

C7800

Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

Referenční manuál - VMD

Petr Kulhánek

kulhanek@chemi.muni.cz

Národní centrum pro výzkum biomolekul, Přírodovědecká fakulta
Masarykova univerzita, Kotlářská 2, CZ-61137 Brno

VMD

<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

Program pro vizualizaci molekul. Po bezplatné registraci dostupný pro MS Windows a Linux.

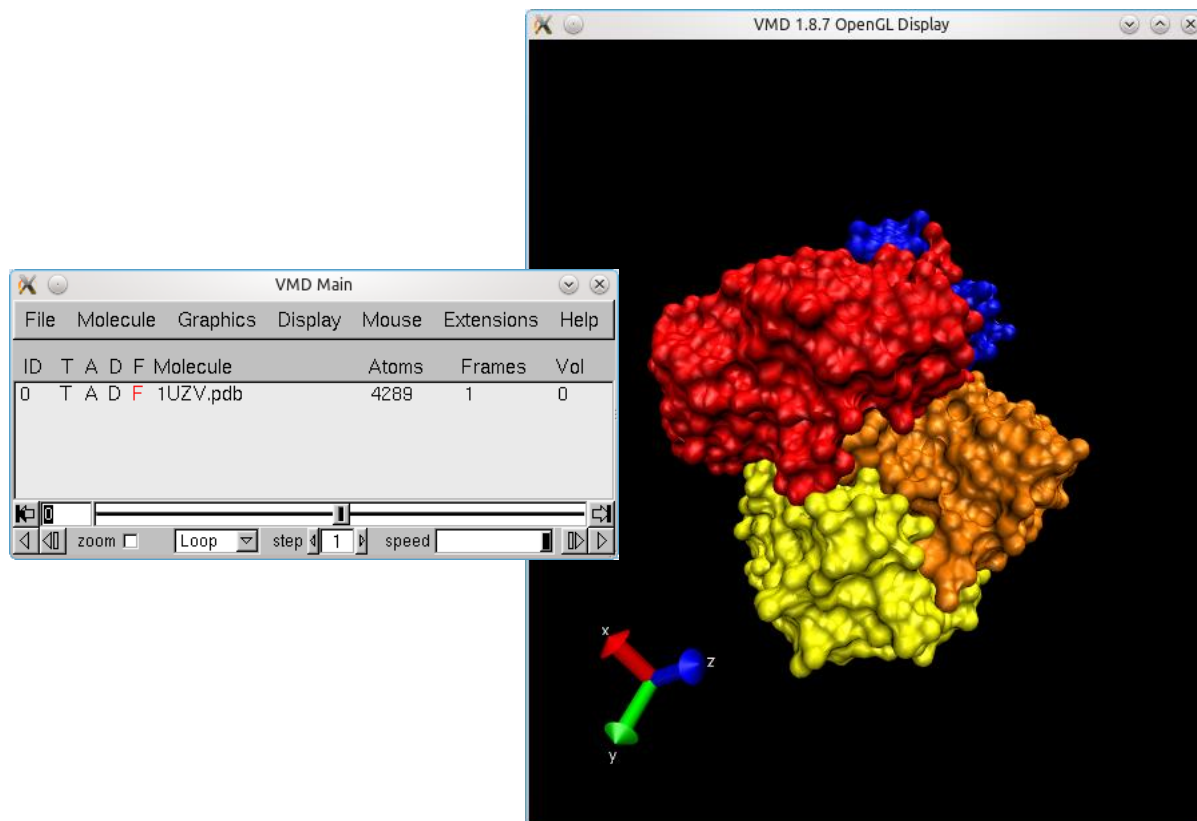
Program VMD

<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>

Program slouží k vizualizaci (bio)molekul a k analýze výsledků molekulárně dynamických simulací. Program je volně dostupný (vyžaduje registraci) a je dostupný i pro operační systém MS Windows.

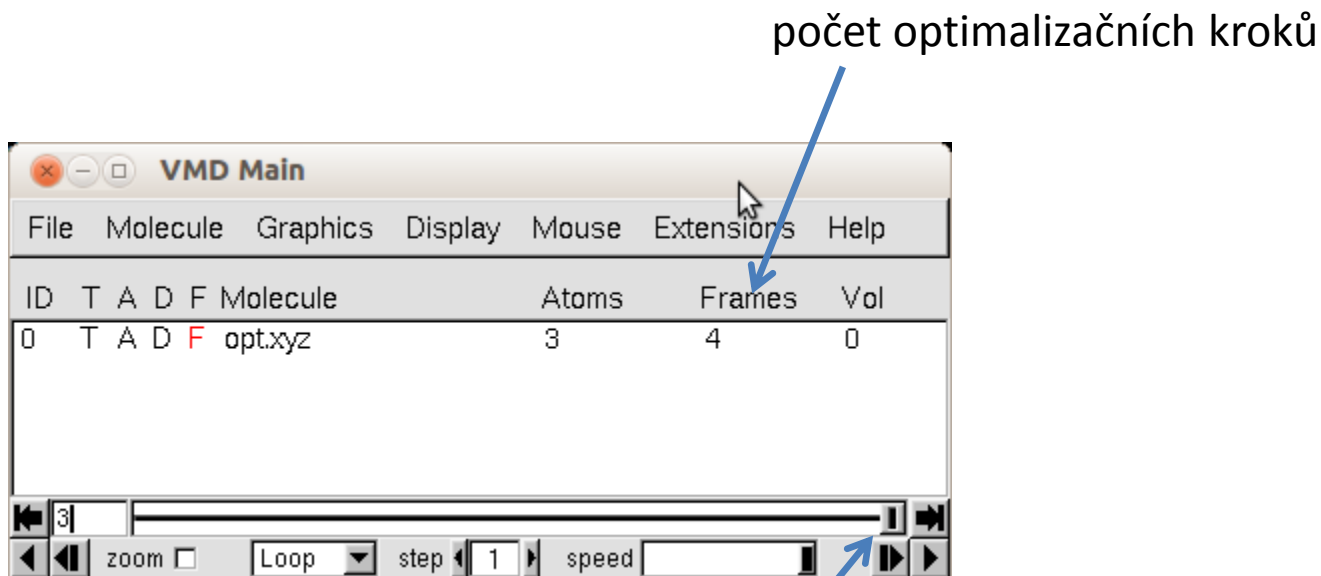
Spuštění programu:

```
$ module add vmd  
$ vmd
```



Vizualizace optimalizace geometrie

Do programu načteme **xyz** trajektorii (průběh optimalizace) vyextrahovanou skriptem **extract-gopt-xyz** z modulu **qmutil**.



Volumetrická data

Vytvoření volumetrických dat

Volumetrické data (**cube** soubory) je možné vytvořit programem **cubegen** z formátovaného checkpointu, což je soubor obsahující vlnovou funkci (resp. rozvojové koeficienty).

Postup:

- 1) příprava formátovaného checkpointu

```
$ formchk input.chk input.fchk
```

- 2) výpočet volumetrických dat

- 1) elektronová hustota

```
$ cubegen 0 Density=SCF input.fchk density.cube 0
```

- 1) elektrostatický potenciál

```
$ cubegen 0 Potential=SCF input.fchk potential.cube 0
```

vstupní soubor z QM výpočtu

výstupní soubory pro vizualizaci

formchk a **cubegen** jsou z modulu **gaussian**.

Dokumentace:

http://gaussian.com/g_tech/g_ur/u_formchk.htm

http://gaussian.com/g_tech/g_ur/u_cubegen.htm

Vizualizace volumetrických dat

Volumetrické data (cube soubory vytvořené programem cubegen) lze načíst přímo do programu vmd. Ve výchozí vizualizaci se zobrazí molekula v čárovém modelu bez volumetrických dat.

Volumetrická data lze zobrazit jako (Representations):

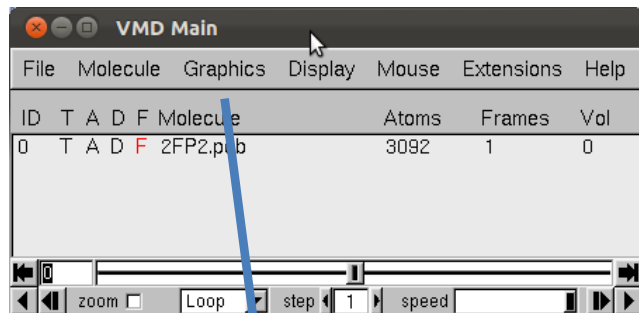
- isoplochu (isosurface)
- řez (volumeslice)

Mapování elektrostatického potenciálu na isoplochu elektronové hustoty:

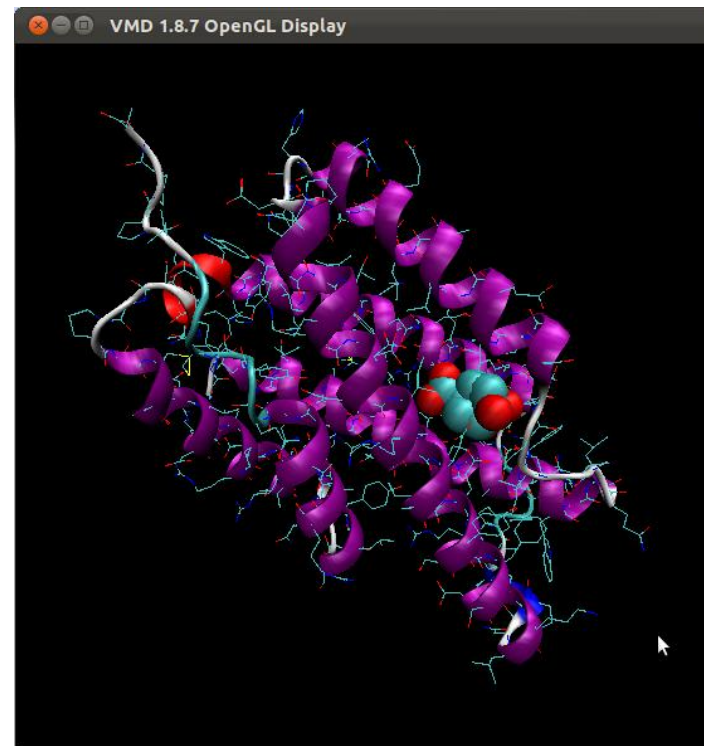
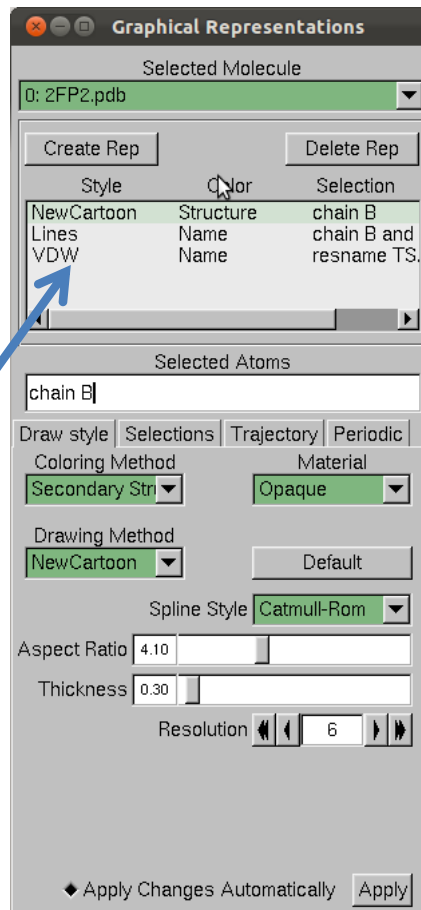
- 1) načteme hustotu a elektrostatický potenciál do jedné molekuly
- 2) zobrazíme isoplochu elektronové hustoty
- 3) pro isoplochu zvolíme vybarvení (Coloring Method) podle volumetrických dat (Volume) - zvolíme elektrostatický potenciál, škála barev se nastavuje na záložce Trajectory (Color Scale Data Range)

Grafické reprezentace

Program VMD – změna modelů

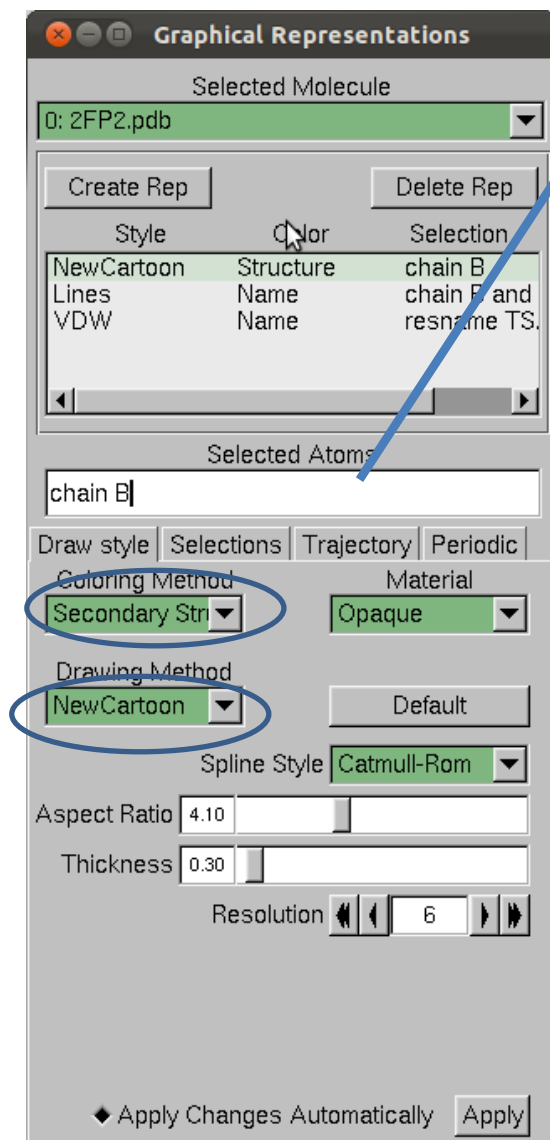


Representation



dvojklik na řádek
deaktivuje grafickou
reprezentaci

Program VMD – změna modelů



Selekcce (volba, maska) části molekuly:

- protein – zvolí všechny aminokyseliny
- water – zvolí všechny molekuly vody
- chain X – zvolí řetezec X
- resname X – zvolí residuum s názvem X
- resid X – zvolí residuum s číslem X
- within 5 of Y – zvolí všechny atomy, které jsou vzdálené 5 Å od atomů v masce Y
- not hydrogens – nezobrazuj atomy vodíků

Příklady:

- chain A
- chain A B C
- resname ASP GLU
- resid 1
- resid 1 to 100
- within 6 of resid 100
- residuum může být aminokyselina, ligand, či část ligandu

Trajektorie

Analýza trajektorií

Graphical Representations

Selected Molecule
0: switch.parm7

Create Rep Delete Rep

Style	Color	Selection
Lines	Name	all
Lines	Name	not water

Selected Atoms
not water

Draw style | Selections | **Trajectory** | Periodic

Update Selection Every Frame
Update Color Every Frame

Color Scale Data Range:
0.00 0.00 Set Autoscale

Draw Multiple Frames: (now, b:e, b:s:e)
0:10:1500

Trajectory Smoothing Window Size:
0

začátek konec
každý desátý snímek

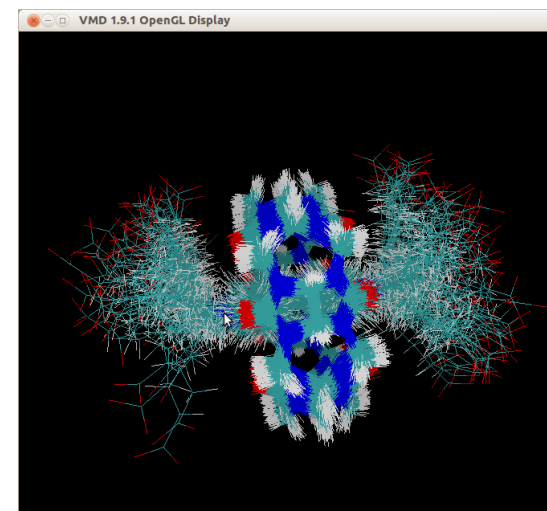
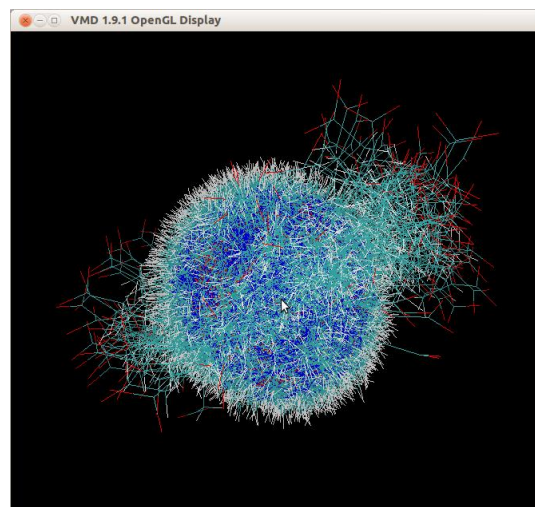
VMD Main

ID	T	A	D	F	Molecule	Atoms	Frames	Vol
0	T	A	D	F	switch.parm7	20654	1500	0

1499

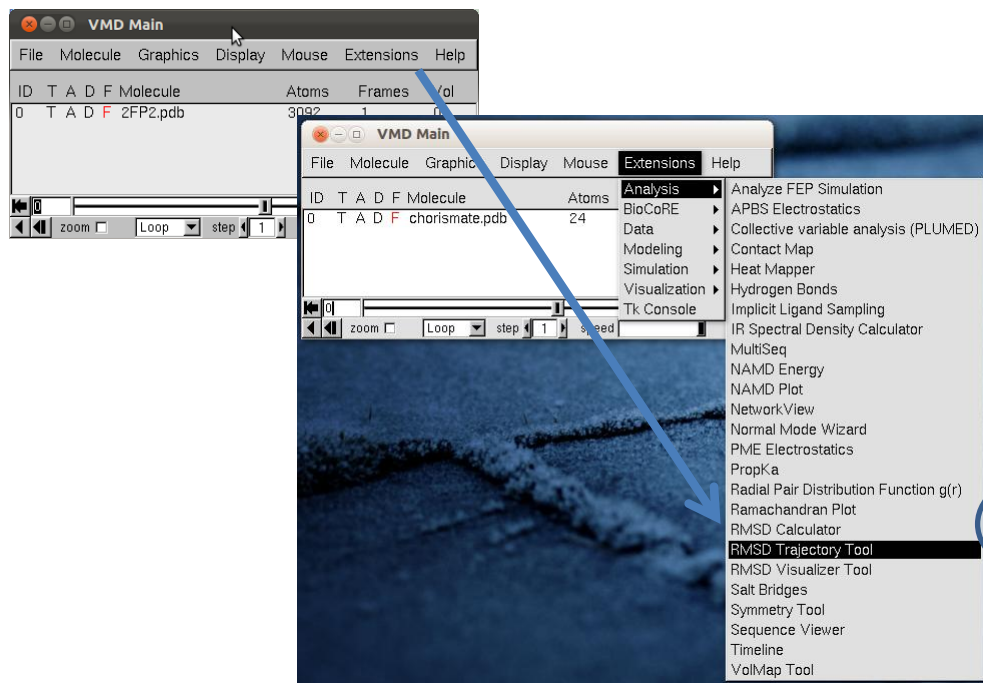
zoom Loop step 1 speed

počet snímků v trajektorii posuv mezi snímky trajektorie



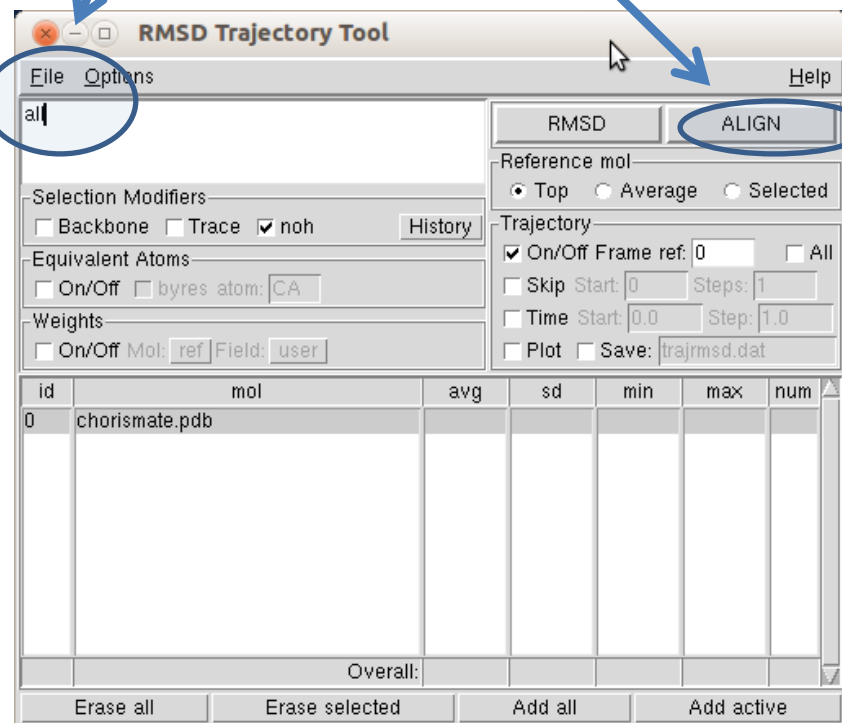
před a po odstranění translačně rotačních pohybů

Odstranění TR pohybů



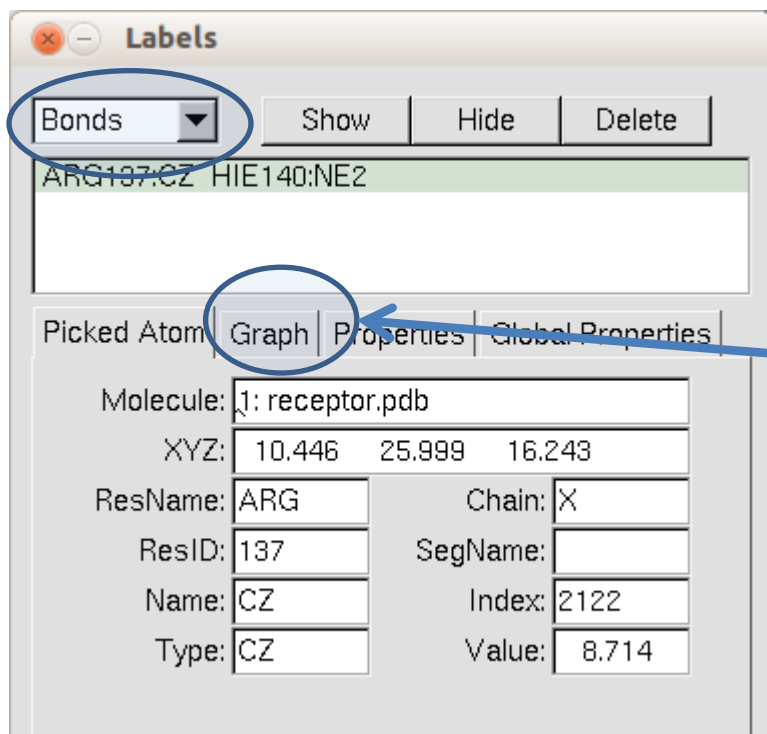
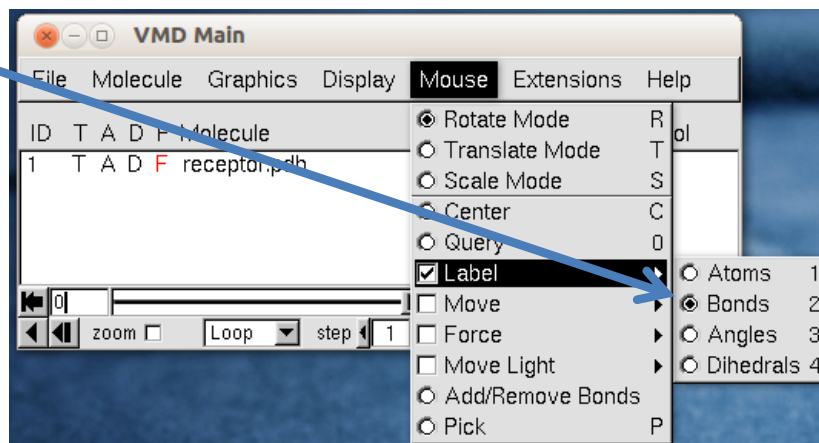
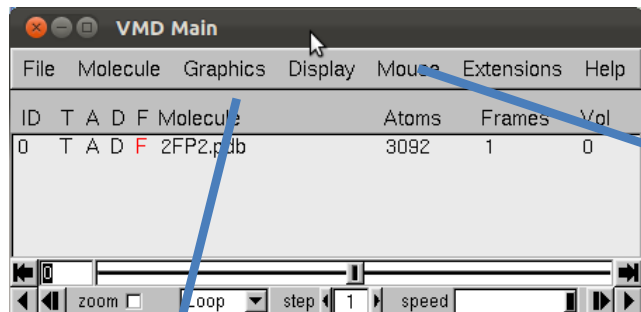
Změnit na „all“ (všechny atomy), nebo na část molekuly, kterou u které chceme provést superimpozici

Odstraní translačně-rotační pohyb zvolených atomů



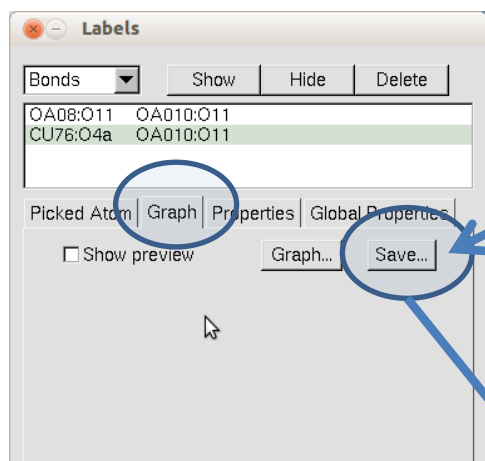
Při vyhodnocování průběhu **trajektorií** je vhodné odstranit **translačně-rotací (TR) pohyb** celé soustavy. Usnadní se tak vizuální analýza pohybů.

Měření



pokud máme načtenou trajektorii, zobrazí časový průběh měřené vzdálenosti

Histogramová analýza



Uložit na disk jako textový soubor. Soubor (např. distance.txt) obsahuje dva sloupce: číslo snímku a naměřenou hodnotu.

další nastavení programu histogram, viz:
`$ histogram -h`

```
$ module add cats  
$ histogram -c 2 distance.txt distance.hist
```

analyzuj druhý sloupec,
tj. měřenou hodnotu

