

## Pokročilá práce s programem VMD

### 1. Zobrazení vodíkových vazeb

- Načtěte strukturu *Dhla\_CBT.pdb* (který najdete ve složce */home/martinp/C2150/structs/*)
- Otevřete okno *Menu: Graphics / Representations*. Vytvořte novou reprezentaci (tlačítkem *Create Rep*) a u ní nastavte *Drawing Method* na *HBonds*. Tloušťku čáry *Line Thickness* je vhodné nastavit na vyšší hodnotu (např. 5). Je-li *Coloring Method* nastaveno na *Name*, zobrazí ze modře vodíkové vazby, jejichž donorem je N a červeně je-li donorem O. Vazby jsou lépe viditelné pokud se nastaví na barvu oranžovou (*Coloring Method: ColorID*, barva č. 3). Pro lepší přehlednost je možné zobrazit první grafickou reprezentaci jako *NewCartoon*.
- Je možné nastavit kritéria pro detekci vodíkových vazeb: *Distance Cutoff* – maximální vzdálenost D-A, *Angle Cutoff* – maximální úhel D-H-A

### 2. Ukládání zobrazeného stavu molekul

- Zobrazený stav uložte pomocí *Menu: File / Save Visualization State* a specifikujte jméno souboru (dejte mu koncovku *.vmd*) Ukončete VMD a znovu spusťte a pak zvolte *Menu: File / Load Visualization State* a vyberte příslušný soubor. Dojde k načtení vizuálního stavu uloženého v souboru.
- Aby tato funkcionality fungovala správně, musí být VMD spuštěno ze stejného adresáře jako předtím a zdrojové soubory (PDB) musí být dostupné v původních adresářích. V případě problémů s nalezením souboru je potřeba editovat uložený soubor a zkontrolovat cesty k souborům na řádcích s příkazy *mol new*, *mol addfile* a *mol load*.

### 3. Zobrazení sekvence

- Vyberte *Menu: Extensions / Analysis / Sequence Viewer*. V zobrazeném okně můžeme klikat na jednotlivá residua, která se zvýrazní.
- Více residuí najednou lze označit přiděním <Shift> a klikáním na jednotlivá residua.
- Označená residua se zobrazí též v seznamu reprezentací, kde můžeme nastavit odlišný způsob zobrazení případně je skrýt/zobrazit (dvojkliknutím v seznamu residuí).
- Vpravo dole je vysvětleno barevné kódování. Zkratky znamenají: T – ohyb (turn), E – beta list (extended conformation), B – isolated bridge, H – alfa helix, G – 3-10 helix, I – pi-helix, C – neuspořádaný úsek (coil).

### 4. Ramachandranův diagram

- Vyberte *Menu: Extensions / Analysis / Ramachandran Plot*. V seznamu *Molecule* vyberte první molekulu.
- Klikáním na jednotlivé body v grafu se nalevo zobrazí příslušná informace o residuu.
- Chceme-li zobrazit v grafu jen některá residua, zadáme výběr do políčka *Selection* (např. *resid 1 to 100*).
- Také lze zobrazit 3D-histogram pomocí příslušných tlačítek (histogram se zobrazí v grafickém okně kde se zobrazují struktury). Histogram zobrazuje četnost výskytu residuí v různých oblastech grafu.

### 5. Vytváření animací

- Vyberte *Menu: Extensions / Visualization / Movie Maker*.
- Pomocí tlačítka *Set working directory* vyberte složku kam se bude ukládat vytvořený video soubor a v poli *Name of movie* uveďte jméno vytvářeného souboru. Nastavte *Movie duration* na vhodný počet sekund (4-10). Stiskněte tlačítko *Make Movie*.

Generování souboru může trvat až desítky sekund. Po celou dobu generování videa musí být okno se strukturou zobrazené a viditelné.

- Vytvořený videosoubor (zpravidla s koncovkou *.mpg*) lze přehrát přehrávačem *totem* nebo *mplayer* (spouští se *mplayer jmeno\_souboru*).
- Vyzkoušejte možnosti nastavení v menu *Movie Settings*. Vyzkoušejte *Rotation about Y axis*.

## 6. Práce s trajektoriím

- Načteme trajektorii simulace polyalaninu ve vakuu. Budeme potřebovat základní soubor popisující molekulu *alanin.psf* a soubor s trajektorií *alanin.dcd* (obsahuje souřadnice atomů v jednotlivých bodech trajektorie). Oba soubory se nacházejí v */home/martinp/C2150/structs/*.
- Vyberte *Menu: File / New Molecule*, tlačítkem *Browse* vyberte soubor *alanin.psf* a stiskněte tlačítko *Load*. Potom stejným způsobem načtete soubor s trajektorií *alanin.dcd*. Po načtení se spustí animace. Znovu ji můžeme spustit pomocí tlačítek v dolní části okna s načtenými strukturami – vyzkoušejte funkci těchto tlačítek a dalších nastavení animace.
- Zobrazte Ramachandrov diagram (*Menu: Extensions / Analysis / Ramachandran Plot*), vyberte molekulu *alanin.psf* v seznamu molekul. Po spočtení animace se graf bude aktualizovat pro každý snímek trajektorie. Kliknutím na bod v grafu se pomocí nevyplněných čtverečků zobrazí pozice danéh residua v rámci ostatních snímků trajektorie (na tyto čtverečky také můžeme klikat a zobrazí se nám příslušný snímek).
- Vyzkoušejte si vytvoření souboru s animací trajektorie – viz, předchozí bod **Vytváření animací**. V menu *Movie Settings* vyberte *trajectory*.
- Vyzkoušejte načíst oba soubory ještě jednou, první soubor ale načtete jako novou molekulu a k ní načtete *alanin.dcd*. Druhou molekulu obarvíte odlišnou barvou. Vyzkoušejte si v seznamu molekul, jak můžete deaktivovat (dvojklikněte na písmenko A) jednotlivé molekuly, které pak nebudou animovány. Ovládání tlačítek a pozice ukazatele snímku se vždy vztahují ke struktuře označené jako top (dvojklikněte na písmenko T).

### Úloha 1:

Načtete do VMD strukturu *protein1.prmtop* a k ní trajektorii *protein1.traj* (obojí v */home/martinp/C2150/structs/*). Ve struktuře nechte zobrazit vodíkové vazby oranžovou barvou. Model struktury zobrazte reprezentací *licorice*. Vytvořte videosoubor s krátkou animací trajektorie (jako *Trajectory step size* zvolte 10 a délku animace 8 s).

**Videosoubor z úlohy 1 uložte do odevzdávárny.**