

Základy práce s programem VMD

1. Web programu VMD: <http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

2. Spuštění programu

Spouštíme z terminálu. Nahrajeme příslušný modul: *module add vmd* a pak spustíme: *vmd* (bez ampersandu, protože program lze též ovládat z příkazového řádku). Program lze ovládat jak zadáváním příkazů v terminálu tak prostřednictvím okna s menu. Některé funkce jsou k dispozici pouze přes terminál (konzoli).

3. Načtení molekuly

Do svého adresáře si zkopírujte soubor s molekulou myoglobinu z */home/martinp/C2150/structs/mbc0.pdb*. Načtěte molekulu Menu: *File / New Molecule* stiskněte tlačítko *Browse* a vyberte soubor s myoglobinem *mbc0.pdb*. Stiskněte tlačítko *Load* a v grafickém okně se zobrazí načtená molekula.

4. Manipulace s molekulou – rotace, translace, změna velikosti

Existují tři základní režimy: rotace, translace a změna velikosti (angl. scaling) mezi kterými se přepíná pomocí kláves *r*, *t* a *s* (aktuální režim poznáme podle vzhledu kurzoru myši).

Ovládání myši je následující:

- režim rotace – levé tlačítko myši slouží k rotaci kolem os ležících v rovině obrazovky, prostřední tlačítko rotuje kolem předo-zadní osy. Při rychlém pohybu bude molekula samovolně rotovat
- režim translace – levé tlačítko myši slouží k translaci v rovině obrazovky, prostřední k translaci dopředu a dozadu
- režim změny velikosti – obě tlačítka myši mění velikost molekuly při pohybu vlevo a vpravo, při použití prostředního tlačítka je však změna větší. Pro změnu velikosti lze také použít rotaci kolečkem myši.

Pravé tlačítko myši u těchto režimů funguje stejně jako prostřední.

Stisknutím klávesy = se pozice/orientace/velikost molekuly vrátí do výchozího stavu. Této lze dosáhnout pomocí Menu: *Display / Reset View*.

Změna centra rotace: stiskneme klávesu *c* a klikneme myši na atom, který se stane novým centrem rotace.

5. Výpis informací o atomu

V grafickém okně s molekulou stiskněte klávesu 0 (nula) a klikněte na libovolný atom. Na obrazovce terminálu se vypíše informace o atomu (a residuu atd.).

6. Výběr atomů

Otevřete okno Menu: *Graphics / Representations*. V poli *Selected Atoms* budeme specifikovat které atomy se mají vybrat. Tyto atomy se pop potvrzení klávesou Enter zobrazí, ostatní zůstanou skryté. Výběr atomů lze zadávat následovně:

- Podle typu molekuly: *protein, water, nucleic*. Vyzkoušejte zadat *protein*.
- Atomy podle jména např. *name C*, i více atomů, např. *name C CA NO*. Názvy atomů odpovídají názvům uvedeným v PDB souboru. Vyzkoušejte zadat *name C CA NO* (jedná se o atomy peptidické páteře).
- Podle jména residuí, např. *rename HEM*.
- Podle pořadí residuí, např. *resid 23* zobrazí residuum 23. Lze specifikovat i více residuí *resid 31 35 41 58* nebo rozmezí *resid 27 to 32*.
- Lze používat regulární výrazy, např. *name "C.*"* zobrazí všechny atomy jejichž jméno začíná na C.
- Můžeme zadat negaci *not*, např. *not protein* zobrazí všechny atomy které nejsou součástí proteinu. Vyzkoušejte zadat *not protein*.
- Lze používat logické výrazy *and* a *or*, např. *rename HEM and not name "N.*"* zobrazí všechny nedusíkové atomy v hemové skupině.
- Peptidickou páteř lze zobrazit pomocí *backbone*.

- Je možné specifikovat atomy ve udané vzdálenosti od jiných atomů *within <distance> of <selection>* , např. atomy ve vzdálenosti 6 Angstrom od hemu: *within 6 of resname HEM* .
- Podle hodnoty souřadnic *x, y, z*, např. *x > 1 and x < 5* .
- Pro konstrukci složitějších výrazů použijeme záložku *Selection*.
- Pro zobrazení všech atomů zadáme *all* .

7. Popisky atomů, měření

Vybereme *Menu: Mouse / Label / Atoms* a klikáme na jednotlivé atomy. Chceme-li popisky schovat, opět klikneme na daný atom. Pro měření vzdáleností mezi atomy, úhlů a dihedrálních úhlů vybereme v menu *Bonds, Angles, Dihedrals* a pak klikáme postupně na 2, 3 nebo 4 atomy. (Pro testování je vhodné zobrazit pouze několik residuí, např. *resid 1 to 4*). Namísto menu lze použít klávesy **1, 2, 3, 4**.

Další operace s popisky je možné dělat v okně *Menu: Graphics / Labels* . Zde je možné jednotlivé popisky zobrazit nebo skrýt nebo vymazat. Pro označení více položek použijte *<Shift>*. Na záložce *Picked Atom* se zobrazí informace o atomu (resp o atomu na který bylo kliknuto jak poslední při specifikaci vybraného popisku).

8. Nastavení grafické reprezentace molekuly

Budeme pracovat v *Menu: Graphics / Representations* . Jednotlivé části struktury myoglobinu zobrazíme pomocí různých grafických reprezentací.

- Peptidickou páteř proteinu zobraíme reprezentací *cartoon*:
 - Nejdříve zobrazíme pouze atomy peptidické páteře: do políčka *Selected Atoms* napište *backbone* a stiskněte tlačítko *Apply* (nebo klávesu *Enter*).
 - Pátěř proteinu zobrazíme reprezentací *cartoon* a obarvíme podle typu sekundární struktury: v položce *Coloring Method* vyberte *NewCartoon* a v položce *Coloring Method* vyberte *Secondary Structure*.
 - Vytvoříme novou reprezentaci – stiskněte tlačítko *Create Rep*
- Molekulu hemu zobrazíme reprezentací *licorice*: do políčka *Selected Atoms* napište *resname HEM* a v položce *Coloring Method* vyberte *Type* a v položce *Drawing Method* vyberte *Licorice*. Opět vytvořte novou reprezentaci stisknutím tlačítka *Create Rep* .
- Iont SO_4 a molekulu CO zobrazíme pomocí vdW koulí: do políčka *Selected Atoms* napište *resname SO4 CO*, v položce *Coloring Method* ponechte *Type* a v *Coloring Method* vyberte *VDW*. Opět vytvořte novou reprezentaci stisknutím tlačítka *Create Rep*
- Histidiny 64 a 93 zobrazíme pomocí CPK: do políčka *Selected Atoms* napište *resid 93 64*, v položce *Coloring Method* ponechte *Type* a v *Coloring Method* vyberte *CPK*.
- Zobrazení povrchů – v *Drawing method* vybereme *QuickSurf* (alternativně *Surf, MSMS*). Můžeme nastavit material na *Transparent*. Povrch vyčleňte jako samostatnou reprezentaci (stisknutím tlačítka *Create Rep*). Povrch pak můžeme zobrazit jako průsvitný (*Material: Transparent*) a skrze něj budeme vidět reprezentace schované pod povrchem. Zkuste např. zobrazit povrch residuí v okolí hemu do 6 Angstrom (*protein and within 6 of resname HEM*).

9. Rendering obrázku

Vybereme *Menu: File / Render* a v položce *Render the current scene using* vyberte *Snapshot* a zadejte vhodné jméno souboru s koncovkou *.tga* a potvrdíme tlačítkem *Start Rendering*. Soubor si můžete prohlédnout například pomocí programu GIMP (spustíte z příkazového řádku příkazem *gimp*).

Alternativně můžete v *Render the current scene using* vybrat *Tachyon* a ve *Filename* zadáte vhodné jméno souboru (bez koncovky *.tga*). Vygenerují se dva soubory, soubor s obrázkem bude mít koncovku *.tga* .

10. Hlavní okno – seznam molekul

obsahuje možnost práce s více molekulami. Při dvojkliknutí na písmena T A D F můžeme:

- T – specifikuje výchozí molekulu an kterou se budou aplikovat zadávané příkazy.

- Pouze jedna molekula může být takto označena.
- A – specifikuje, že molekula je aktivní, tj. budou na ni aplikovány některé příkazy (např. animace)
- D – specifikuje, zdali bude molekula zobrazena/skryta v grafickém okně
- F – specifikuje, zda-li bude molekula zafixována, tj. nebude reagovat na rotace a translace
- Dvokliknutím na název molekuly můžeme změnit její jméno.

Vymažte načtenou molekulu (klikněte pravým tlačítkem myši na molekulu v seznamu a vyberte *Delete Molecule*). Poté znovu naštěte soubor *mbco.pdb* a potom soubor *star.pdb* (*/home/martinp/C2150/structs/star.pdb*), který obsahuje také strukturu myoglobinu ale s molekulou CO v jiné pozici. Vyzkoušejte si schovávání a zobrazení jednotlivých molekul. V okně *Menu: Graphics / Representations* nastavte různou barvu pro jednotlivé struktury. Pro obě molekuly zobrazte pouze hem, CO a residua 64 93 (*resname HEM CO or resid 64 93*). Prozkoumejte rozdíly mezi oběma strukturami. Zkuste změnit polohu jedné struktury vůči druhé (pomocí písmena F v seznamu molekul) – původní polohu molekul lze obnovit klávesou = (resp. *Menu: Display / Reset View*).

Úloha 1:

Z PDB databáze stáhněte strukturu halolkandehalogenázy *2DHC* a načtěte ji do VMD. Ve struktuře vyznačte vzdálenost mezi atomy uhlíku DCE a atomy kyslíku Asp124. Potom vytvořte grafickou reprezentaci, kdy páteř proteinu bude zobrazena podobně jako ve výše uvedeném příkladu myoglobinu. Molekuly vody nebudou zobrazeny, kromě molekul vody nacházejících se do 6 Angstrom od substrátu DCE, budou zobrazeny modelem VDW. Substrát DCE bude také zobrazen modelem VDW. Dále budou residua Asp124, trp125, trp175 a Phe172 zobrazeny reprezentací *licorice* a kolem nich bude zobrazen molekulový povrch šedou průhlednou barvou (pouze kolem residuí). Vygenerujte obrázek ve formátu TGA (jak je popsáno v bodě 9).

Obrázek z úlohy 1 uložte do odevzdávnice.