Edit X-ray Structure* a *Navigate and Label 3D Structure*.

Window (okno) menu nabízí možnost zobrazování oken. *Synchronize Molecule Windows* (synchronizace molekulového okna) slouží k tomu, aby ve všech oknech otevřenými molekulami byly struktury stejně natočené, přeložené, zvětšené apod. *Close All* zavře všechny načtené molekuly. *Choose...* (Ctrl + Tab) umožňuje přepínání mezi okny s otevřenými molekulami. *Arrange Windows* nám nabízí možnosti uspořádání oken s otevřenými molekulami.

Výčet formátů pro import a export

Tabulka 1

Extension	Type	Import/Export
.aaa_bsml	Bioinformatic Sequence Markup Language (BSML)	Import and Export
.aas_bsml	Bioinformatic Sequence Markup Language (BSML)	Import and Export
.align	BIOSYM Alignment (ALIGN)	Import and Export

.aln	Clustal Alignment and QUANTA Alignment (ALN)	Import and Export
.bat	Text	Import and Export
.bdp	Text	Import and Export
.bmp	Bitmap (BMP)	Export
.bsml	Bioinformatic Sequence Markup Language (BSML)	Import and Export
.car	Insight II and Discover Cartesian Coordinate (CAR, COR, MDF)	Import
.cfg	Text	Import and Export
.chm	CHM Catalyst Query (CHM)	Import and Export
.cif	Crystallographic Information (CIF)	Import
.cor	Insight II and Discover Cartesian Coordinate (CAR, COR, MDF)	Import
.cpd	CPD Catalyst (CPD)	Import and Export
.crd	CHARMm Coordinate (CRD)	Import and Export
.csd	Cambridge Crystallographic (CSD, DAT, FDAT)	Import
.csout	QMERA Text (CSOUT)	Import
.csv	Comma separated Value (CSV)	Import and Export
.dat	Cambridge Crystallographic (CSD, DAT, FDAT)	Import
.dcd	CHARMm Simulation (DCD)	Export
.dsv	Discovery Studio Visualizer (DSV)	Import and Export
.emb	Sequence (EMB, EMBL)	Import
.embl	Sequence (EMB, EMBL)	Import
.ent	Protein Databank (ENT, PDB)	Import and Export
.err	Text	Import and Export
.fa	FASTA Sequence (FA, FASTA, FSA)	Import and Export
.fasta	FASTA Sequence (FA, FASTA, FSA)	Import and Export
.fdat	Cambridge Crystallographic (CSD, DAT, FDAT)	Import
.fea	Text	Import and Export
.frc	Text	Import and Export
.fsa	FASTA Sequence (FA, FASTA, FSA)	Import and Export

.gb	Genbank Sequence (GB)	Import and Export
.gcg	Single Sequence (GCG, SSF)	Import and Export
.gde	Genetic Data Environment (GDE)	Import and Export
.grd	Insight II Grid (GRD)	Import
.htm	Hypertext Markup Language (HTML)	Import and Export
.html	Hypertext Markup Language (HTML)	Import and Export
.in	Text	Import and Export
.incl	Text	Import and Export
.inp	Text	Import and Export
.jpg	Joint Photographic Expert Group (JPEG)	Export
.jpeg	Joint Photographic Expert Group (JPEG)	Export
.log	Text	Import and Export
.lst	Text	Import and Export
.map	CNX Map (MAP)	Import and Export
.mbk	QUANTA Brick Map (MBK)	Import and Export
.mdf	Insight II and Discover Cartesian Coordinate (CAR, COR, MDF)	N/A
.mdl	MDL MOL/SD (SD, SDF, MOL, MDL)	Import and Export
.mol	MDL MOL/SD (SD, SDF, MOL, MDL)	Import and Export
.mol2	Tripos Mol2 (MOL2)	Import and Export
.msf	GCG Multiple Sequence and QUANTA Molecular Structure (MSF)	Import and Export
.msi	Cerius2 Format (MSI)	Import
.msv	Discovery Studio (MSV)	Import and Export
.naa_bsml	Bioinformatic Sequence Markup Language (BSML)	Import and Export
.nas_bsml	Bioinformatic Sequence Markup Language (BSML)	Import and Export
.nbrf	National Biomedical Research Foundation Sequence (NBRF)	Import and Export
.out	Text	Import and Export
.pdb	Protein Databank (ENT, PDB)	Import and Export
.pdb1	Protein Databank (ENT, PDB)	Import and Export

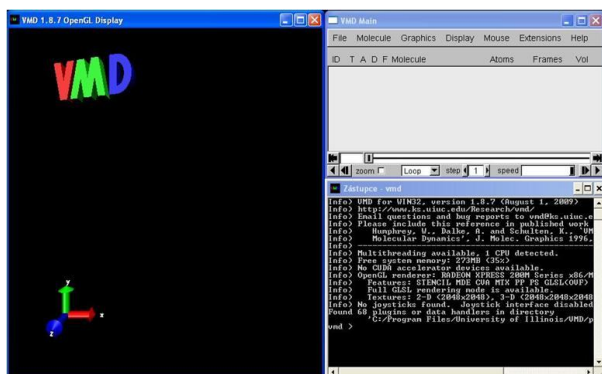
.pir	Protein Information Resource Sequence (PIR)	Import and Export
.pl	Perl Script (PL)	Import and Export
.ds_pl	Perl Script (PL)	Import and Export
.pm	Perl Script (PM)	Import and Export
.png	Portable Network Graphic (PNG)	Export
.pov	POV-Ray (POV)	Export
.psf	CHARMm Structure (PSF)	Import and Export
.psv	Insight II Image (PSV)	Import
.rsf	GCG Rich Sequence Format (RSF)	Import and Export
.sca	Scalepack Reflection (SCA)	Import
.sd	MDL MOL/SD (SD, SDF, MOL, MDL)	Import and Export
.sdf	MDL MOL/SD (SD, SDF, MOL, MDL)	Import and Export
.seq	Sequence (SEQ)	Import
.sh	Text	Import and Export
.skc	MDL Sketch (SKC)	Import
.smi	SMILES (SMI)	Import and Export

3.3 VMD

Informace o programu

Aplikaci Visual Molecular Dynamics (zkratkou VMD) vyvinula Theoretical and Computational Biophysics Group na Univerzitě v Ilionois. Program slouží k vizualizaci, modelování a analýzu biologických systémů, kterými jsou myšleny proteiny, nukleové kyseliny, lipidy apod. VMD si můžeme nainstalovat v počítači s operačními systémy MacOs, Unix nebo Windows a jedná se o zcela freewareový produkt. Má bakalářská práce obsahuje verzi VMD 1.8.7.

Popis programu



Obrázek 18

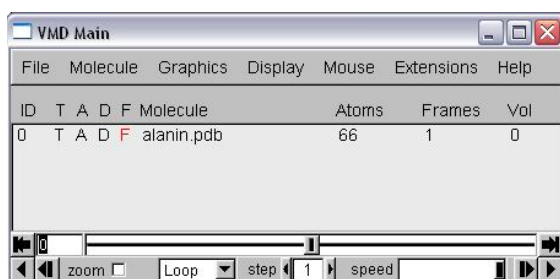
VMD zahrnuje celkem tři okna: hlavní, grafické a textové.

Základní ovládání

Pro rotaci molekuly stiskneme klávesu R, pro přesun neboli translaci použijeme klávesu T a pro přiblížení a oddálení zmáčkneme S. Vždy po stisknutí klávesy používáme levé tlačítko myši. Tlačítko pravé myši použijeme v případě, že budeme chtít molekulou rotovat kolem osy Z, tzn. stiskneme R a použijeme pravé tlačítko. VMD neumí jako oba předchozí programy například uchopit atom nebo vazbu a pootočit s nimi.

Menu nabídka a jejich funkce

Menu nabídka se nachází ve VMD Main okně. V hlavním okně se nám do řádek budou psát molekuly, které máme načtené. Pokud budeme chtít s molekulou provádět nějaké úpravy, označíme ji ne v grafickém okně, ale v řádku v hlavním okně. Atoms (atomy) znázorňuje počet atomů v molekule a Frames (rámy) vyjadřuje počet snímků, které s danou molekulou souvisí.



Obrázek 19

File (Soubor) obsahuje příkazy jako *New Molecule...*, který zobrazí dialogové okno, pro načtení molekuly do aplikace. Dále *Load Data Into Molecule...* (načtení dat do molekuly) nebo *Save Coordinates...* (uložit souřadnice). *Load State...* (načíst stav) načte stav, do kterého jsme molekulu uložili pomocí *Save State...* (uložit stav). Jedná se o uložení dat do PDB souboru. *Render...* a *Quit*, který ukončí aplikaci.

Molecule (molekula) nabízí topologické informace. Obsahuje příkazy *Make Top* indikuje výchozí molekuly, které byly použity v textových příkazech. Toto se používá v některých formách grafiky a animace k určení určitých hodnot. Může existovat pouze jedna hlavní molekula. V hlavní nabídce je tato funkce označena písmenkem T, jako červená je aktivní.

Příkazy, kterých ve VMD využíváme, platí pro aktivní molekuly. Pokud nechceme, aby některé molekuly byly animované, díky tlačítku *Toggle Active* z nich uděláme neaktivní. Neaktivní molekula se nebude přehrávat, pokud stiskneme tlačítko přehrávání v hlavním okně. V hlavním okně patří písmenku A.

Toggle Displayed (přepínání zobrazení) slouží ke skrytí molekul. V hlavním okně je pod písmenkem D.

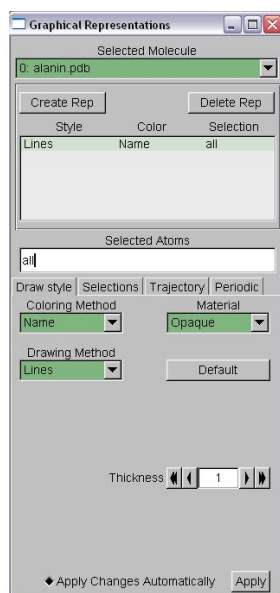
Toggle Fixed (přepínání fixace) patří v hlavním okně písmenku F. Pokud je písmenko černé, máme zapnutou fixaci, která zpevní molekulu a dokud bude molekula fixována, nebudeme s ní moci rotovat.

Rename (přejmenovat) nám umožňuje aktivní molekulu přejmenovat.

Delete Frames... (odstranit snímky) zobrazí dialogové okno, kde nastavíme které snímky aktivní molekuly chceme smazat.

Delete Molecule (odstranit molekuly) odstraní aktivní molekulu.

Graphic nám nabízí důležitou možnost Representations..., která otevře dialogové okno.



Obrázek 20

Grafická reprezentace obsahuje rolovací lištu s načtenými molekulami, ve které můžeme mezi nimi přepínat. Podle zvolené molekuly v tomto okně můžeme měnit její styl zobrazení (Drawing Method), Materiál, metodu barvení (Coloring Method) a další.

Do Drawing Method patří Lines, Bonds, Dynamic Bonds, HBonds, Points (body), VDW, CPK, Licorice (atomy = koule, vazby = válce), Polyhedra (mnohostěn), Trace (pás), Tube (trubice), Ribbons, New Ribbons, Cartoon, New Cartoon, Paper Chain, Twister, MSMS, Surf, Volume Slice, Isosurface, Field Lines, Orbital, Beads (bublínky), Dotted (bodový) a Solvent.

Coloring Method obsahují Name, Type, Element, ResName, ResType, ResID, Chain, SegName, Conformation (konformace), Molecule, Secondary Structure, Color ID, Beta, Occupancy (obsazení), Mass (množství), Charge, Position, Trajectory, Index, Backbone (hlavní řetězec), Throb a Volume.

V kolonce Selected Atoms si můžeme zápisem vybrat atomy nebo molekuly. Create Rep vytvoří kopii označené molekuly, Delete Rep ji odstraní. Možnost Default nás vrátí do výchozího nastavení. Pomocí Thickness můžeme volit tloušťku zobrazovacích stylů, pro které je Thickness typický.

Záložka Selection obsahuje keywords (klíčová slova) a Singlewords. Tato záložka definuje běžně používané atomy.

Pomocí záložky Trajectory můžeme vytvářet trajektorie.

Colors zobrazí okno *Color Controls* (nastavení barev). VMD obsahuje databázi, která se skládá z několika barevných kategorií, kdy každá barva kategorie obsahuje seznam jmen. Přiřazování barev a jmen se může změnit v tomto okně (*Color Controls*). K dispozici je zde 16 barev.

Materials ... zobrazí tabulku, ve které budeme upravovat a vytvářet materiálové definice. Typ materiálu se objeví v rozbalovací nabídce. Tlačítko Default obnoví výchozí nastavení. Pokud budeme chtít vytvořit nový materiál, zvolíme Create new.

Labels ... zobrazí formulář, který slouží k manipulaci s popisky, kterými můžeme označit atomy, vazby, úhly apod. Štítky vybíráme myší díky nabídce Mouse → Label. Ve formuláři si můžeme zvolit, které štítky zobrazíme, které schováme nebo některé můžeme i smazat. Zobrazí se nám zde také informace o objektu (XYZ souřadnice, název, typ, řetězec,...)

Tools (nástroje) otevřou Tool Controls (kontrola nástrojů) okno, upravující vstupní zařízení a nastavuje externí 3D ukazatele.

Display (Zobrazení) obsahuje nabídku *Reset View*, kdy se zruší molekulová transformace a molekula se vrátí do pozice, ve které byla původně otevřena.

Příkaz *Stop Rotation* zastaví rotaci molekuly.

Zobrazení *Perspective* a *Orthographic* viz předchozí aplikace.

Antialiasing (vyhlazení) vyhladí zubatý vzhled geometrie. Tato nabídka slouží pro její zapnutí a i vypnutí.

Depth Cueing (hloubka ostrosti) způsobuje, že vzdálenější objekty se míchají do pozadí, aby bylo poznat 3D hloubkové vidění. Tento příkaz slouží k zapnutí a vypnutí hloubky ostrosti.

Culling příkaz se používá k urychlení výkonu vykreslování implementace softwaru, založeném na OpenGL.

FPS indicator (FPS indikátor) povoluje nebo zakazuje zobrazení dosažených vykreslených snímků ve VMD za sekundu. V pravém horní rohu grafického okna můžeme vidět zobrazení počtu snímků.

V grafickém okně lze použít až čtyři zdroje světla a přidat tak realistický efekt zobrazení grafických objektů.

Axes (osy) neboli Kartézský systém souřadnic může být v okně zobrazen na jednom z pěti míst, a to v každém rohu nebo uprostřed. Můžeme je ale i vypnout.

Stage zobrazí šachovnici v grafickém okně, může se vyskytovat na šesti místech nebo být vypnutá (na každé straně, dole, nahoře).

Stereo molekuly se může zobrazit při *Crystal Eyes* (zobrazí se nad sebe), *Crystal Eyes Reversed* (zobrazení nad sebe, otočení na druhou stranu podle Crystal Eyes), *DTI Side by Side* (vedle sebe), *Scanline Interleaved* (čárkovaně přes sebe), *Anaglyph* (nad sebe), *Cross Eyes* (překřížené oči), *Side by Side* (vedle sebe) a *Above Below* (nad sebe, zmenšené), *Left* (vlevo), *Right* (vpravo).

Cachemode provádí kontrolu, zda VMD používá k zobrazení seznamu cache mechanismus, který slouží k urychlení vykreslení statické geometrie. Zobrazí se

v grafickém okně jako kachlová zeď, způsobuje lepší zobrazení výkonu na displeji. Nemůže být provedena při animování trajektorie.

Display settings (nástroje zobrazení) nám umožňuje měnit například ohniskovou vzdálenost, zapnout a vypnout stíny apod.

Mouse menu nám nabízí možnosti pro manipulaci s molekulou. Jsou jimi Rotate Mode (*r*), Translate Mode (*t*), Scale Mode (*s*) nebo Center (*c*). Všechny tyto funkce jsou již vysvětleny u jiných programů.

Label umožňuje přidávat štítky *atomům*, *vazbám*, *úhlům* a *dihedrálním úhlům*.

Move (pohyb) nám umožní pohyb objektů tak, že označíme příkaz a poté objekt uchopíme a přesuneme. Jedná se o *atomy*, *residua*, *fragmenty*, *molekuly*.

Force se používá stejně jako příkaz Move, ovšem s rozdílem, že Force se používá pro objekty, které právě prochází simulací. Klepnutím na pravé nebo prostřední tlačítko zrušíme označené objekty.

Move Light umožňuje posun světél kolem scény.

Add/Remove Bonds (přidat/odstranit vazby) přidává vazbu mezi dva označené atomy, které musí patřit do stejné molekuly. Vazby můžeme i odstranit.

Přehrávání trajektorií viz obrázek 20.

Výčet formátů pro import

PDB, NAMD, CRD, XTC, TRR

CHARMM, NAMD a X-PLOR – PSF topologické soubory

CHARMM, NAMD a X-PLOR – DCD topologické soubory

Výčet formátů pro export

BGF, BINPOS, CRD, CRDBOX, DCD, DTR, DTRV, TRR, JS, LAMMPSTRJ, MAE, MOL2, NAMDBIN, PDB, PQR, RST7, POSCAR XBGF, XYZ

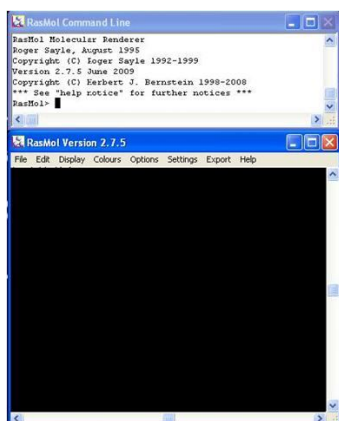
3.4 Rasmol

Informace o programu

Program Rasmol vytvořil student Edinburghské univerzity Roger Sayle v 90. letech za účelem zobrazování molekulárních struktur. Zkratka Rasmol je složena ze slov Raster a Molecules, což v překladu znamená rastrované molekuly, tzn. molekuly obsahující strukturu. Jedná se o volně šiřitelný program, který pracuje na počítačích s operačním systémem Mac OS, Microsoft Windows, Linux nebo Irix. Já pracuji s nejnovější verzí RasWin 2.7.5.

Rasmol je určený k vizualizaci proteinů, nukleových kyselin a malých molekul. Dokáže tyto molekuly zobrazit, vytvořit obrázky s vysokou kvalitou a je velmi často používán k výukovým účelům. Rasmol dnes používají stovky tisíc lidí na celém světě. Je oblíben zvláště pro svoji schopnost vytvářet kvalitní snímky.

Popis programu



Rasmol pracuje se dvěma okny, grafickým a textovým.

Obrázek 21

Základní ovládání

Pro otáčení molekuly používáme levé tlačítko myši s postupem držet a táhnout. Pokud budeme chtít molekulu posunout, použijeme pravé tlačítko. Otočení molekuly okolo osy Z docílíme stisknutím SHIFT + pravé tlačítko myši. Při kombinaci SHIFT + levé tlačítko myši se nám bude molekula přibližovat a oddalovat. Rasmol neumí myši uchopit například atom a začít s ním točit.

Menu nabídka a její funkce

File (Soubor) obsahuje běžný příkaz jako je Open ..., kdy se zobrazí dialogové okno, a my si necháme do programu načíst molekulu. Information nabídne nejzákladnější informace o načtené molekule. Těmito informacemi jsou Number of Groups (počet skupin), Number of Atoms (počet atomů) a Number of Bonds (počet vazeb). Možnost Close zavře aktuální molekulu. Print nabízí tisk molekuly a Print Setup slouží k nastavení tisku. Exit vypne celou aplikaci.

Edit nabízí příkaz Select all, který nám označí celou zobrazenou molekulu. Možnosti Cut (vyjmout), Copy (kopírovat) a Delete (smazat) používáme běžným způsobem, nejdříve označíme molekulu nebo její část a poté zvolíme příkaz. Paste (vložit) vloží do grafického okna zkopírované nebo vyjmuté objekty.

Menu nabídka **Display** slouží k nastavení zobrazení stylu molekuly. K dispozici máme Wireframe (drátěný rám), který molekulu zobrazí jako pletenec drátů.

Backbone (páteř) umožňuje vykreslení páteře polypeptidu jako sérii vazeb připojených sousedními alfa uhlíky aminokyseliny v řetězci.

Sticks nakreslí molekulu jako soustavu zaoblených tyčí.

Spacefill (vyplněný prostor) reprezentuje všechny aktuálně vybrané atomy jako pevné koule.

Spacefill se používá i k výrobě metody zobrazení Ball and Stick (koule a tyč), která se skládá z tyčí a koulí. Tyče představují vazby, koule atomy.

Ribbons (stuhy) zakresluje pásy.

Strands (vlákna) kreslí bílkoviny a nukleové kyseliny jako hladké pásy jdoucí podél páteře bílkoviny. Obsahuje vlákna, která jdou paralelně k sobě podél peptidové roviny každého rezidua.

Cartoons, tedy karikatura zobrazuje molekulu na základě sekundární struktury, ale hlavně jednoduše. Šroubovice se změní ve válce, beta listy na pevné stuhy a vše ostatní budou trubice.

Rasmol jako poslední metodu zobrazení molekuly používá Molecular Surface (molekulární povrch).

Colours označuje příkazy pro obarvení molekuly podle určitého kritéria. Monochrome (monochromatický) udělá z molekuly jednobarevnou kresbu. Jako univerzální barva se používá bílá.

CPK je založeno na barvách plastových space –filling modelů, které jsou velmi oblíbené. Tato metoda barví atomy podle typu prvku.

Shapely barví rezidua aminokyselin. Tato metoda se odvíjí od Shapely modelů. Každá aminokyselina a nukleová kyselina má svou danou barvu.

Group (skupina) obarví molekulu podle skupiny.

Chain (řetězec) barví molekulu podle řetězců, které obsahuje.

Temperature udává barvu podle teploty atomu, jehož hodnota tepla je uvedena v PDB souboru. Vysoké hodnoty jsou v teplých barvách, hlavně červená. Nízké teploty naopak jsou kresleny studenými barvami (modrá).

Structure barví molekuly podle jejich sekundární struktury. Jinak jsou barveny šroubovice, jinak skládaný list, cívky apod.

User umožňuje Rasmolu použít barvy, které jsou uloženy v PDB souboru. Pro každý atom jsou barvy uloženy v záznamech COLO, které jsou obsažené v PDB souboru.

Model nabarví molekulu podle modelu molekuly.

Alt, celým názvem Alternate Conformer (náhradní konformer) obsahuje základní barevné schéma, přičemž strukturu nabarví jednou barvou. Pro každého náhradníka konformerů má pouze omezený počet barev. Rasmol, postavený pro systémy 8-bitové barvy, obsahuje čtyři barvy pro konformery. Jinak jich je k dispozici osm.

Options (možnosti) obsahují Slab Mode (deskový mode), který spadá do metody vizualizace objektů. Jedná se o tzv. rovinné deskové výstřižky z molekuly. Pro nastavení Slab Mode použijeme textové okno pro příkazy.

Příkaz Hydrogens přiřadí molekule vodíky tak, aby souhlasila vaznost atomů.

Hetero Atoms jsou klasifikovány jako ligandové nebo rozpouštědlové atomy. Rozpouštědlové atomy se klasifikují jako ionty nebo voda.

Specular (zrcadlový) příkaz zobrazuje a zakazuje zrcadlová světla na pevných objektech. Na povrchu objektu můžeme vidět bílé odrazy světla.

Shadows (stíny) umožňuje a zakazuje ray-tracing poskytovaného obrazu. Stín můžeme použít pouze na Space-filling reprezentaci. K automatickému vypnutí stínů dojde při zvolení příkazu Slab Mode. Doporučuje se během manipulace s molekulami mít Shadows vypnuté.

Stereo zobrazí druhý pohled molekuly.

Labels přidá do molekuly štítky. Automaticky označí skupiny, pro další štítky musíme využít textového okna.

Settings (nastavení) obsahuje příkazy Pick Off, Pick Ident, Pick Distance, Pick Monitor, Pick Angle, Pick Torsion, Pick Label, Pick Centre, Pick Coord, Pick Bond, Rotate Bond, Rotate Mol a Rotate All. Všechny tyto příkazy se objevují i v ostatních programech, proto je již zde zvlášť nepopisují. V aplikaci Rasmol musíme ale nejdříve zvolit příkaz a až poté objekty, kterých se příkaz bude týkat.

Export nabízí seznam formátů pro uložení molekuly do souboru. (viz. Výčet formátů exportu)

Textové příkazy programu Rasmol viz. příloha.

Výčet formátů pro import

PDB, Mol, XMol, XYZ, CHARMm soubory

Výčet formátů pro export

GIF, PPM, BMP, PICT

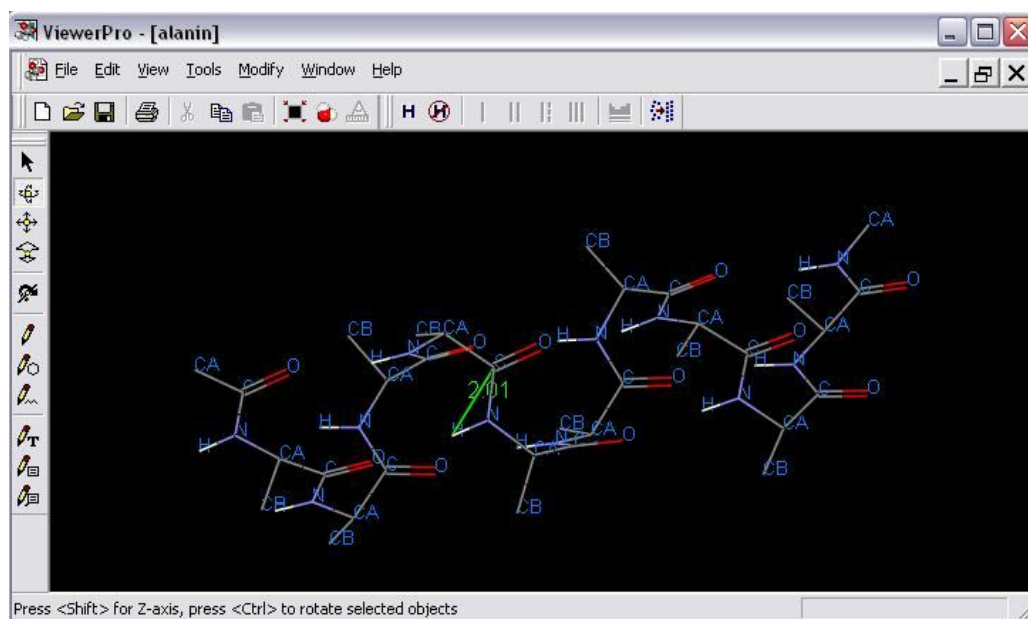
4. Modelové úlohy

Pro modelové úlohy je zde využívána molekula alaninu.

4.1 Měření vzdálenosti dvou atomů

DS Viewer Pro 5.0

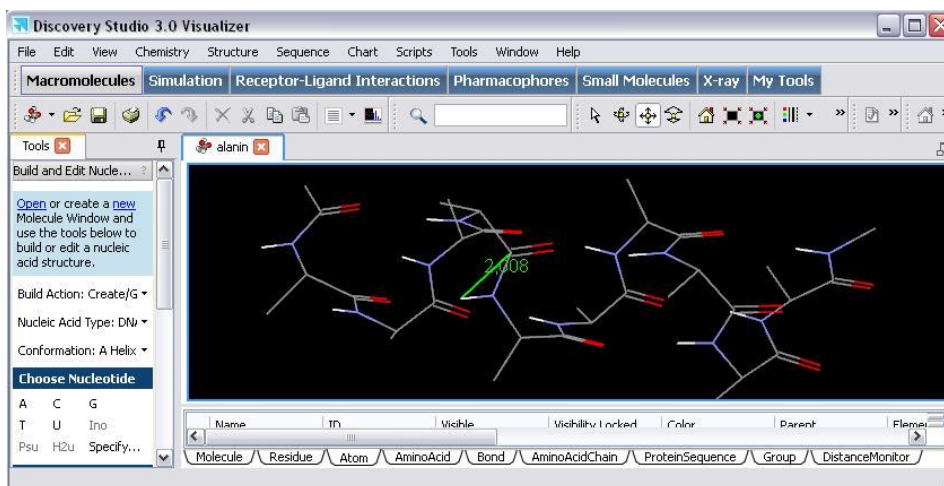
Zvolila jsem si vzdálenost mezi dvěma atomy, přesněji mezi C26 a H29. Nejprve jsem si označila jeden z uvedených atomů a při podržení tlačítka SHIFT přidala ještě druhý atom. Přes menu nabídku Tools → Monitors jsem zvolila Distance. Zobrazila se mi tak vzdálenost atomů C26 a H29 v Angstromech ($1 \text{ \AA} = 0,1 \text{ nm}$), tzn. vzdálenost mezi C26 a H29 je 2,01 Å.



Obrázek 22

DS Visualizer 3.0

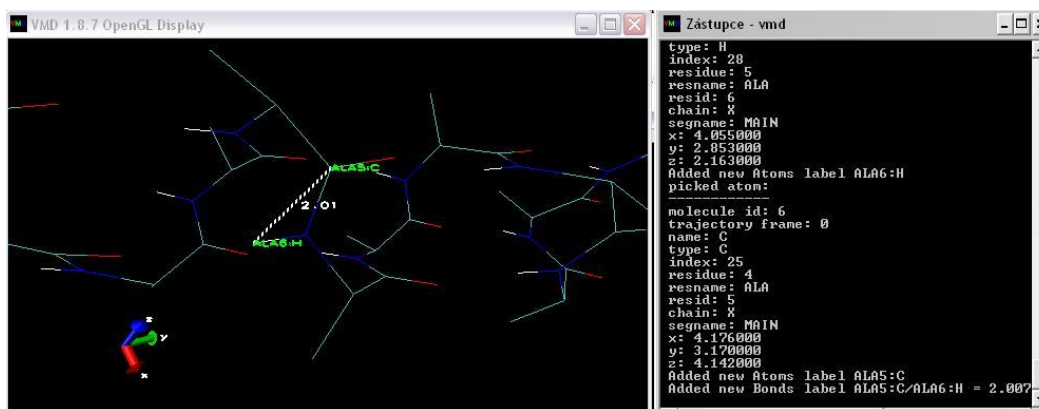
Označíme pomocí klávesy SHIFT dva atomy, jejichž vzdálenost chceme zjistit. V menu zvolíme Structure → Monitor → Distance. Vzdálenost atomů C26 a H29 činí 2,008 Å.



Obrázek 23

VMD

Pro měření vzdálenosti dvou atomů jsem vybrala H28 a C25. V menu zvolíme Mouse → Labels → Bonds a označíme oba atomy. Vzdálenost mezi atomy H28 a C25 je 2,01 Å.

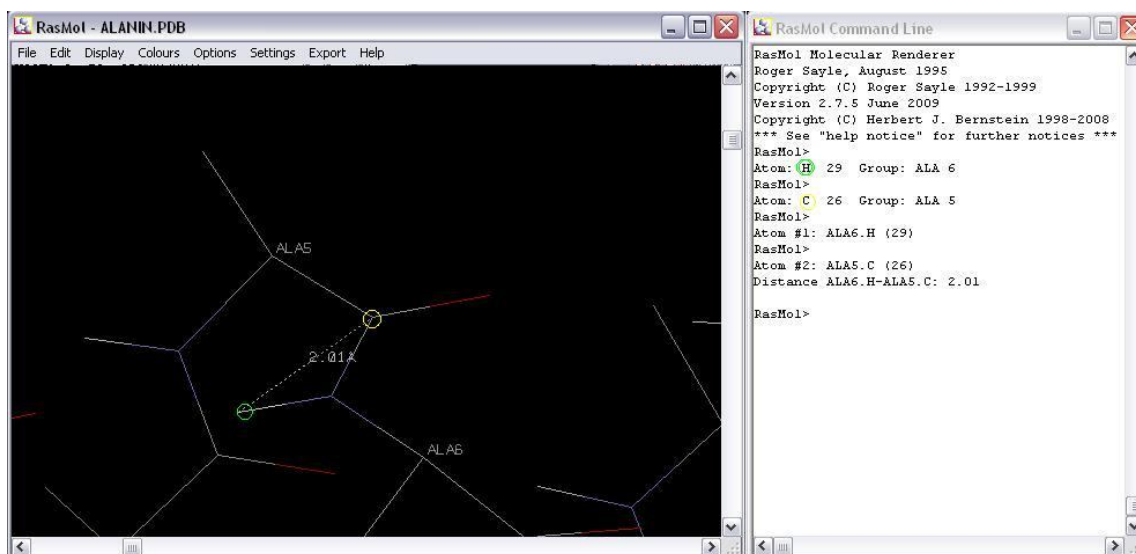


Obrázek 24

Rasmol

V programu Rasmol musíme nejdříve navolit přes menu Settings → Pick Distance a následně označit dva atomy, u kterých chceme zjistit jejich vzdálenost.

Já jsem měřila vzdálenost mezi atomem H29 a C26. Výsledkem je 2,01 Å.

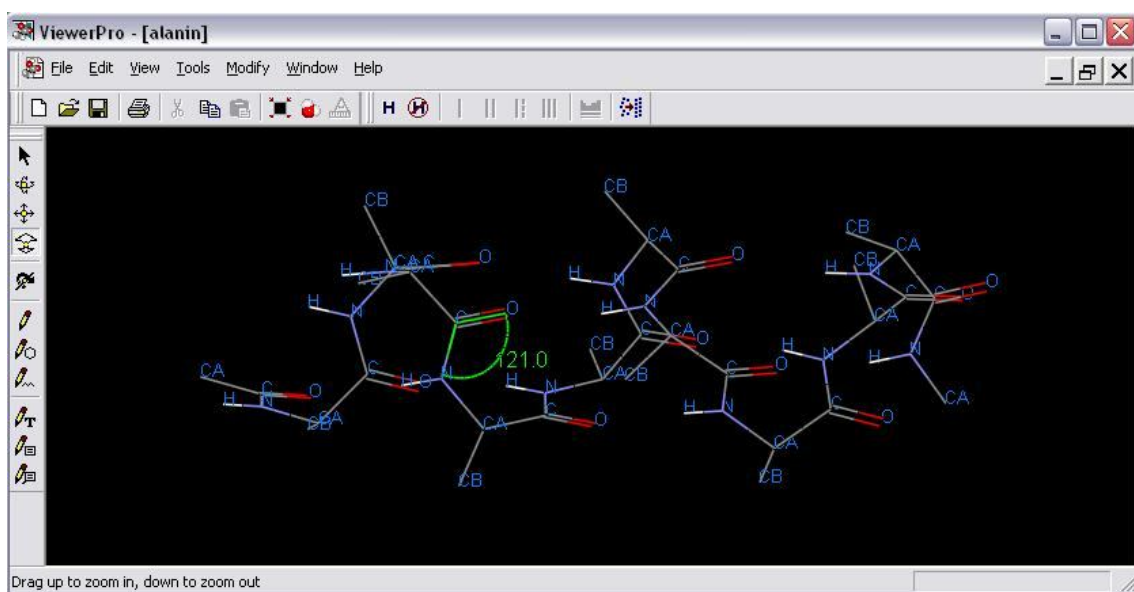


Obrázek 25

4.2 Měření velikosti úhlu

DS ViewerPro 5.0

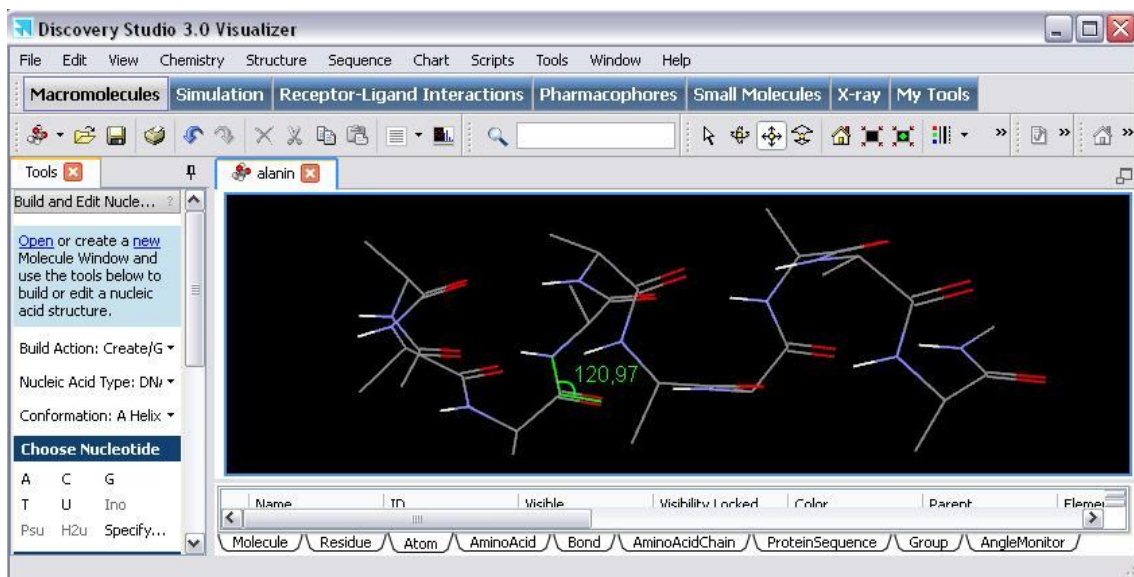
Pro zjištění velikosti úhlu musíme určit tři atomy. Pro tuto úlohu byly mémi vstupními atomy O21, C20 a N22, které jsem vybrala stejně jako u vzdálenosti dvou atomů díky klávese SHIFT a postup byl velmi podobný. Tools → Monitors → Angle. Úhel mezi atomy O21, C20 a N22 je roven 121,0°.



Obrázek 26

DS Visualizer 3.0

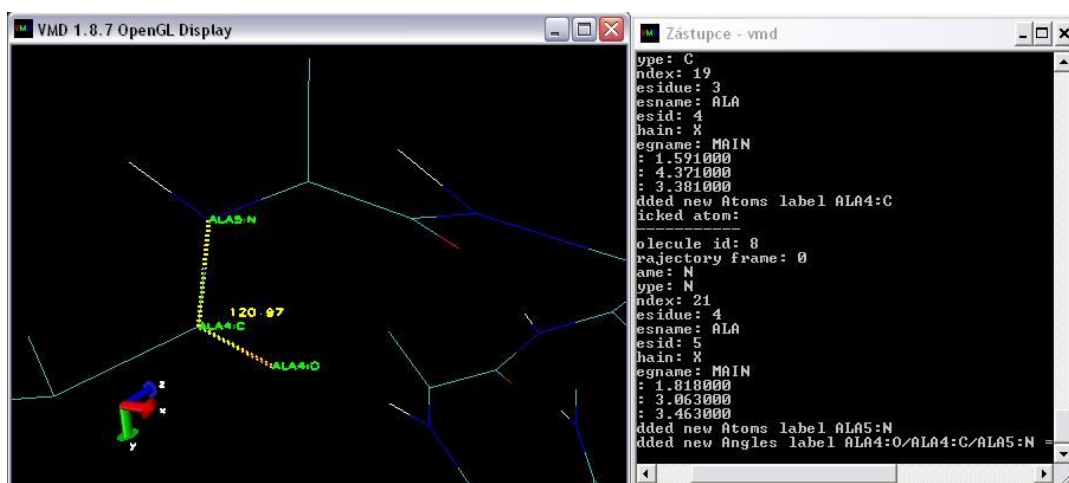
Označila jsem atomy C20, O21 a N22. Přes cestu Menu → Structure → Monitor → Angle jsem dostala výsledek, tedy 120,97°.



Obrázek 27

VMD

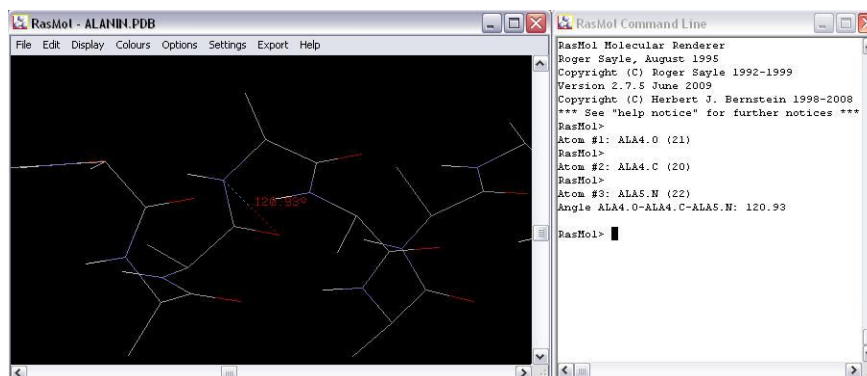
Při zjišťování velikosti úhlu budeme postupovat podobně jako u určování délky vazby. Menu → Mouse → Label → Angels a následně označíme tři atomy, které úhel svírají. Atomy N21, C19 a O20 svírají úhel o velikosti 120,97°.



Obrázek 28

4.2.4 Rasmol

Velikost úhlu určíme podobně jako vzdálenost atomů. Nejdříve přes menu vybereme Settings → Pick Angle, a poté určíme tři atomy, u nichž chceme zjistit úhel. V mém případě se jednalo o atomy O21, C20 a N22, přičemž úhel mezi nimi je roven 120,93°.



Obrázek 29

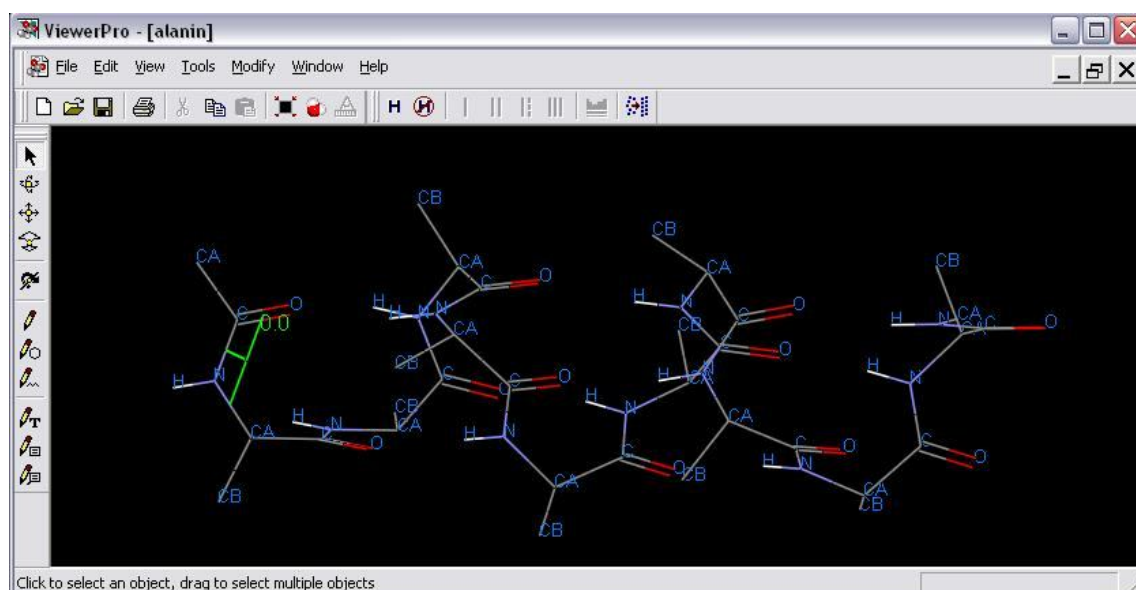
4.3 Torzní úhel

DS ViewerPro 5.0

Pro torzní (dihedrální) úhel neboli úhel mezi dvěma rovinami můžeme zvolit více možností.

1. jedna vazba
2. dvě vazby, které mají společnou sousedící další vazbu
3. vazba a dva atomy
4. čtyři atomy

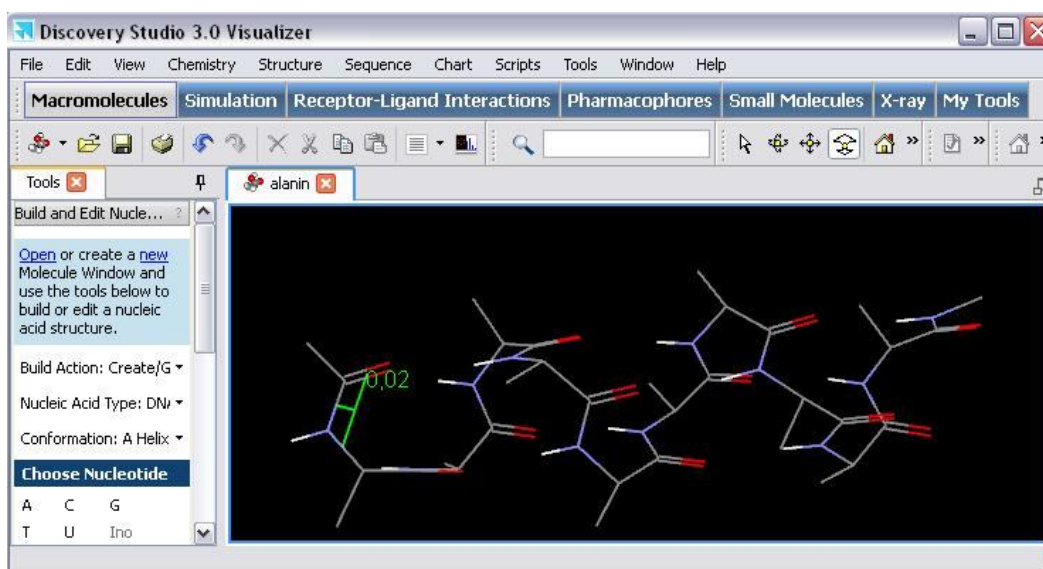
Já jsem si vybrala možnost číslo dvě. Označila jsem si pomocí SHIFTU vazbu mezi atomy O3, C2 a N4, CA6. Tools → Monitors → Torsion. Velikost mého zvoleného torzního úhlu dosahuje velikosti 0,0°.



Obrázek 30

DS Visualizer 3.0

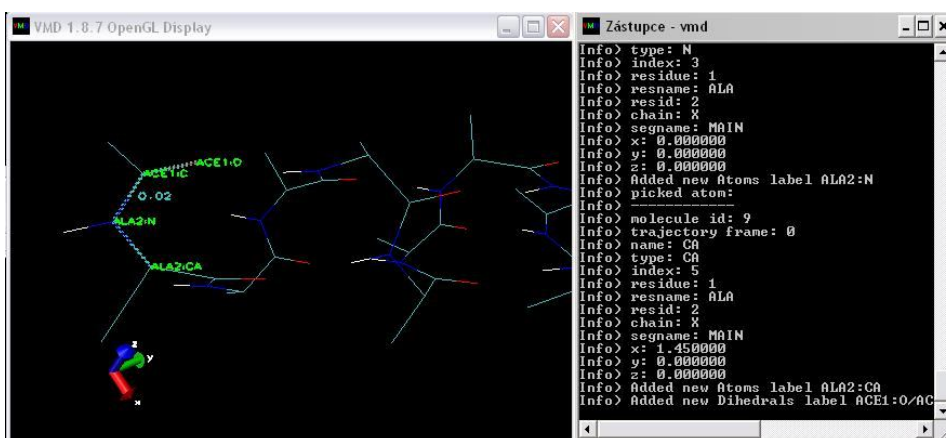
Pro měření torzního úhlu jsem označila 4 atomy: O3, C2, N4 a CA6. Menu → Structure → Monitor → Torsion. Výsledkem je úhel o velikosti 0,02 Å.



Obrázek 31

VMD

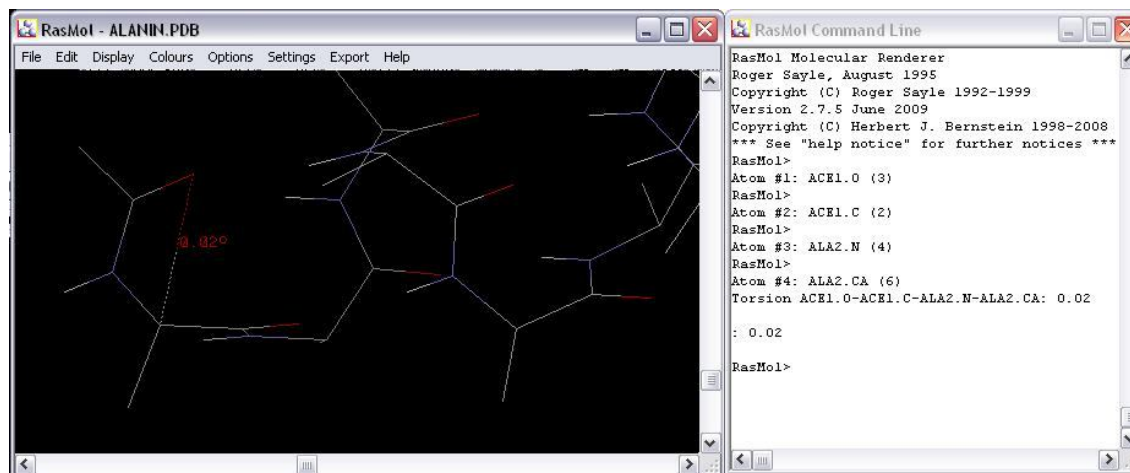
Ve VMD při měření torzního úhlu musíme označit všechny čtyři atomy. Menu → Mouse → Label → Dihedrals, myší ťukneme na atomy, v našem případě CA5, N3, C1 a O2 a VMD nám změřil úhel 0,02°.



Obrázek 32

Rasmol

Pro měření torzního úhlu v programu Rasmol existuje pouze jedna možnost, a to označit čtyři atomy. Nejdříve zvolíme v menu Settings → Pick Torsion. Vycházela jsem z atomů O3, C2, N4 a CA6 a Rasmol určil torzní úhel rovný 0,02°.



Obrázek 33

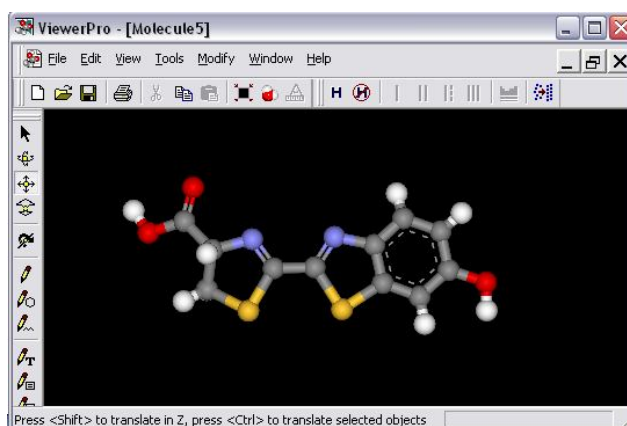
4.4 Kreslení molekul

DS ViewerPro 5.0

K nákresu molekuly budeme využívat svislého panelu nástrojů. Pro tento úkol jsem si vybrala molekulu Luciferinu.

Nejdříve si s pomocí tlačítka Ring nakreslíme cyklohexan, přičemž při držení levého tlačítka myši pohybujeme kurzorem a navolíme si tak právě požadovaný počet uhlíků, který potřebujeme. Abychom právě vytvořený cyklohexan aromatizovali, označíme si celou molekulu a zvolíme v nástrojové liště aromatickou vazbu. K molekule budeme chtít připojit cyklopentan, který bude mít s původní molekulou společné dva uhlíky. Tlačítkem Ring vytvoříme cyklopentan zmáčknutím kurzoru myši přímo na vazbě, která spojuje dva námi určené uhlíky a ještě jeden vytvoříme poblíž. Tlačítkem Sketch spojíme atomy obou cyklopentanů a vznikne mezi nimi jednoduchá vazba. Dále podle obrázku díky již uvedených nástrojů doplníme další atomy. Některým atomům musíme změnit chemický prvek, a toho docílíme zmáčknutím pravého tlačítka myši na atom a výběrem „Change element“. Prostřednictvím dvojných vazby v nabídce na liště nástrojů změníme některé jednoduché vazby na dvojně.

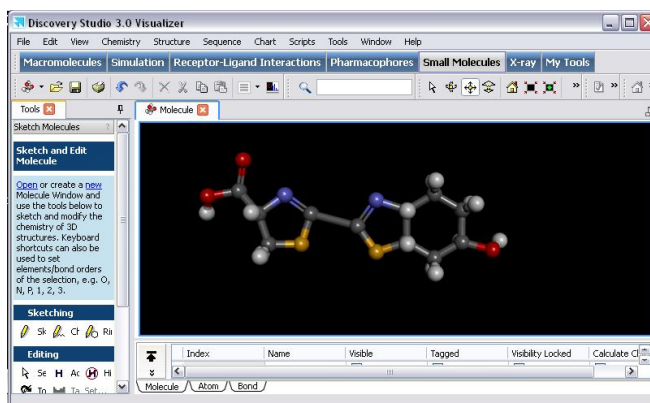
Nakonec vyčistíme strukturu cestou Menu → Modify → Clean Structure a tlačítkem H na nástrojové liště zobrazíme vodíky.



Obrázek 34

DS Visualizer 3.0

Kreslení molekuly provádíme v DS Visualizer 3.0 stejným způsobem jako v DS ViewerPro 5.0. Panel nástrojů zobrazíme přes Small Molecules v menu a následně Sketch molecules v Tools nabídce.



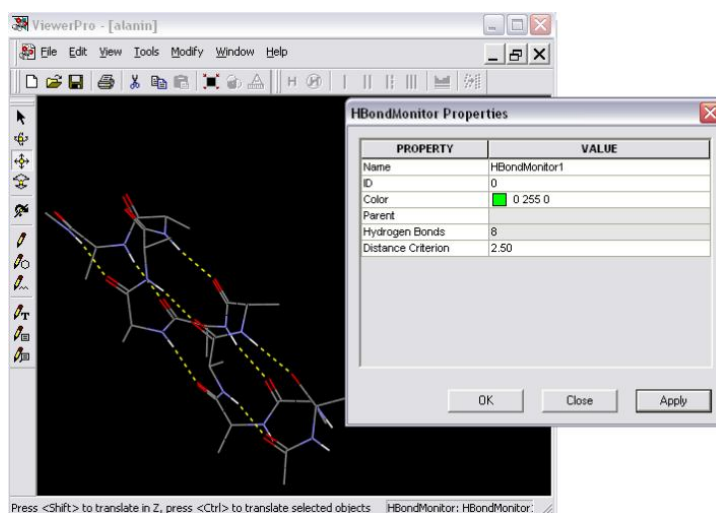
Obrázek 35

VMD, Rasmol kreslení molekul neumí.

4.5 Vodíkové vazby

DS ViewerPro 5.0

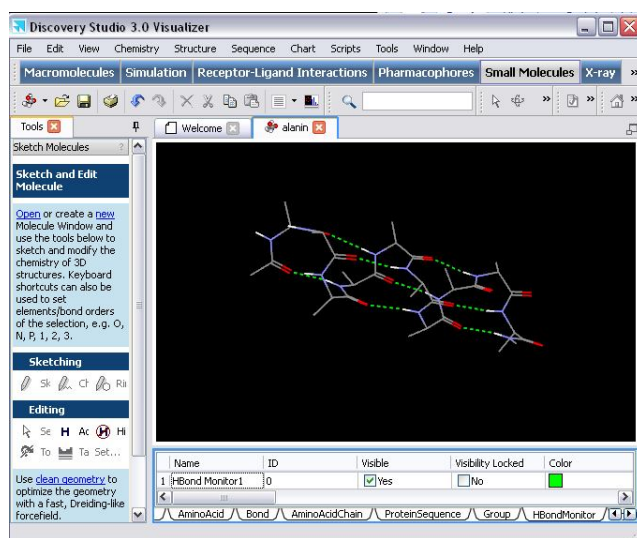
Pro zobrazení všech vodíkových vazeb v molekule najdeme v menu Tools → Monitors → HBond. Pokud bychom chtěli zjistit, kolik vodíkových vazeb molekula obsahuje, vysvítíme si jednu z vazeb a automaticky se označí všechny. Přes pravé tlačítko na myši zvolíme Properties of HBondMonitor. Zobrazí se nám tabulka, ve které můžeme vidět celkový počet vodíkových vazeb a nebo také vzdálenostní kritérium, při jehož splnění se vodíkové vazby ukáží.



Obrázek 36

DS Visualizer 3.0

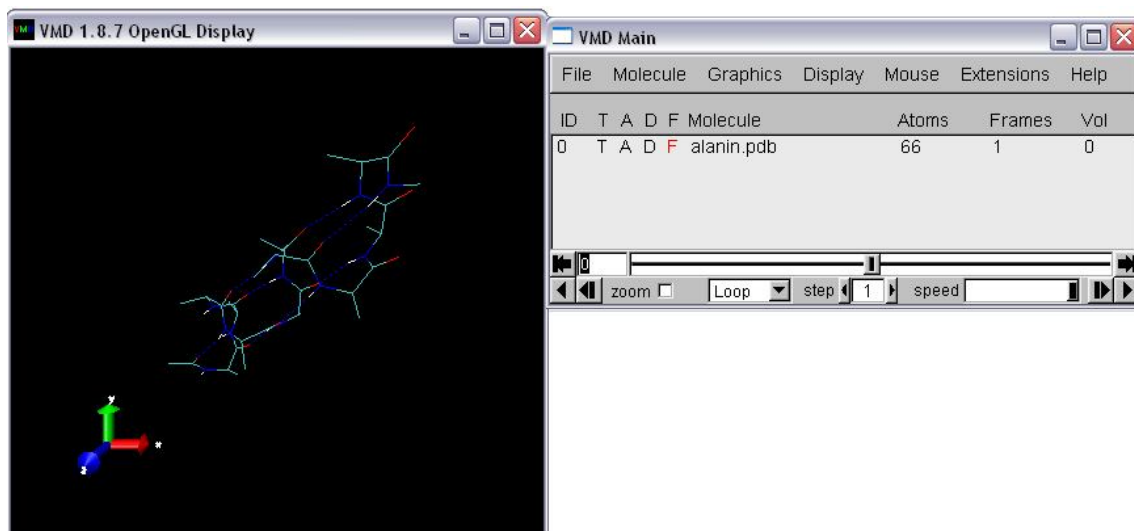
Při zobrazování vodíkových vazeb v menu zvolíme Structure → Monitor → HBonds. V DS Visualizeru jde označit pouze jednu vodíkovou vazbu a pomocí pravého tlačítka myši a možnosti Attributes of.. můžeme zjistit podrobné informace o vazbě. Objevíme, mezi kterými molekulami se vazba nachází, její xyz souřadnice, vzdálenost, donor a akceptor. Pokud budeme chtít změnit třeba vzdálenostní kritérium, můžeme to provést přes tabulku (Ctrl + T) z menu, View → Data Table a zde otevřeme záložku HBondMonitor. Tato tabulka obsahuje například i celkový počet vodíkových vazeb v molekule.



Obrázek 37

VMD

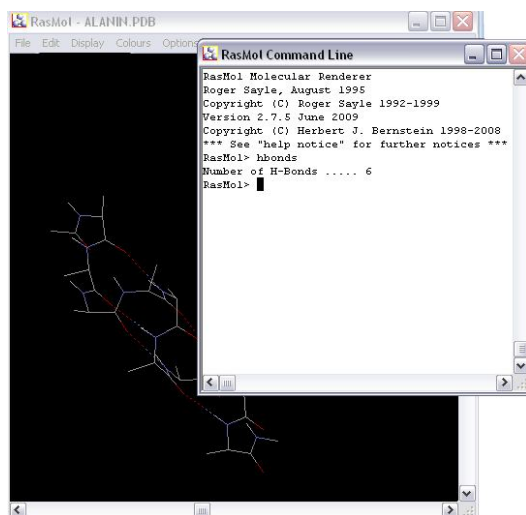
V menu nabídce si zvolíme Extensions → Analysis → Hydrogen Bonds. Otevře se nám nové okno, kde musíme určit maximální vzdálenost donoru a akceptoru a úhel. V textovém okně se nám následně zobrazí informace o vodíkových vazbách, tzn. jejich počet, atomy které spojují apod.



Obrázek 38

Rasmol

Do textového okna zapíšeme příkaz hbonds a ukáže se nám počet vodíkových vazeb a v grafickém okně se dokreslí. Barva vodíkových vazeb je nejdříve odvozena od atomů, které spojuje, ale můžeme ji změnit příkazem „colour“ hbond.

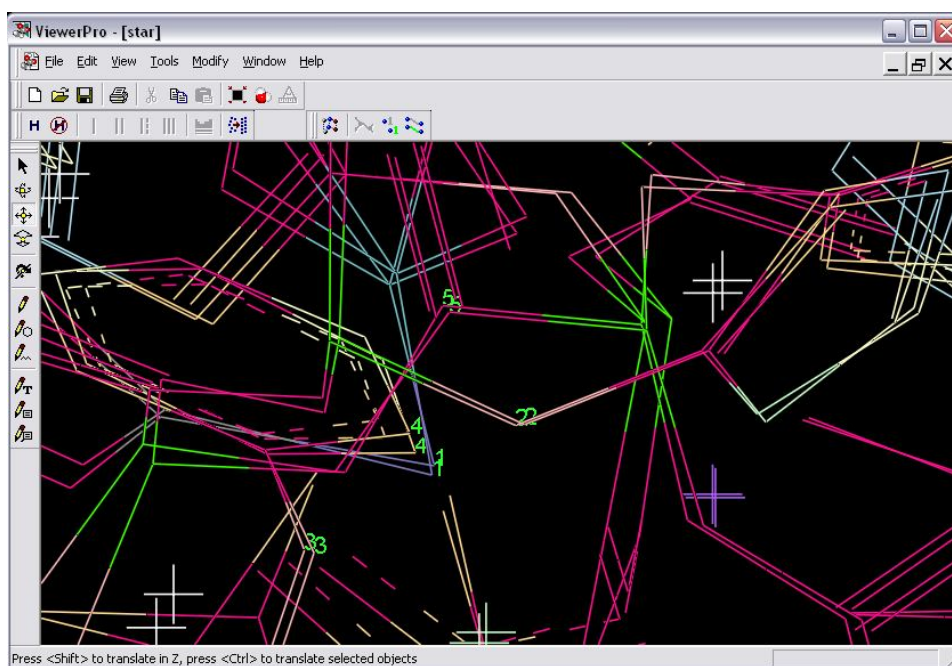


Obrázek 39

4.6 Porovnávání dvou konfigurací

DS ViewerPro 5.0

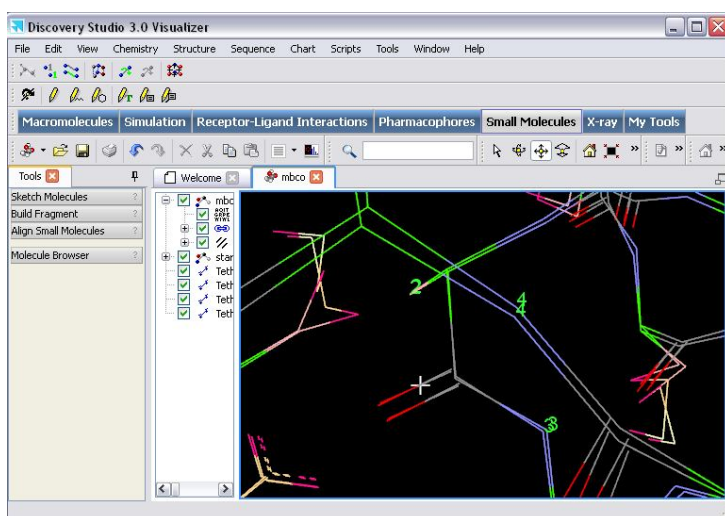
Otevřela jsem v programu molekulu myoglobinu a pomocí Paste from ještě molekulu star.pdb a pomocí nástroje select a Shiftu, jsem vybrala dva atomy, které jsem chtěla přeložit přes sebe. Poté jsem zvolila Modify → Align Structures → Define Tether. Atomy se označili stejnými čísly. Toto jsem provedla ještě dvakrát. Vybrala jsem Modify → Align Structures → Align Molecules a molekuly se mi zarovnali jedna přes druhou.



Obrázek 40

DS Visualizer 3.0

Nejdříve jsem načetla molekulu myoglobinu a dále jsem zvolila Insert from file a načetla molekulu star.pdb. Pomocí Shiftu jsem označila v každé molekule jeden atom, které jsem chtěla zarovnat. Pomocí Alignment Toolbaru jsem zvolila funkci Add Tether a ten samý postup provedla ještě vícekrát. Funkce Superimpose By Tether poté obě molekuly zarovnala.

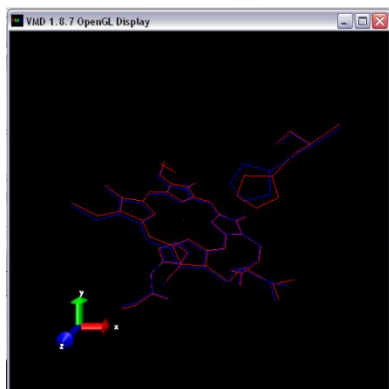


Obrázek 41

VMD

Pro tento úkol jsem použila molekulu myoglobinu a star.pdb.

Do programu jsem si otevřela molekulu myoglobinu a v okně Grafická reprezentace jsem do kolonky Selected Atoms napsala „rename HEM CO or resid 64 93“, což znamená, že jsem z molekuly myoglobinu vzala složku Hem a zobrazila ji. Dále jsem načetla molekulu star.pdb a ten samý postup zopakovala i pro druhou molekulu. V okně Grafická reprezentace jsem pro obě molekuly vybrala obrarvení podle molekuly a obě se mi zbarvili do jedné barvy. Výsledek viz obrázek.



Obrázek 42

Rasmol

V Rasmolu přes menu nabídku toho provést nelze.

5. Diskuze

Nyní porovnáme postupy aplikací při řešení modelových úloh a jejich dosažené výsledky. Stručné porovnání je znázorněno v tabulce. Se snižujícím se počtem plus v tabulce kvalita výsledku modelové úlohy klesá, a tím klesají i možnosti programu v porovnání s ostatními.

Tabulka 2

Modelová úloha	DS ViewerPro 5.0	DS Visualizer 3.0	VMD	Rasmol
Vzdálenost 2 atomů	++	++	+++	++
Velikost úhlu	++	++	+++	++
Velikost torzního úhlu	+	++	+++	++
Kreslení molekul	++	+++	-	-
Vodíkové vazby	+	++	+++	+
Porovnávání dvou struktur	+++	+++	+++	+

Úkolu měření vzdáleností atomů se všechny programy ujaly poměrně dostatečně. U všech programů stačilo označit atomy a v nabídce menu zvolit vzdálenost (u VMD a Rasmolu byl postup obrácený). Proč ale všem udělit tři plus za to, že umí zobrazit vzdálenost mezi dvěma atomy? Při označování oněch dvou atomů pouze VMD určil jejich identitu v grafickém okně a společně s Rasmolem i v textovém okně. VMD v textovém okně sám zobrazil i XYZ souřadnice, u DS ViewerPro 5.0 a DS Visualizer 3.0 informaci o atomech a vzdálenosti získáme tak, že označíme buď atomy nebo čáru, která tyto atomy spojuje (vytvořená pro znázornění vzdálenosti, je nakreslena zeleně) a

pomocí pravého tlačítka myši se zobrazíme tabulku atributů. VMD tedy za tento úkol dostává nejvíce plus.

Další modelovou úlohou bylo měření úhlů. Pro měření úhlů platí to samé, jako pro vzdálenosti dvou atomů.

Pro měření torzního (dihedrálního) úhlu má DS ViewerPro 5.0 sice více možností než ostatní aplikace, ale je nejméně přesný. Ostatní prohlížeče měří torzní úhel stejně jednoduše, jako DS ViewerPro 5.0. VMD v textovém okně ale zobrazuje nejvíce informací.

Kreslení molekul je možné pouze v programech DS ViewerPro 5.0 a DS Visualizer 3.0. DS Visualizer 3.0 obsahuje více nástrojů pro kreslení molekul.

Při zobrazení vodíkových vazeb můžeme u DS ViewerPro 5.0 měnit vzdálenostní kritérium těchto vazeb. DS Visualizer 3.0 již kromě vzdálenostního kritéria určuje i vzdálenost donoru a akceptoru, stejně jako VMD. U Rasmolu stačí napsat do textového okna příkaz. V grafickém okně se vodíkové vazby zobrazí, v textovém okně bude udán celkový počet těchto vazeb, jde tedy o nejjednodušší vyjádření vodíkových vazeb.

Porovnávání dvou struktur lze provést ve všech programech pomocí zarovnávání molekul na sebe, kromě Rasmolu. U Rasmolu to lze maximálně vycentrováním dvou atomů z obou molekul (z každé molekuly jeden atom).

6. Závěr

Cílem této práce bylo seznámit se s programy DS ViewerPro 5.0, DS Visualizer 3.0, VMD a Rasmol, sloužících k vizualizaci a úpravě molekulárních struktur, vyřešit několik modelových úloh a jednotlivé programy zhodnotit a porovnat. Postup práce byl standardní v daném oboru a nevyžadoval formulovat hypotézy.

Nejdříve jsem objasnila úvod do vizualizace molekul. Problematika vizualizace prošla svým vývojem od ručního vyrábění fyzických modelů přes fyzickou pomoc strojů až k vizualizaci molekul za pomoci počítačové techniky.

Tato práce je zaměřena na jeden komerční program DS ViewerPro 5.0 a tři freewareové programy DS Visualizer 3.0, VMD a Rasmol.

DS ViewerPro 5.0 je komerční program, který dnes již ale není dostupný. Výhodou programu je dobrá přehlednost funkcí, snadné ovládání a schopnost kreslit molekuly, což další dva z porovnávaných programů neumí. Program s přehledem zvládá všechny základní operace úprav a vizualizací molekul. Nevýhodou může být až jeho přílišná jednoduchost oproti ostatním aplikacím, možná i proto již není dostupný. Tento program mi připadá ideální pro každého začátečníka, který by se chtěl tomuto tématu věnovat. Za nástupce se dá považovat DS Visualizer 3.0.

DS Visualizer 3.0 patří mezi volně stažitelné programy, je často aktualizován, což můžeme považovat za jednu z jeho mnoha výhod. Jako nástupce DS VieweruPro 5.0 dokáže vytvářet nové molekuly, má velmi bohatou a hlavně přehlednou menu nabídku. Oproti svému předchůdci obsahuje mnohem více nových funkcí.

Visual Molecular Dynamics (VMD) je dnes jedním z nejpoužívanějších programů. Z počátku se mi zdál velmi složitý, i po delším používání objevuji, že program má stále co nového nabídnout, a proto si myslím, že není vhodný pro začátečníky. VMD je ze všech čtyř porovnávaných programů nejvybavenější, a proto trvá déle, než se s ním uživatel zcela seznámí, což může být jeho kladem i záporem. Výhodou oproti ostatním aplikacím je schopnost upravovat trajektorii, což ostatní programy neumožňují.

Čtvrtým srovnávaným programem je Rasmol, který na první dojem vypadá velmi jednoduše, protože má velmi jednoduchou menu nabídku. Ovšem opak je pravdou. Rasmol kromě grafického okna používá také textové, které řídí většinu jeho funkcí, což může být pro jeho uživatele výhodou i nevýhodou.

Součástí této práce bylo i praktické řešení konkrétních úloh s pomocí výše uvedených programů. Programy jsem porovnávala za pomoci výsledků modelových úloh, v nichž jsem hodnotila kreslení molekul, měření vzdálenosti dvou atomů, velikosti úhlu, torzního úhlu, zobrazování vodíkových vazeb a porovnávání dvou struktur. Na základě výsledků vyšlo, že nejlépe funkčně vybaveným programem pro tyto úlohy je VMD.

Z vlastní zkušenosti mohu ale říci, že co se týká přehlednosti funkcí, jejich množství, stylu zobrazování atd., nejlépe se mi pracovalo s programem DS Visualizer 3.0.

7. Seznam použitých zdrojů

[1] *Alanin*. In Wikipedie – otevřená encyklopedie [online]. Poslední aktualizace 3. 4. 2011. Dostupné na WWW: <<http://cs.wikipedia.org/wiki/Alanin>>.

[2] *BMP* [online]. 2008. Dostupné na WWW: <<http://referaty-seminarky.cz/bmp/>>. ISSN 1802-422X.

[3] BERNSTEIN, H. J. *Manual RasMol 2.7.5* [online]. Glaxo Wellcome Research & Development, Stevenage, Hertfordshire, Velká Británie. Poslední aktualizace 17.7. 2009. Dostupné na WWW: <<http://www.openrasmol.org/doc/rasmol.html>>.

[4] BOJKOVSKÝ, M. *Termodynamika, vodíková vazba*. In Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze [online]. Praha: Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, 2007. Dostupné na WWW: <http://web.natur.cuni.cz/studiumchemie/materialy/Martin_Bojkovsky/diplomka_www/vodikova_vazba.html>.

[5] Discovery Studio, DS ViewerPro 5.0 Getting Started Guide. San Diego : Accelrys Inc., 2002. SM-DSVP-50-0206-GS-002

[6] File Extension SMI [online]. Dostupné na WWW: <<http://filext.com/fileextension/SMI>>.

[7] *Grafické formáty*. In Google sites [online]. Poslední aktualizace: 28. 4. 2011. Dostupné na WWW: <<http://sites.google.com/site/xgrafika/graficke-formaty>>.

[8] HENRY, D. *MDL file format (Quake's models)* [online]. Poslední aktualizace 20. 12. 2004. Dostupné na WWW: <<http://tfc.duke.free.fr/coding/mdl-specs-en.html>>.

[9] JANÁK, R. *PNG - dokonalý formát pro přenos obrazových dat* [online]. Dostupné na WWW: <<http://interval.cz/clanky/png-dokonalý-format-pro-prenos-obrazovych-dat/>>.

[10] KODÍČEK, M. *bilkoviny*. In *Biochemické pojmy : výkladový slovník* [online]. Praha: VŠCHT Praha, 2007 [cit. 2011-04-08]. Dostupné na WWW: <http://vydavatelstvi.vscht.cz/knihy/uid_es-002/ebook.html?p=bilkoviny>.

[11] KRÁTKÝ, M., KYJAŠKO, V., ŠIPR, O., VÁVRA, I., VELTRUSKÝ, I. *PŘÍRUČKA B8 (Bulletin)* [online]. 1. vyd. 2003, Praha. Středisko automatizace a výpočetní techniky, Fyzikální ústav AV ČR. Dostupné na WWW: <ftp://ftp.fzu.cz/pub/prirucky/b8_nov8.pdf>.

[12] KŘÍŽ, Z. *Vizualizace molekul a strukturní databáze*. In National Centre for Biomolecular Research [online]. Brno : Masarykova Univerzita, National Centre for Biomolecular Research, 2006. Dostupné na WWW: <<http://ncbr.chemi.muni.cz/school06/downloads/Visualization-Kriz.pdf>>.

[13] Molecular library. In Chemical Education Server, University of Pittsburgh [online]. Pittsburgh : University of Pittsburgh, Department of Chemistry. Dostupné na WWW: <<http://chemed.chem.pitt.edu/molecules/default.htm>>.

[14] PROKOP, M. *Načítání a zápis PDB souboru*. In National Centre for Biomolecular Research [online]. Brno, Masarykova univerzita, 2009. Dostupné na WWW: <http://ncbr.chemi.muni.cz/~martinp/C3220/PCChem_C8.pdf>.

[15] SAYLE, R. A. *RasMol v2.6, Quick Reference Card* [online]. Madrid, Španělsko, 1997. Dostupné na WWW: <http://www.ucm.es/info/bbm4/docencia/REFCARD_RasMol.pdf>.

[16] SAYLE, R. A. *RasMol: Technical Introduction*. In *University of Massachusetts*. [online]. Amherst, University of Massachusetts. 2008. Dostupné na WWW: <<http://www.umass.edu/microbio/rasmol/techintr.htm>>.

- [17] SLAVÍK, M., GRÉGR, J., JODAS, B. *Vizualizace chemických struktur na webu*. In Technická univerzita Liberec, Fakulta pedagogická [online]. Liberec, Technická univerzita, Fakulta pedagogická, 29. 06. 2007. Dostupné na WWW: <http://www.fp.tul.cz/kch/public/Slavik_Vizualizace_chemickyh_struktur_na_WWW.pdf>.
- [18] STARGEN, *SLOVNÍČEK - Grafický formát JPEG* [online]. Praha, 2000 – 2009. Dostupné na WWW: <<http://www.stargen.cz/slovník/format-jpg/>>.
- [19] *Struktura hemoglobinu a myoglobinu* [online]. 2006. Dostupné na WWW: <<http://www.scumdoctor.com/Czech/anatomy/circulatory-system/cardiovascular-organ/blood/hemoglobin/Structure-Of-Hemoglobin-And-Myoglobin.html>>.
- [20] ŠMEJKAL, P., KUČEROVÁ, *Porovnávání programů pro kreslení chemických objektů a možnosti jejich využití ve výuce*. In Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze [online]. Praha: Příroda Přírodovědecká fakulta, Univerzita Karlova v Praze, revize 17. 4. 2008. Dostupné na WWW: <everest.natur.cuni.cz/konference/2008/prezentace/smejkal.ppt>.
- [21] TESNER, P.; NĚMCOVÁ; P., KUSÁK, R. *Molekulové modelování* [online]. Praha, posl. aktualizace: 25.10.2009 [cit.]. Dostupné na WWW: <www.platinum.wu.cz/schola/modelovani.ppt>.
- [22] VAŘEKOVÁ, R. *Historie počítačové chemie*. [online]. Brno : Masarykova Univerzita, Fakulta informatiky, 2002. Dostupné na WWW: <<http://www.fi.muni.cz/usr/jkucera/pv109/2002/xvarekov.htm>>.
- [23] *Visual molecular dynamics*. In Theoretical and computational biophysics group [online]. Illinois : Resource for Macromolecular modeling and Bioinformatics University of Illinois at Urbana – Champaign. Poslední aktualizace 14. 3. 2011. Dostupné na WWW: <<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>>.

[24] *XTC file format*. In Pittsburgh Supercomputing Centre[online]. Verze 4.0. Pittsburgh, poslední aktualizace 18. 1. 2009. Dostupné na WWW:
<<http://www.psc.edu/general/software/packages/gromacs/online/xtc.html>>.

[25] ZELENÝ, T. *Souřadnicové systémy používané ve výpočetní chemii - Úvod do molekulárního modelování* [online]. Olomouc, Univerzita Palackého. Poslední revize 17. 2. 2008. Dostupné na WWW:
<http://fch.upol.cz/skripta/momo/souradne_systemy.pdf>.

[26] *Ztrátová komprese*. In Wikipedie – otevřená encyklopedie [online]. Poslední aktualizace 3. 1. 2009. Dostupné na WWW:
<http://www.multimediaexpo.cz/wiki/Ztr%C3%A1tov%C3%A1_komprese>.

[27] Menu Structure Monitor Dipole; dostupný z help:
qthelp://accelrys.discoverystudio.30.Client_dsv/Client/menu_structure_monitor_dipole.html

Seznam obrázků

Obrázek 1 – Soubor PDB, str. 14

Obrázek 2 – aplikace DS ViewerPro 5.0, str. 17

Obrázek 3 - aplikace DS ViewerPro 5.0 – select, str. 19

Obrázek 4 - aplikace DS ViewerPro 5.0 – Label Properties, str. 20

Obrázek 5 - aplikace DS ViewerPro 5.0 – Options, str. 22

Obrázek 6 - aplikace DS ViewerPro 5.0 – Label, str. 24

Obrázek 7 - aplikace DS ViewerPro 5.0 – Display Style, str.26

Obrázek 8 – aplikace DS ViewerPro 5.0 - New Data Table, str. 29

Obrázek 9 - aplikace DS Visualizer 3.0 – str. 30

Obrázek 10 - aplikace DS Visualizer 3.0 – Select, str. 32

Obrázek 11 - aplikace DS Visualizer 3.0 – Properties, str. 33

Obrázek 12 - aplikace DS Visualizer 3.0 – Data Table, str. 37

Obrázek 13 - aplikace DS Visualizer 3.0 - pí vazba, str.38

Obrázek 14 - aplikace DS Visualizer 3.0 – Labels, str. 40

Obrázek 15- aplikace DS Visualizer 3.0 – Create Surface, str. 42

Obrázek 16 - aplikace DS Visualizer 3.0 – Crystal Builder, str. 45

Obrázek 17 - aplikace DS Visualizer 3.0 – Scripts str. 47

Obrázek 18 – aplikace VMD – str. 52

Obrázek 19 – aplikace VMD - VMD Main, str.53

Obrázek 20 - aplikace VMD – Graphical Reprerentatins, str. 54

Obrázek 21 – Rasmol – str. 58

Obrázek 22 – vzdálenost dvou atomů – DS ViewerPro 5.0, str. 64

Obrázek 23 – vzdálenost dvou atomů – DS Visualizer 3.0, str. 65

Obrázek 24 – vzdálenost dvou atomů – VMD, str. 65

Obrázek 25 – vzdálenost dvou atomů – Rasmol, str. 66

Obrázek 26 – měření velikosti úhlů – DS ViewerPro 5.0 –str.67

Obrázek 27 - měření velikosti úhlů – DS Visualizer 3.0, str. 67

Obrázek 28 - měření velikosti úhlů – VMD, str. 68

Obrázek 29 - měření velikosti úhlů – Rasmol, str. 68

Obrázek 30 – Torzní úhel – DS ViewerPro 5.0, str. 69

Obrázek 31 – Torzní úhel – DS Visualizer 3.0, str. 70

Obrázek 32 – Torzní úhel – VMD , str. 71

Obrázek 33 - Torzní úhel – Rasmol, str. 71

Obrázek 34 – Kreslení molekul – DS ViewerPro 5.0, str. 72

Obrázek 35 – Kreslení molekul – DS Visualizer 3.0, str. 73

Obrázek 36 – zobrazení vodíkových vazeb – DS ViewerPro 5.0, str. 74

Obrázek 37 – zobrazení vodíkových vazeb – DS ViewerProVisualizer 3.0, str. 75

Obrázek 38 – zobrazení vodíkových vazeb – DS VMD, str. 75

Obrázek 39 - zobrazení vodíkových vazeb – Rasmol, str. 76

Obrázek 40 – Porovnávání dvou struktur – DS ViewerPro 5.0, str. 77

Obrázek 41 - Porovnávání dvou struktur – DS Vizualizer 3.0, str. 78

Obrázek 42 - Porovnávání dvou struktur – DS Vizualizer 3.0, str. 78

Seznam tabulek

Tabulka 1 – formáty DS Visualizer 3.0, str. 48 – 51

Tabulka 2 – výsledky modelových úloh, str. 80

8. Klíčová slova

DS ViewerPro

DS Visualizer

VMD

Rasmol

Discoverety Studio

Software

RasMol v2.7.1 Quick Reference Card

Copyright Roger Sayle 1992-1999
12 6x1 Mode Copyright Anne Mueller 1998
12.7.1 Copyright Herbert J. Bernstein 1998-1999

Mouse Buttons
Clicking on an atom identifies that atom in the command window. Moving the mouse whilst holding mouse buttons and/or control keys manipulates the molecule. The default bindings are described below.

Mac	Windows	Action
Left	Right	Rotate X-Y-Z
Right	Shift Left	Translate X-Y-Z
Shift Left	Shift Right	Zoom
Shift-Command	Control Left	Rotate Z
Control	Control Left	Z-Clipping (Shift)

General Commands

```
load [format] <filename> Load a molecule
pdb Brookhaven Protein Databank
mdl Molecular Design Limited's Mol file
mol2 Tripos' Sybyl Mol2 file format
alchemy CHARMM format and file
charmm CHARMM format and file
xyz J.P. Stewart's MOPAC file format
nopipe J.P. Stewart's MOPAC file format
cif IUCr CIF or mmCIF file format

exit Exit from RasMol Script
quit Terminate pipm execution

help [topic] [subtopic] Display on-line help topic
select <expressions> Update part of molecule
rerast <expressions> Display only part of mol.
set bondmode [mode] Change bond selection
script <filename> Execute file of commands
zap Delete molecule
```

Display Commands

```
wireframe [boolean] Display wireframe
stick [boolean] Display stick bonds
set bondmode all Match all atoms
set bondmode none Match no atoms
set bondmode not bonded Match non-bonded atoms

spacefill [boolean] Display spacefill spheres
spacefill <value> Specify atom sphere radius
spacefill temperature Specify temperature
spacefill user Match ...

backbone [boolean] Display alpha backbone
backbone <value> Specify backbone radius
ribbons [boolean] Display solid ribbons
ribbons <value> Specify ribbon width
strands [boolean] Draw ribbon as strands
strands <value> Specify ribbon width
set strands <value> Number of ribbon strands

label [boolean] Draw default atom labels
label <string> Label with arbitrary text
set fontsize <value> [PS]pt Set label font height
set fontstroke <value> Set label stroke width

sbonds [boolean] Display disulphide bonds
sbonds <value> Specify sbond radius
set sbonds backbone SSBonds between alphas
set sbonds sidechain SSBonds between alphas

bonds [boolean] Display hydrogen bonds
bonds <value> Specify bond radius
set bonds backbone Hydrobonds between alphas
set bonds sidechain Hydrobonds donor/acceptor

dots [boolean] Display dot surface
dots <value> Specify dot density
set solvent [boolean] VDW or solvent surface
set radius <value> Specify probe sphere rad.

set axes [boolean] Display co-ordinate axes
set unicolor [boolean] Display bounding box
set monitor [boolean] Display crystal unit cell
set backfade [boolean] Show distance monitor labels

set display selected Shade to any background color
set display selected Currently selected portion
set picking Series of nine commands:
off|ident|distance|angle|torsion|label|monitor|center|coord
```

Colour Commands

```
colour [object] <colour> Colour representation

Objects:
atoms bonds backbone
ribbons labels hbonds
sbonds dots axes
ribbons2

Predefined Colours:
Black Blue BlueTint Brown
Cyan Gold Grey Green
GreenBlue GreenTint HotPink Magenta
Orange Pink PinkTint Purple
Red RedOrange SeaGreen SkyBlue
Violet White Yellow YellowTint

Atom Colour Schemes:
opk amino shape
group chain structure
temperature charge user
all|terrace|model|keggle|equal

colour: hbonds type Colour bonds by offset
colour: dots potential Display potential surface
```

Manipulation Commands

```
rotate <axis> H|<value> Rotate molecule
translate <axis> H|<value> Translate molecule

zoom [boolean] Scale molecule
zoom <value> Specify magnification

slab [boolean] Enable/disable slabbing
slab <value> Move Z-clipping plane

centre [expression] Set centre of rotation
reset Initial transformation
set stereo [boolean] Control L & R images
```

Scripted Commands

```
load [format] filename Load molecule from script
pause Suspend script execution
echo Display text on command line
refresh Redraw image
set write [boolean] Save & write in scripts
```

Atom Expressions

Prefined Sets: alpha hydrophobic
 Residue Ranges: 3,16,12
 9-20
Boolean Operators: backbone and not alpha
 ligand or 196-199
Primitive Expressions: cys, glu, arg, as?
 set/0a, **p, glu24,1
 hem*pe, *ag, 2
Comparison Operators: atomo=4, atomo=6
 temperature>=900
 within(8,0,ligand)

Prefined Sets

at acidic
 alpha amino
 basic bonded
 charged cyclic
 hetero hydrogen
 large ligand
 nucleic polar
 pyrimidine selected
 small solvent
 water

define <identifier> <expression>
 User-defined sets

Rendering Commands

background <colour> Set background colour
set ambient [value] Depth-cueing/lighting
set shadows [boolean] Enable/disable shadows
set specular [boolean] Enable atom highlights
set specular [value] Control atom 'shininess'

Export Commands

write [format] <filename> Output image file
 gif
 his RIS RGB
 ps, eps Encapsulated PostScript
 monops Monochrome PostScript
 vectrs Cartoon PostScript
 bmp Microsoft Bitmap format
 pict Apple PICT file
 ppm Portable Pixmap
 sun, sunrle Sun Rasterfile
set vectrs <boolean> Enable cartoon outlines

write script <filename> Generate RasMol script
write povray <filename> Generate POVray data
write vram <filename> Generate VRML data
write molscript <filename> Generate MolScript script
write kinimage <filename> Output Kinimage file
save <filename> Save selected atoms
set kinimage <boolean> Set image file detail
set transparent <boolean> Allow transparent GIFs
write phdps <filename> Generate phd-psl data
write rbf <filename> Ramachandran plot data
write RPF <filename> Ramachandran printer plot

Misc. Commands

structure DSSP secondary structure
connect [boolean] Reconnect connectivity
renumber Sequentially number chains
show information Display molecule statistics
show phiPsi Display torsion angles
show RPF Ramachandran printer plot
show sequence Display molecule sequence
show symmetry Display crystal space group
set mouse manual Default mouse bindings
set mouse quanta Polymat's Quanta bindings
set mouse insight Biosym's Insight II bindings
set change CIS angle cutoff

Command Line Editing

In addition to the cursor keys, the following 'emacs' control keys may be used to edit the command line.
 Ctrl-H / Ctrl-D Delete previous/next character
 Ctrl-B / Ctrl-F Move backward/forward a character
 Ctrl-A / Ctrl-E Move to beginning/end of line
 Ctrl-P / Ctrl-N Display previous/next history

Colour Schemes

CPK Atom Colours

Carbon	light grey	(200,200,200)
Oxygen	red	(240,0,0)
Nitrogen	sky blue	(143,143,255)
Hydrogen	white	(255,255,255)
Sulphur	yellow	(255,200,50)
Phosphorous	orange	(255,165,0)
Chlorine	green	(0,255,0)
Bromine, Zinc	brown	(165,42,42)
Calcium	dark grey	(128,128,144)
Unknown	deep pink	(255,20,147)

Amino Acid Colours

ASP, GLU	bright red	(230,10,10)
CYS, MET	yellow	(230,230,0)
LYS, ARG	blue	(20,90,255)
SER, THR	orange	(250,150,0)
PRO, TYR	mid blue	(50,50,170)
ASN, GLN	cyan	(0,220,220)
GLY	light grey	(235,235,235)
LEU, VAL, ILE	green	(15,150,15)
ALA	dark grey	(200,200,200)
TRP	pink	(180,90,180)
HIS	pale blue	(130,130,210)
PRO	fish	(220,150,130)
others	tan	(190,160,110)

Secondary Structure Colours

Alpha Helix	magenta	(240,0,128)
Beta Sheet	yellow	(255,255,0)
Turns	pale blue	(96,128,255)
Other	white	(255,255,255)

Hydrogen Bond Type Colours

Offset -2	white	(255,255,255)
Offset +3	magenta	(255,0,255)
Offset +4	red	(255,0,0)
Offset +5	orange	(255,165,0)
Offset -3	cyan	(0,255,255)
Offset -4	green	(0,255,0)
default	yellow	(255,255,0)