

# TSM

# Modelování molekulárních struktur

Referenční manuál - VMD

Petr Kulhánek

[kulhanek@chemi.muni.cz](mailto: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.

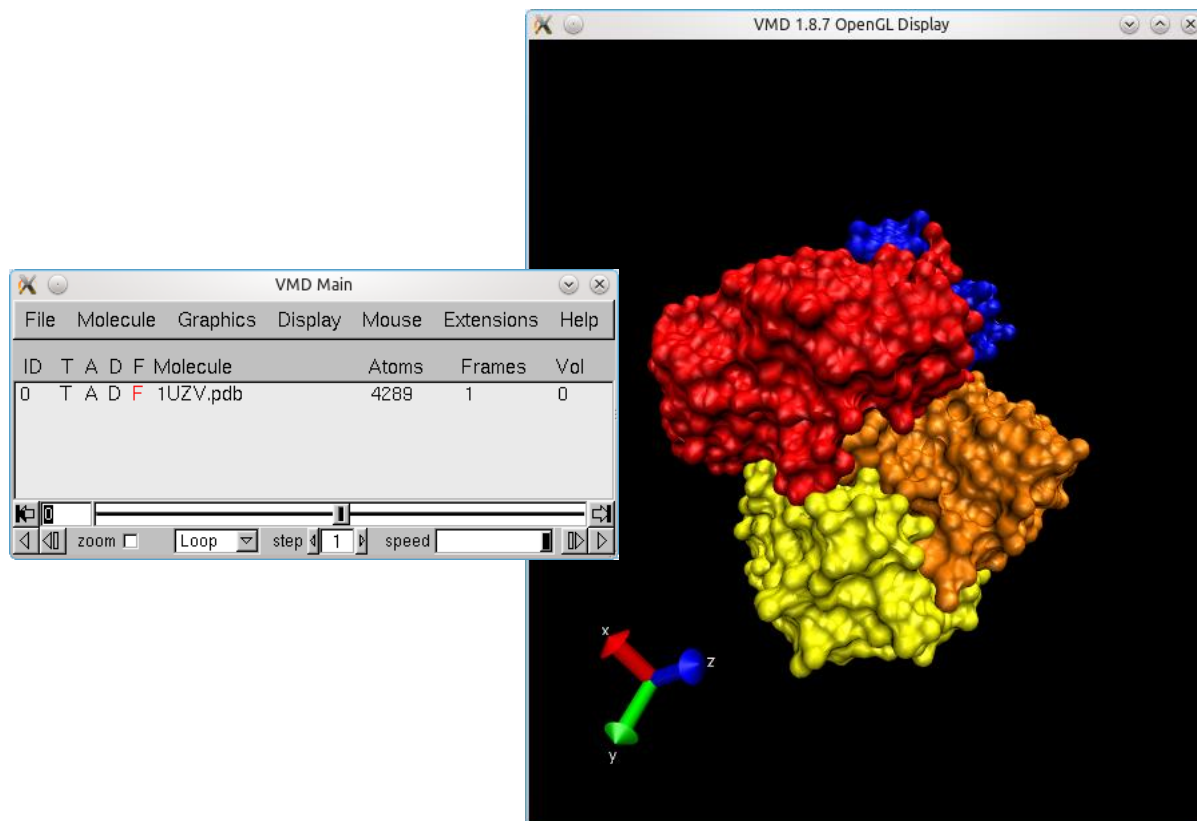
# Program VMD

<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.

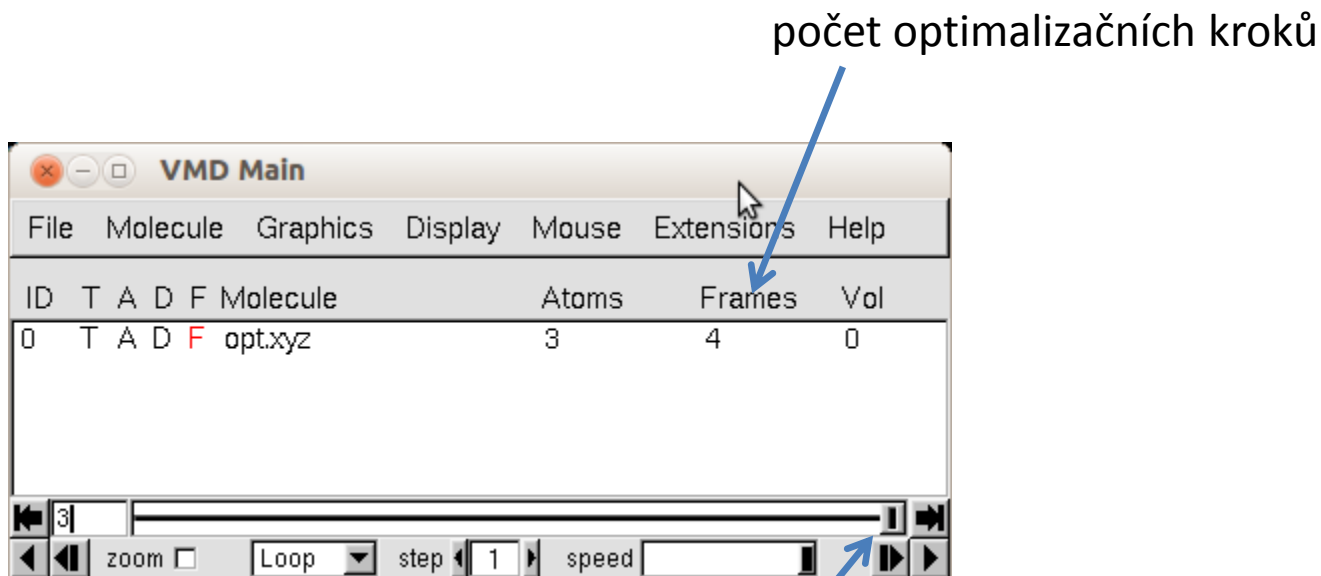
## Spuštění programu:

```
$ 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_formchk.htm)

[http://gaussian.com/g\\_tech/g\\_ur/u\\_cubegen.htm](http://gaussian.com/g_tech/g_ur/u_cubegen.htm)

# Úprava cube souborů

**Program VMD neumí načítat cube soubory vytvořené v nové verzi programu gaussian.**

Soubory je nutné nejdříve manuálně upravit. Soubor se otevře v textovém editoru a provedete se editace dle níže uvedených instrukcí.

toto číslo je nutné vymazat, zbytek souboru musí zůstat nezměněn

127	-11.006092	-16.572305	-18.256495	1
107	0.333333	0.000000	0.000000	
105	0.000000	0.333333	0.000000	
111	0.000000	0.000000	0.333333	
6	6.000000	-3.555456	-1.551346	7.591081
1	1.000000	-3.536611	-2.249523	9.541648
1	1.000000	-5.484607	-1.320526	6.909884
7	7.000000	-2.375503	0.944071	7.576727
.	.....	.....	.....	.....



# 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)

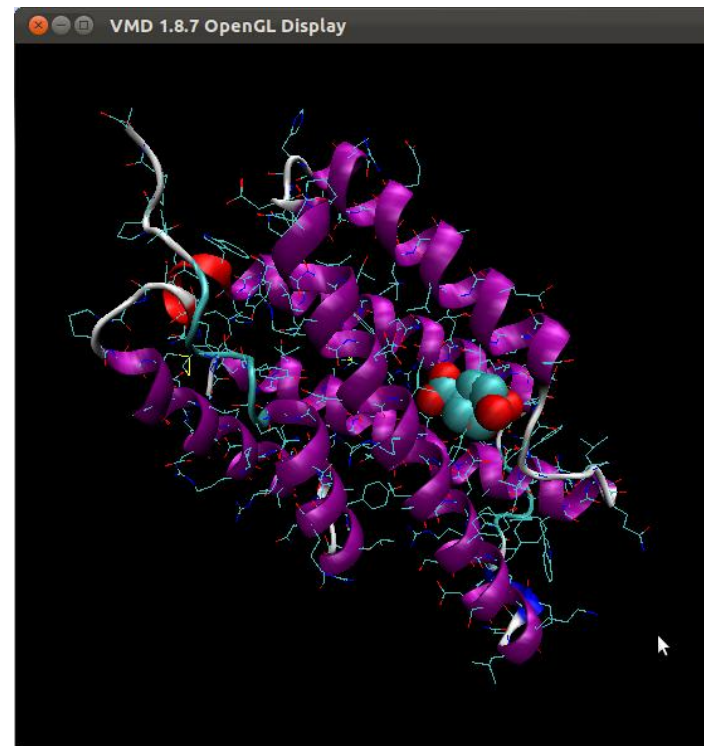
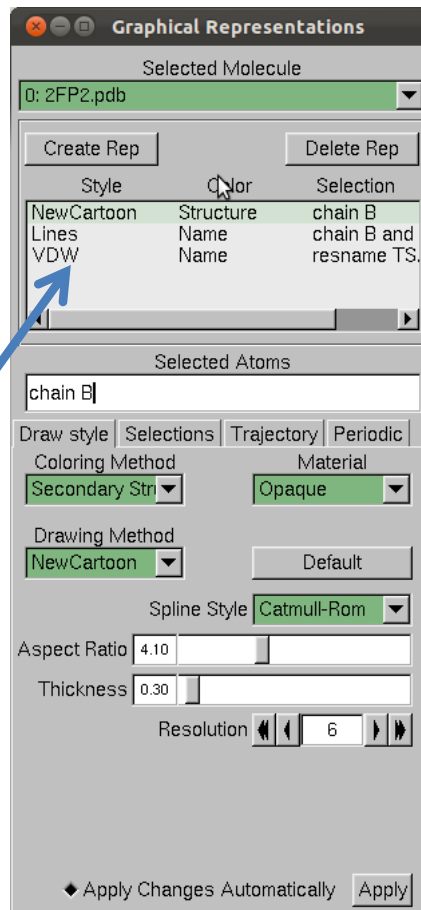
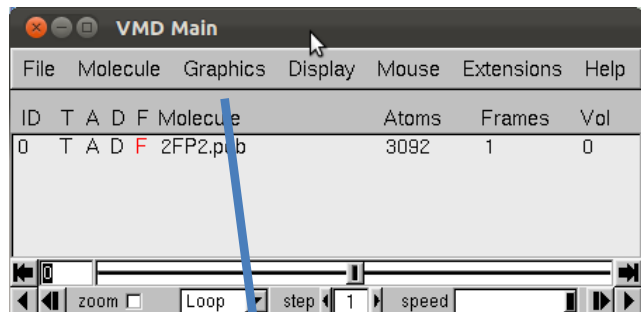
Mapování elektrostatického potenciálu na isoplochu elektronové hustoty:

- 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

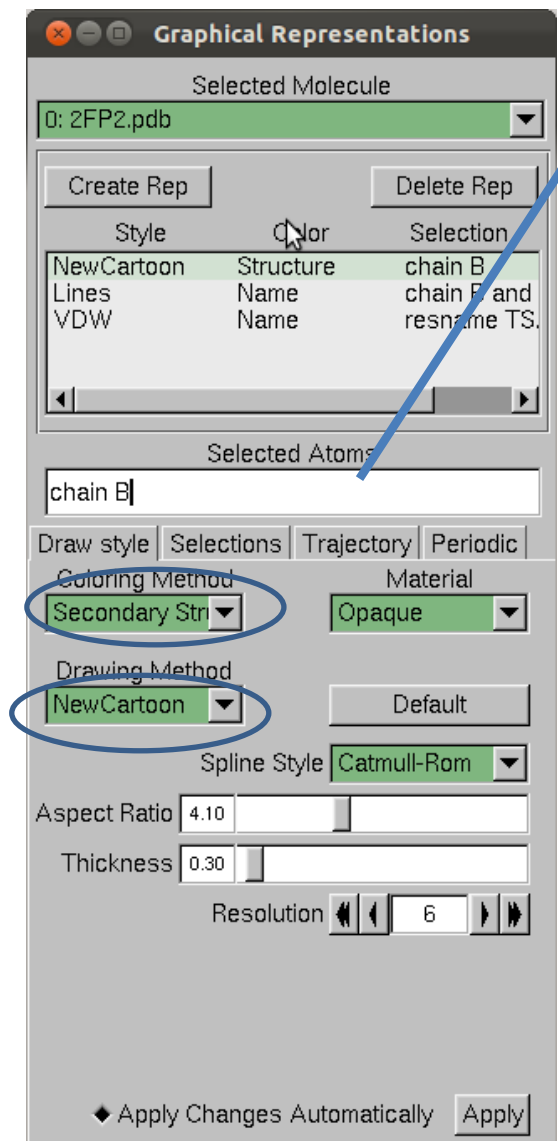
# Program VMD – změna modelů



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

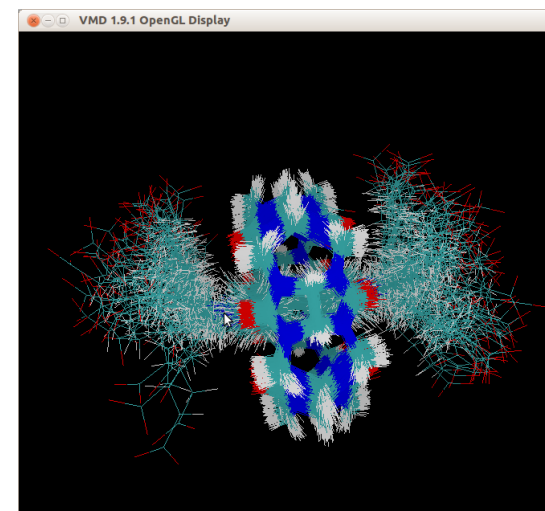
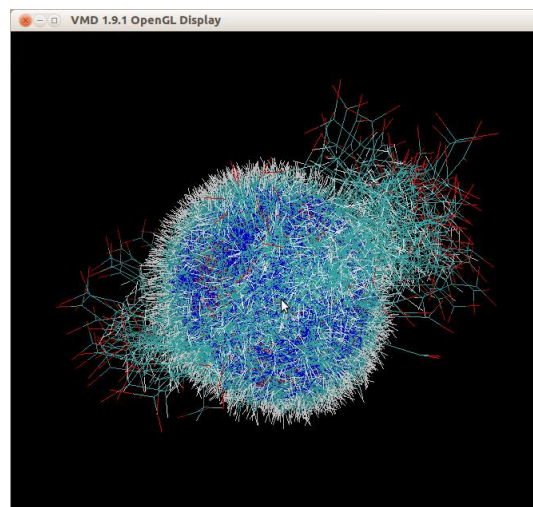
File Molecule Graphics Display Mouse Extensions Help

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

1499

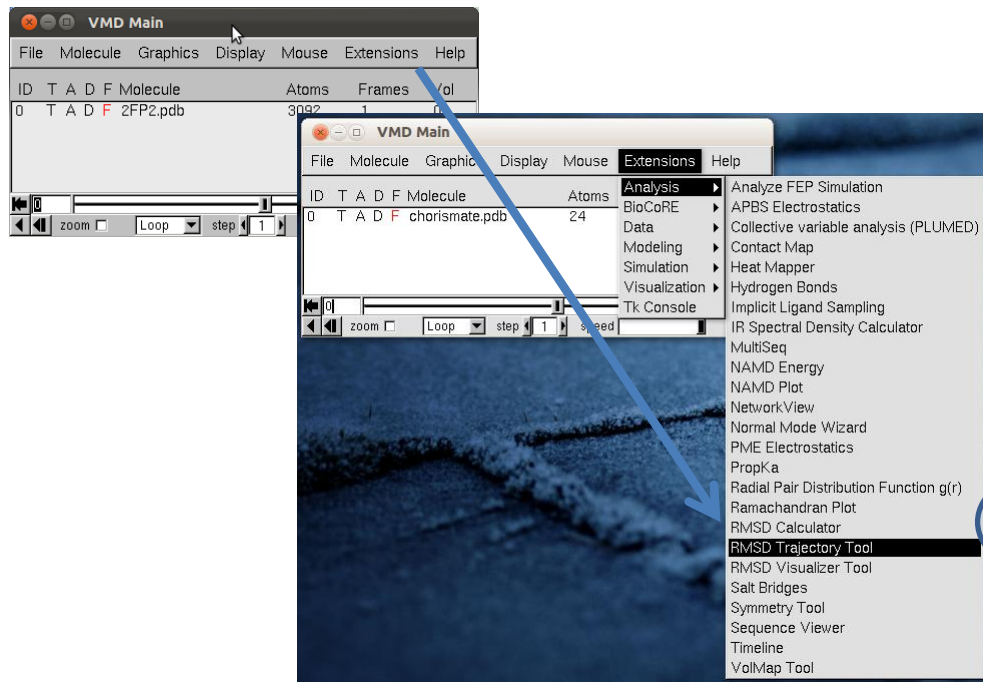
zoom Loop step 1 speed

počet snímků v trajektorii      posuv mezi snímky trajektorie



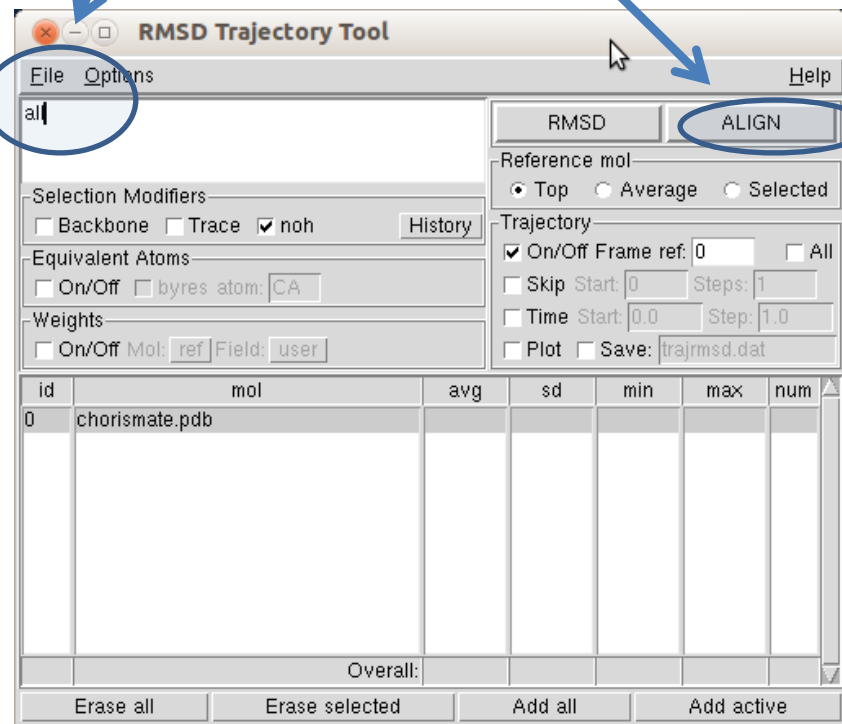
před a po odstranění translačně rotačních pohybů

# Odstranění TR pohybů



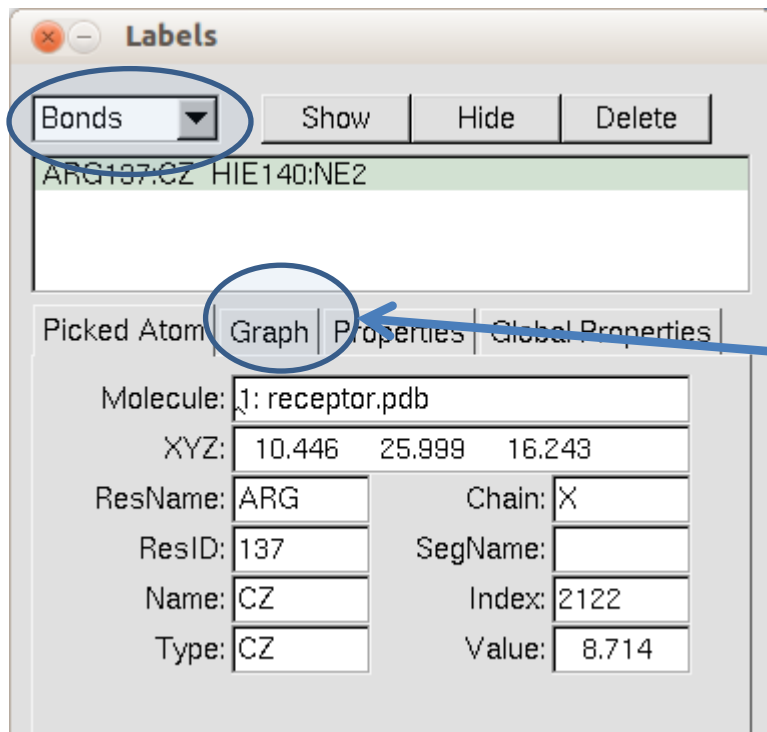
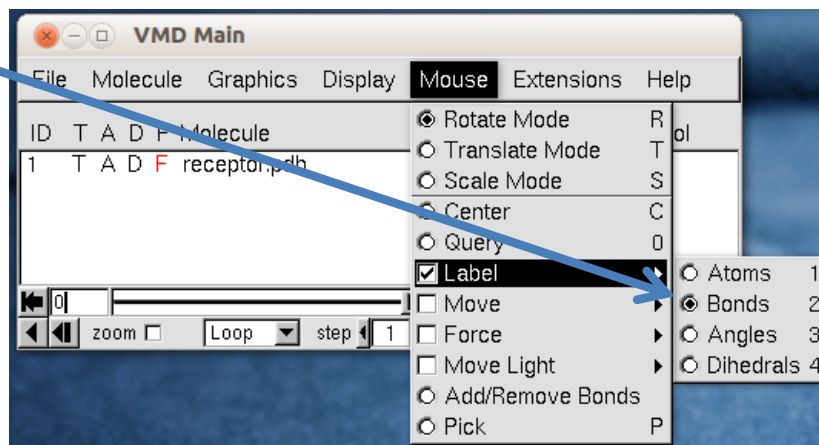
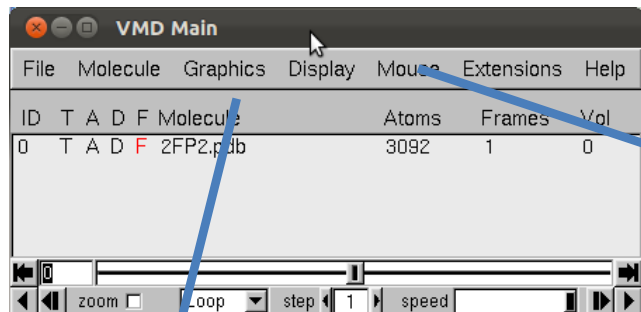
Změnit na „all“ (všechny atomy), nebo na část molekuly, kterou u které chceme provést superimpozici

Odstraní translačně-rotační pohyb zvolených atomů



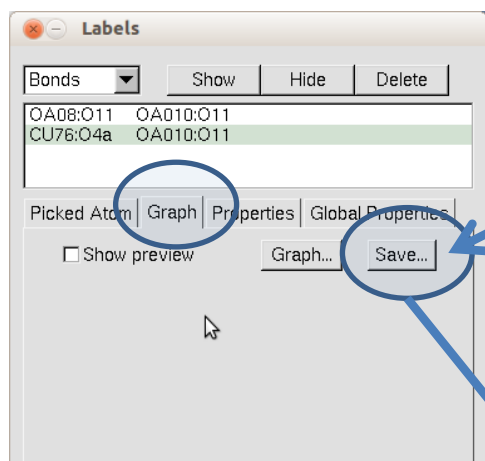
Při vyhodnocování průběhu **trajektorií** je vhodné odstranit **translačně-rotací (TR) pohyb** celé soustavy. Usnadní se tak vizuální analýza pohybů.

# 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

