

C7790

Počítačová chemie a molekulové modelování I

8. Programy pro molekulové modelování I

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.

Avogadro

http://avogadro.openmolecules.net/wiki/Main_Page

Program pro stavbu a vizualizaci molekul. Volně dostupný pro MS Windows a Linux.

Přehled funkcionality: <https://www.youtube.com/watch?v=xdmLoBILmqS>

Nemesis

<https://lcc.ncbr.muni.cz/whitezone/development/nemesis/>

Program pro stavbu a vizualizaci molekul. Alfa verze pro Linux. Testovací verze pro MS Windows na vyžádání.

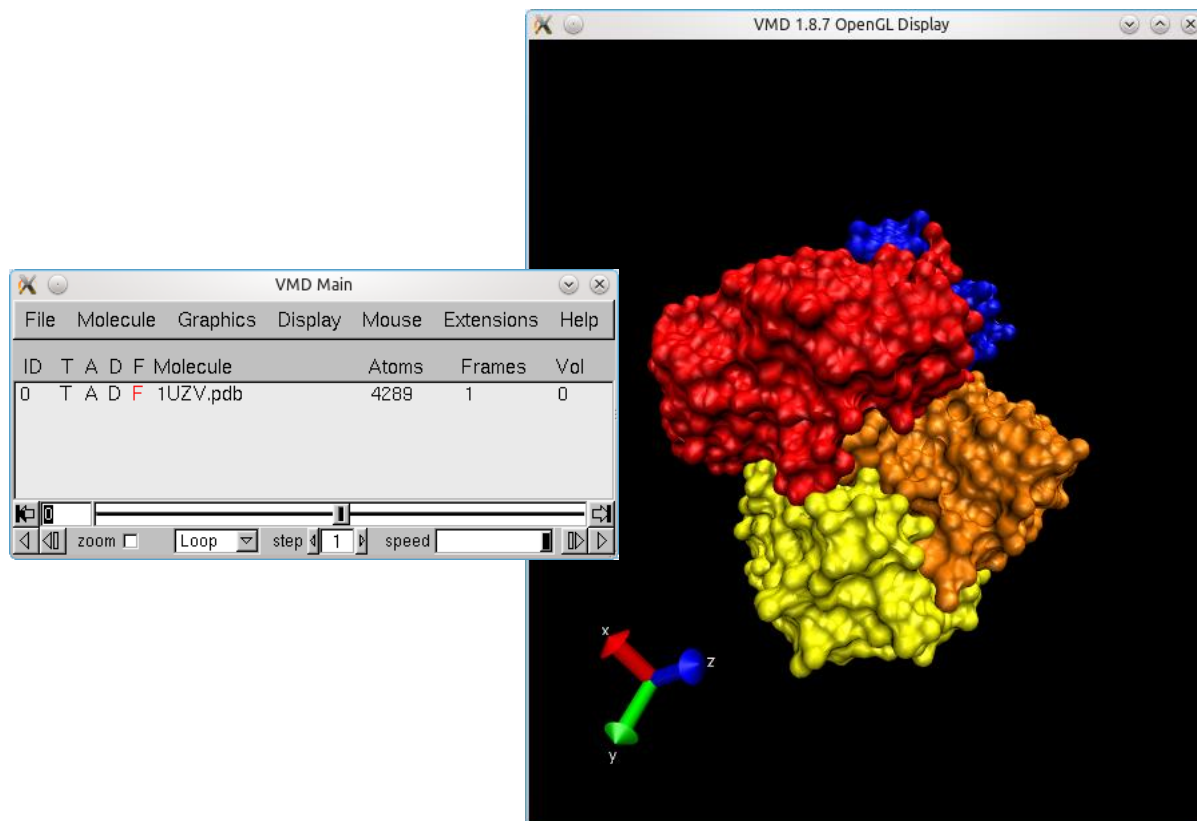
Program VMD

<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
```



Cvičení XYZ formát

1. V textovém editoru vytvořte soubor popisující model vody s následujícími parametry. Délka vazeb O-H bude 1 Å. Vazebný úhel H-O-H bude 90°. Uložte jej do domovského adresáře jako **water.xyz**
2. Vytvořený soubor načtěte do programu VMD.
3. Ověřte skutečnou délku vazeb a velikost úhlu H-O-H. (VMD Main >Mouse->Label, správa popisků v VMD Main >Graphics>Labels)
4. Molekulu vody zobrazte v následujících modelech: Lines, CPK, Licorice, VDW.

OpenBabel

Open Babel is a chemical toolbox designed to speak the many languages of chemical data. It's an open, collaborative project allowing anyone to search, convert, analyze, or store data from molecular modeling, chemistry, solid-state materials, biochemistry, or related areas.

http://openbabel.org/wiki/Main_Page

Konverze programem openbabel:

```
$ module add openbabel  
$ babel input.xyz output.mol2
```

alternativně


```
$ babel ixyz input.txt -omol2 output.out
```

Seznam podporovaných formátů:

```
$ babel -L formats
```

Nápověda:

```
$ babel -H
```

 **velké H**

Cvičení

1. Aktivujte modul openbabel.
2. Vypište formáty, které instalovaná verze open babelu podporuje.
3. Zkonvertujte soubor **water.xyz** do formátu Sybyl Mol2 format a uložte jej pod názvem **water.mol2**
4. Otevřete soubor **water.mol2** v textovém editoru a diskutujte význam jeho částí.
5. Zkonvertujte soubor **water.xyz** do formátu InChI a uložte jej po názvem **water.txt**
6. Otevřete soubor **water.txt** v textovém editoru a diskutujte význam jeho částí.

Avogadro

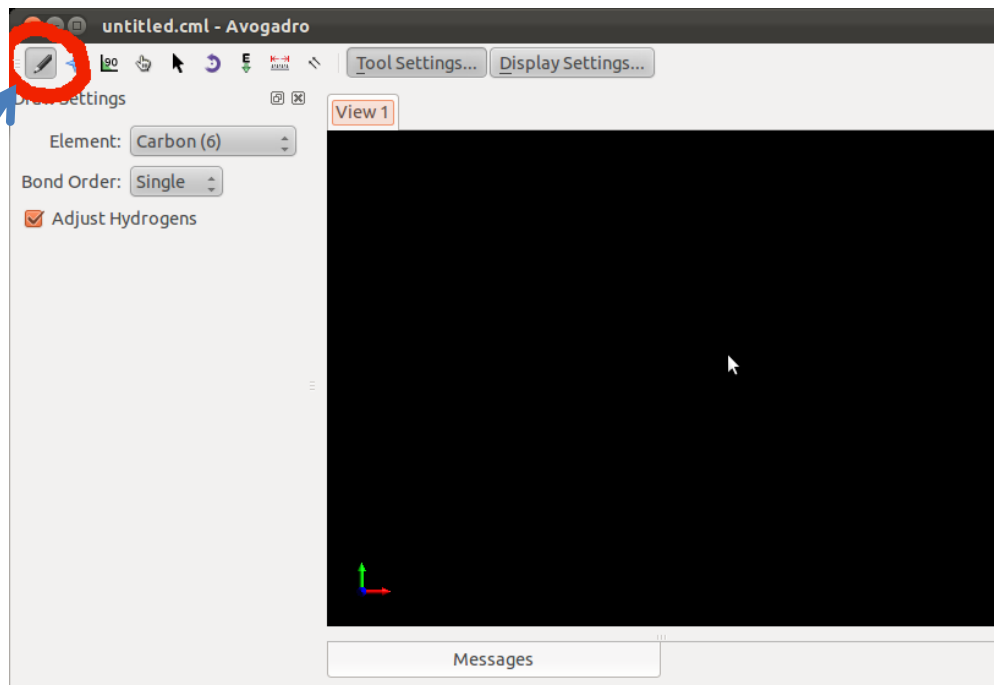
Ke stavbě 3D struktury molekul můžete použít program **Avogadro**. Jedná se o volně šiřitelný program, který lze používat jak pod operačním systémem MS Windows tak i pod Linuxovými klony (např. Ubuntu).

Spuštění programu:

```
$ module add avogadro
```

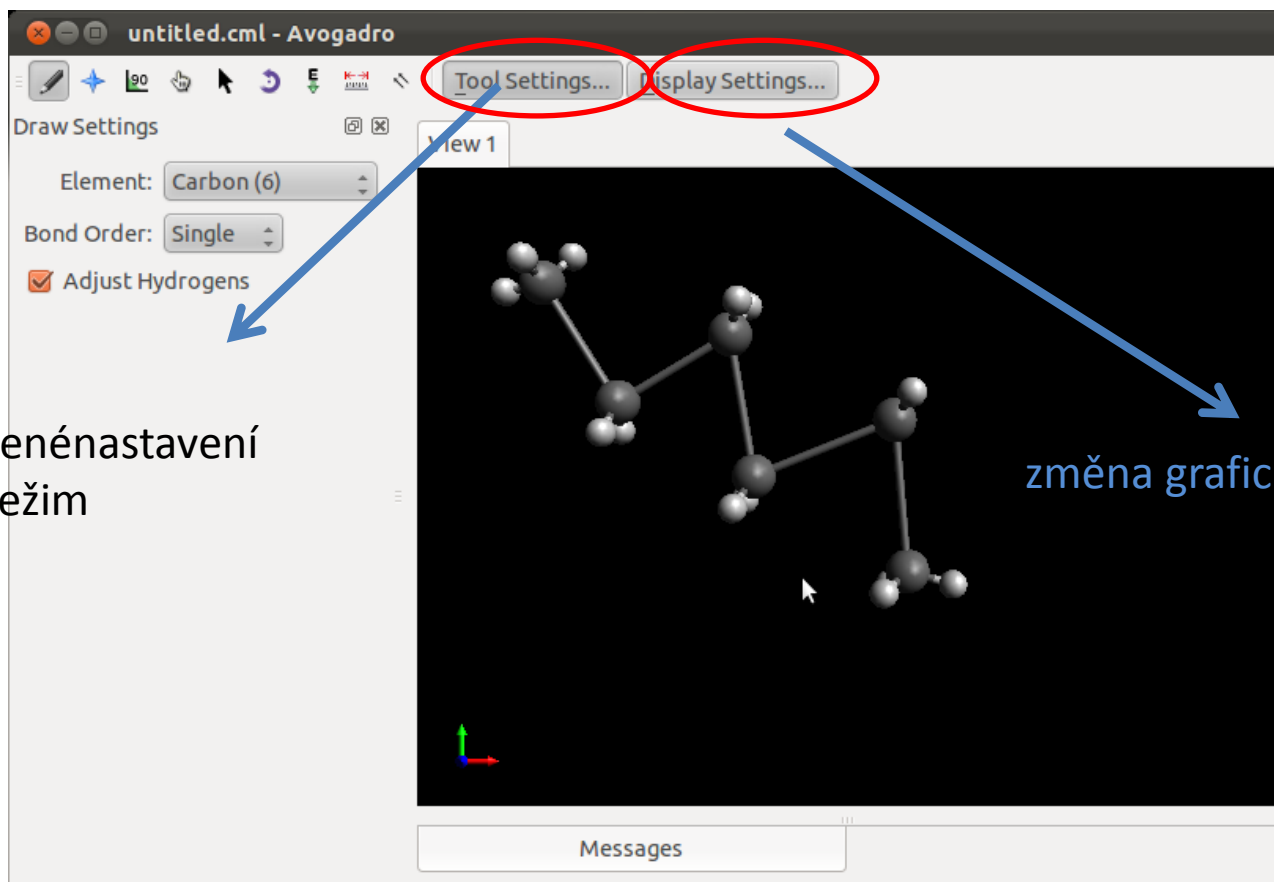
```
$ avogadro
```

aktivuje editaci



Avogadro

Při stavbě molekuly nejsou délky vazeb, úhly a další parametry molekuly optimální. Je to dáno způsobem, jakým se v programu Avogadro, struktury editují. Draft struktury je proto nutné před dalším použitím upravit pomocí optimalizace geometrie.

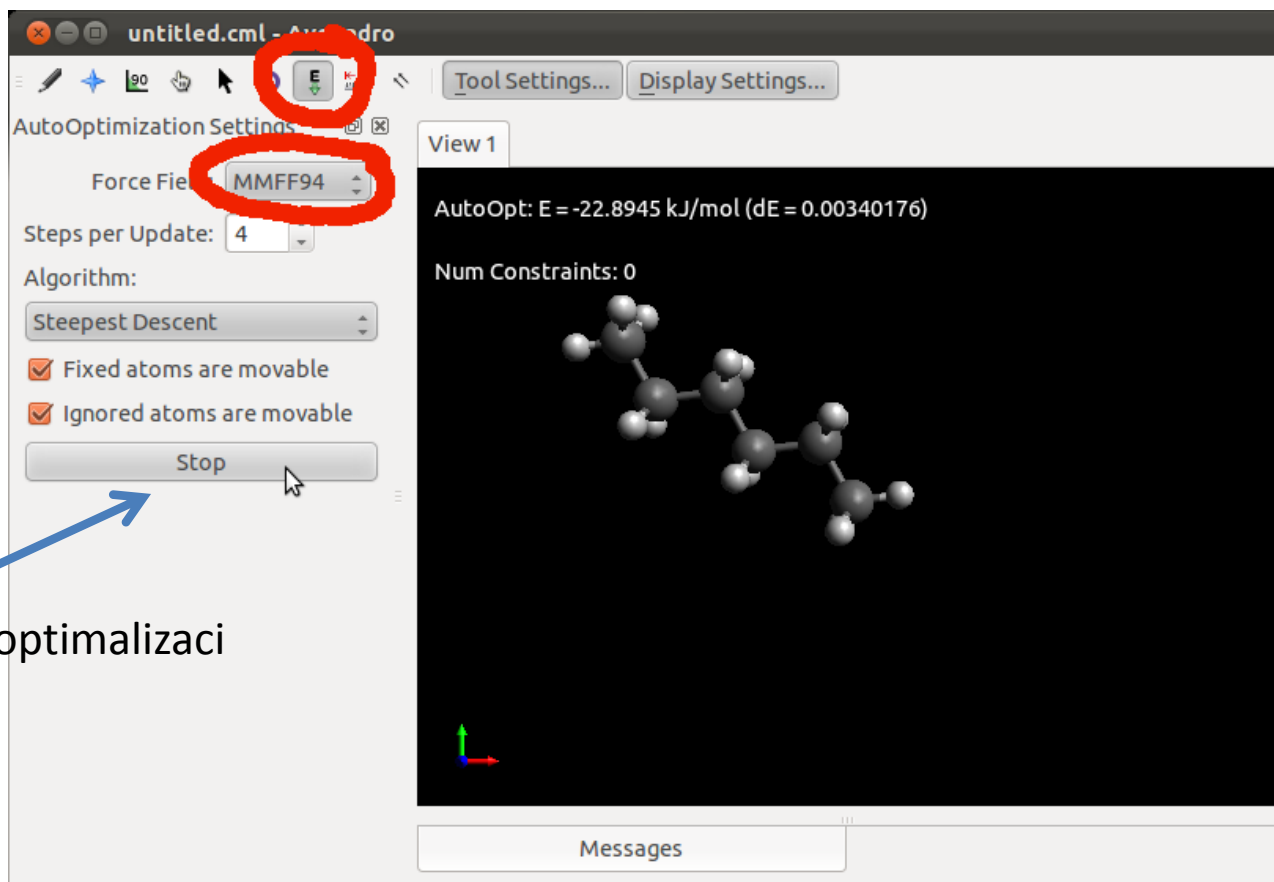


zobrazí rozšířená nastavení pro zvolený režim

změna grafické vizualizace

Avogadro

Program používá pro optimalizace geometrie metody molekulové mechaniky (MM). Pro její správnou funkci musíte ve struktuře správně uvést řady vazeb. Protože MM je empirickou metodou, musíte zvolit i typ parametrizace. V našem případě budeme používat silové pole MMFF94.



zapíná/vypíná optimalizaci geometrie

Nemesis

Spuštění programu:

\$ module add nemesis

\$ nemesis

The screenshot shows the Nemesis Molecular Modelling Package interface. The window title is "Project 1: NEMESIS - Molecular Modelling Package". The interface is divided into several panels:

- Structures panel:** Contains a table with columns "Name" and "SID". It lists "Structure 1" with SID "1".
- Build panel:** Contains various chemical symbols and buttons for building molecules, such as "Delete atom", "Make bond", "Break bond", and "Delete bond". The "Optimize" button is circled in red.
- Geometry panel:** Contains a table with columns "Position", "Distance", "Angle", and "Torsion".
- Profile objects panel:** Contains a table with columns "Name" and "Type". It lists "Light 1", "Background 1", "Standard Model 1", and "Freezed Atoms 1".

Annotations with blue arrows point to specific features:

- "vrstvy" points to the "Structures" panel.
- "stavba/editace molekuly" points to the "Build panel".
- "optimalizace geometrie" points to the "Optimize" button in the "Build panel".
- "měření" points to the "Geometry" panel.
- "grafické modely" points to the "Profile objects" panel.

Nastavení silového pole pro optimalizaci: menu Geometry-> Optimizer Setup

Nemesis

Myš:

Levé tlačítko	selekce
Prostřední tlačítko	rotace
Levé tlačítko	posun
Kolečko	zoom

Modifikátory:

Shift	XZ -> Y pohyby
Ctrl	přepíná mezi sekundárním a primárním manipulátorem

Cvičení I

1. Načtete do programu **Avogadro** molekulu ze souboru **water.xyz**
2. Provedte optimalizaci její geometrie. Jaké je optimální délka vazby a vazebný úhel?
3. Zobrazte molekulu v různých grafických reprezentacích.
4. Načtete do programu **Nemesis** molekulu ze souboru **water.xyz** (Import Structure -> OpenBabel)
5. Zobrazte molekulu v různých grafických reprezentacích.
6. Provedte optimalizaci její geometrie. Jaké je optimální délka vazby a vazebný úhel? Srovnajte s výsledky získanými v programu Avogadro. Vysvětlete případné rozdíly.

Cvičení II

1. V programu **Nemesis** nakreslete strukturní vzorec molekuly benzoové v projektu Sketch Structure
2. Převeďte molekulu do 3D reprezentace. Ohodnoťte kvalitu převodu.
3. V programu **Nemesis** nakreslete strukturní vzorec molekuly cyklohexanu v projektu Sketch Structure.
4. Převeďte molekulu do 3D reprezentace. Ohodnoťte kvalitu převodu.
5. V projektu Sketch Structure programu **Nemesis** vložte molekulu fullerenu C_{60} ve formátu SMILES (View->Insert->SMILES...).
6. Převeďte molekulu do 3D reprezentace. Ohodnoťte kvalitu převodu.
7. Úlohu s molekulou C_{60} zopakujte v programu **Avogadro**. Jakým způsobem lze získat lepší model?