

C7790

Počítačová chemie a molekulové modelování I

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

5. 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>

Stavba modelu

Program Avogadro

Spuštění programu Avogadro

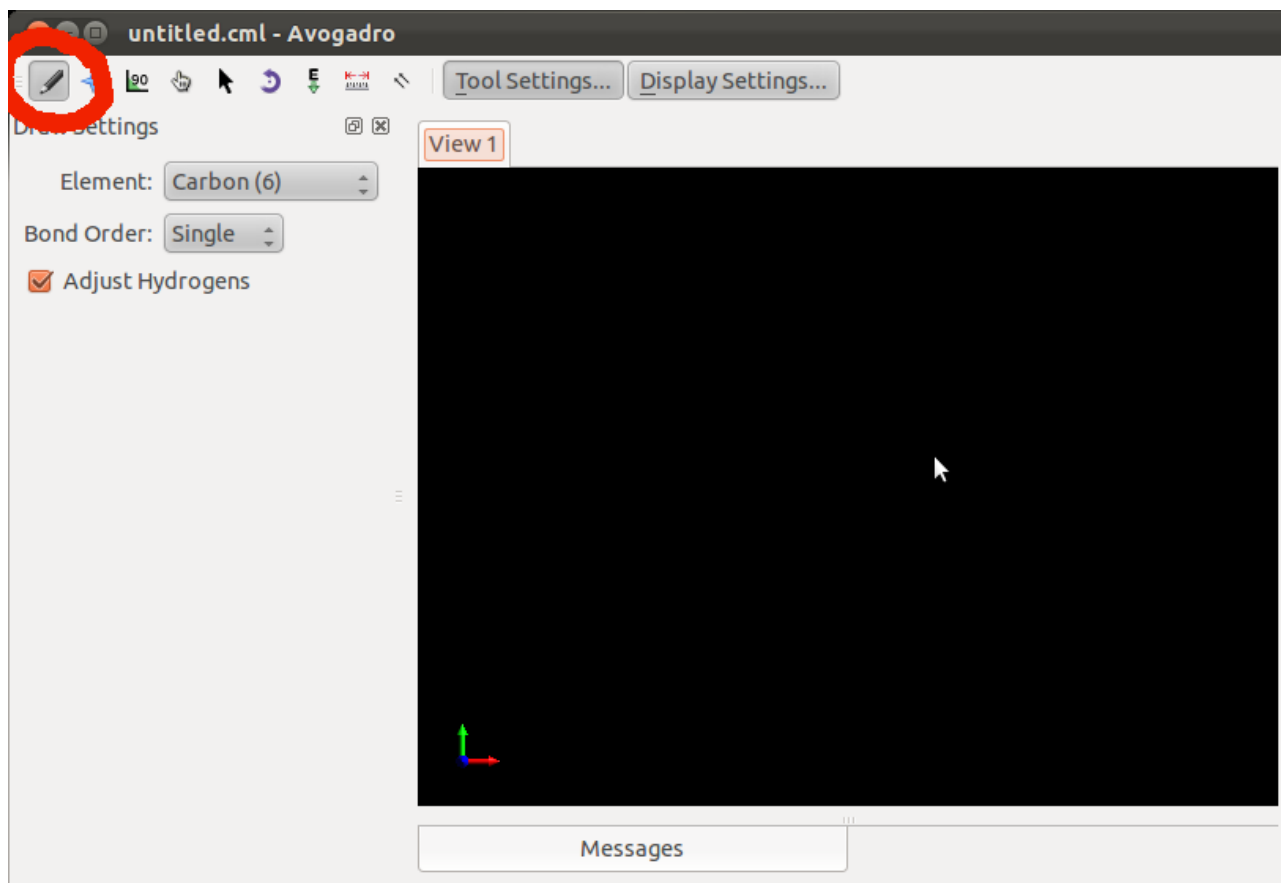


Spuštění terminálu

```
$ avogadro
```

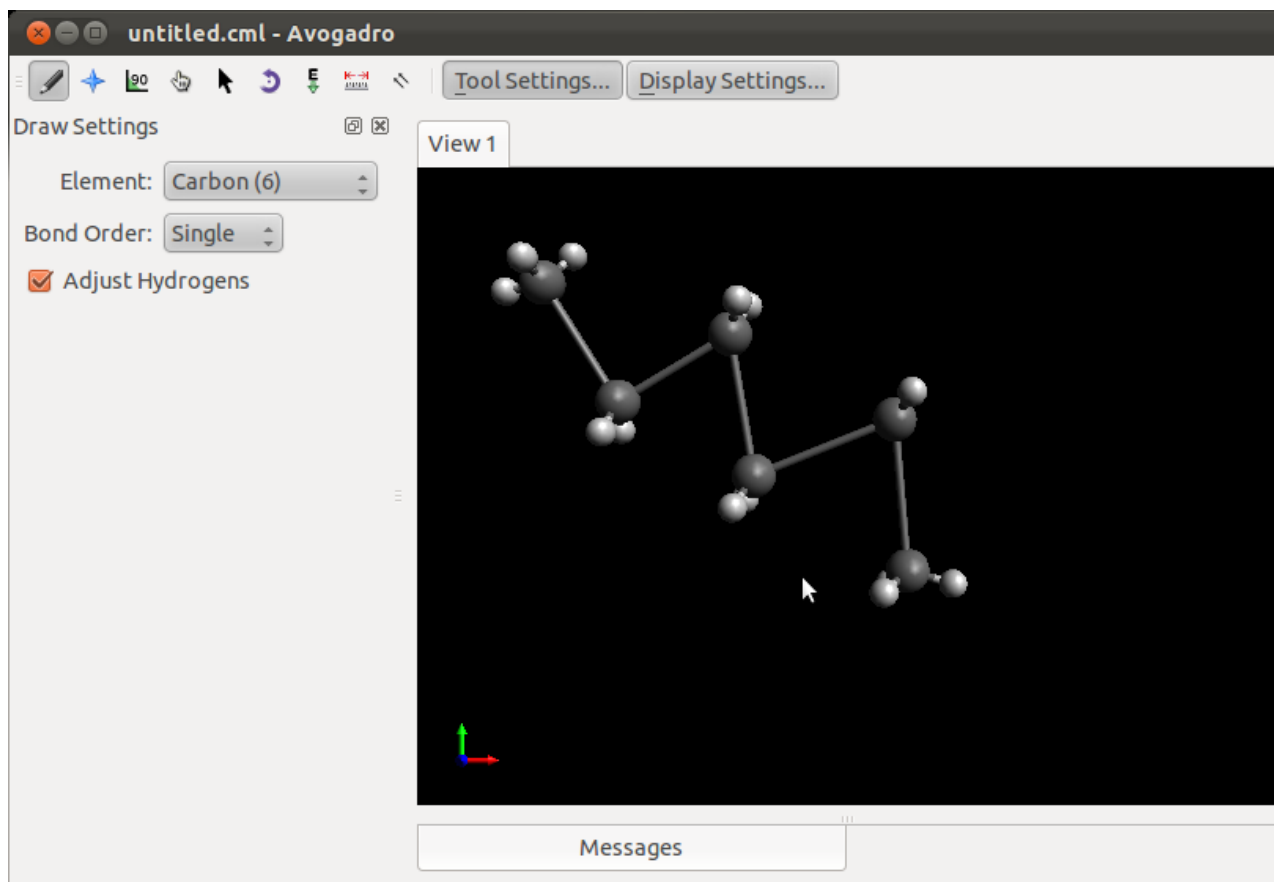
Stavba modelu

Ke stavbě 3D modelu reaktantu a produktu 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).



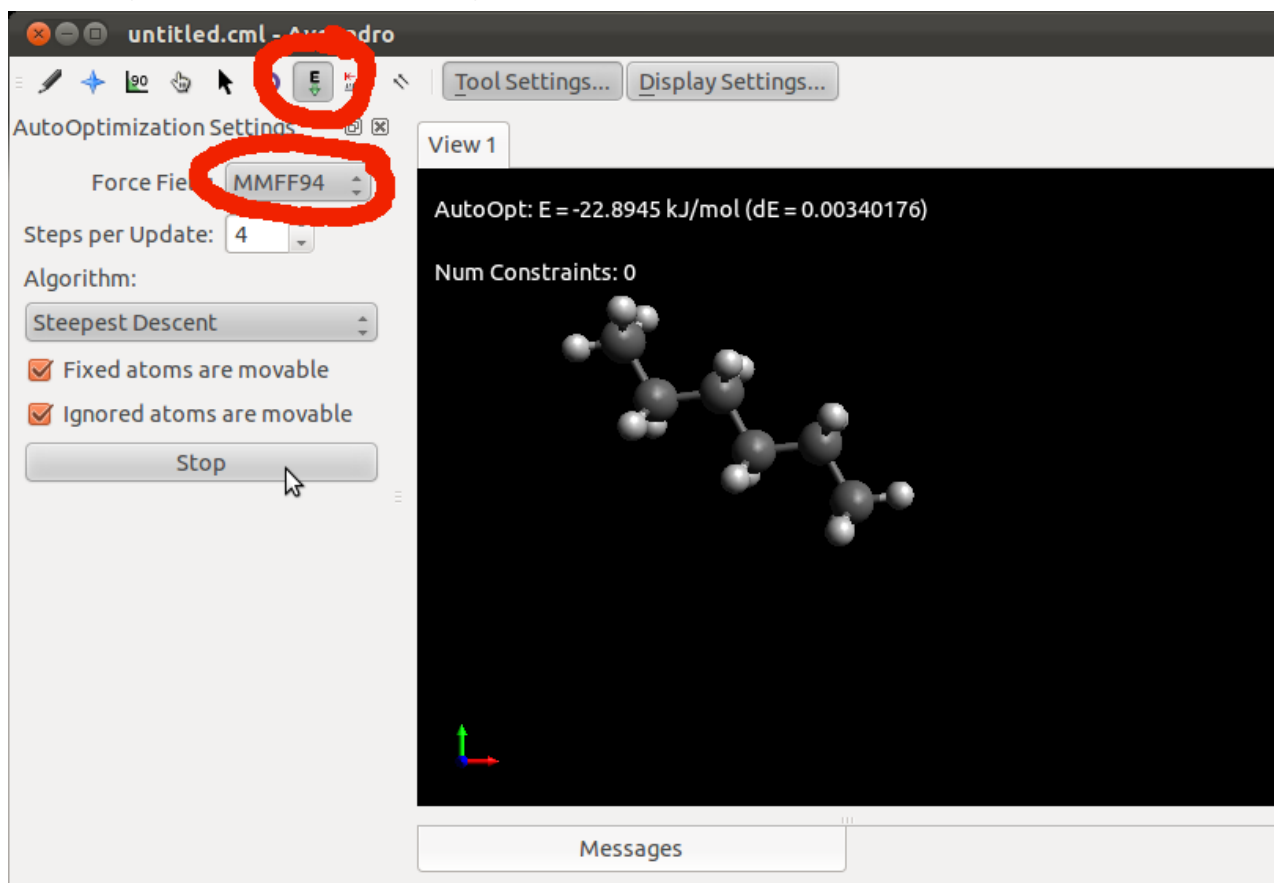
Draft modelu

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



Optimalizace modelu

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.



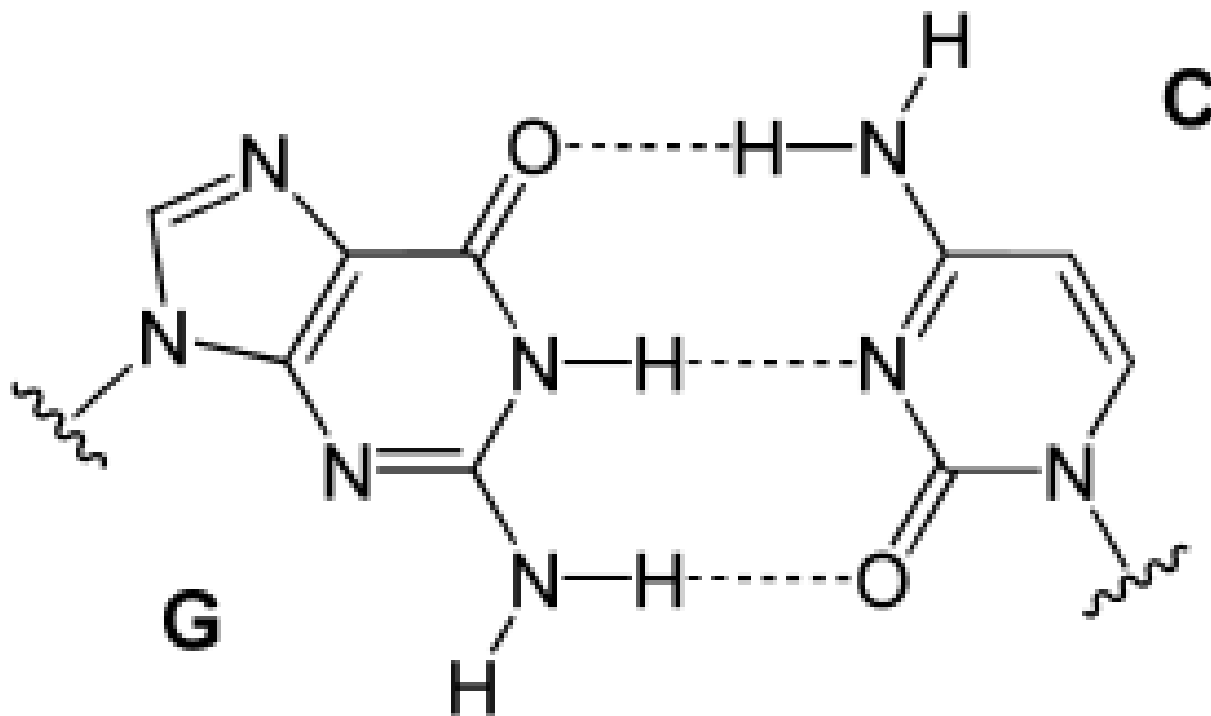
Úkol 0

1. Postupně vytvořte modely následujících molekul:

- metan
- ethan, ethen, ethyn
- benzen
- adamantan
- kyselina benzoová
- trinitrotoluen
- kyselina salicylová

Úkol I

1. V programu Avogadro vytvořte model komplementárního párování bází G (guanin) a C (cytosin), podle níže uvedeného schématu. K saturaci volných valencí použijte atom vodíku. K optimalizaci geometrie použijte silové pole MMFF94.

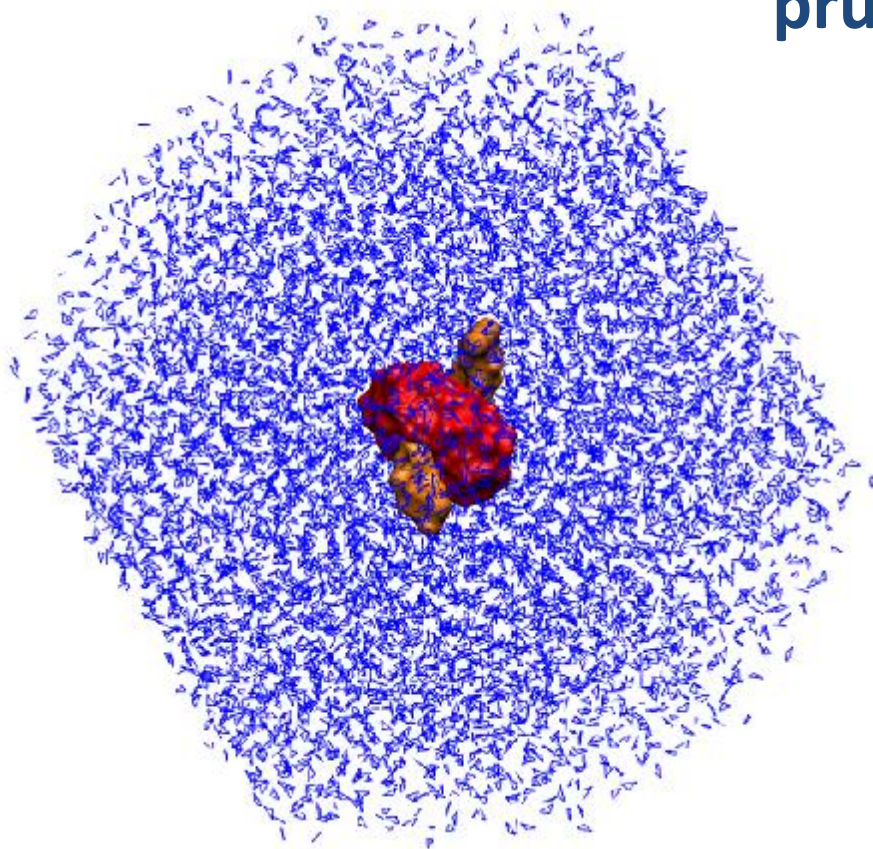


https://en.wikipedia.org/wiki/Base_pair

Vizualizace molekulárně dynamických simulací

Program VMD

průběh molekulárně dynamické
simulace molekulárního
přepínače



Zobrazení simulace



Spuštění terminálu

```
$ ~kulhanek/start-vmd-3
```

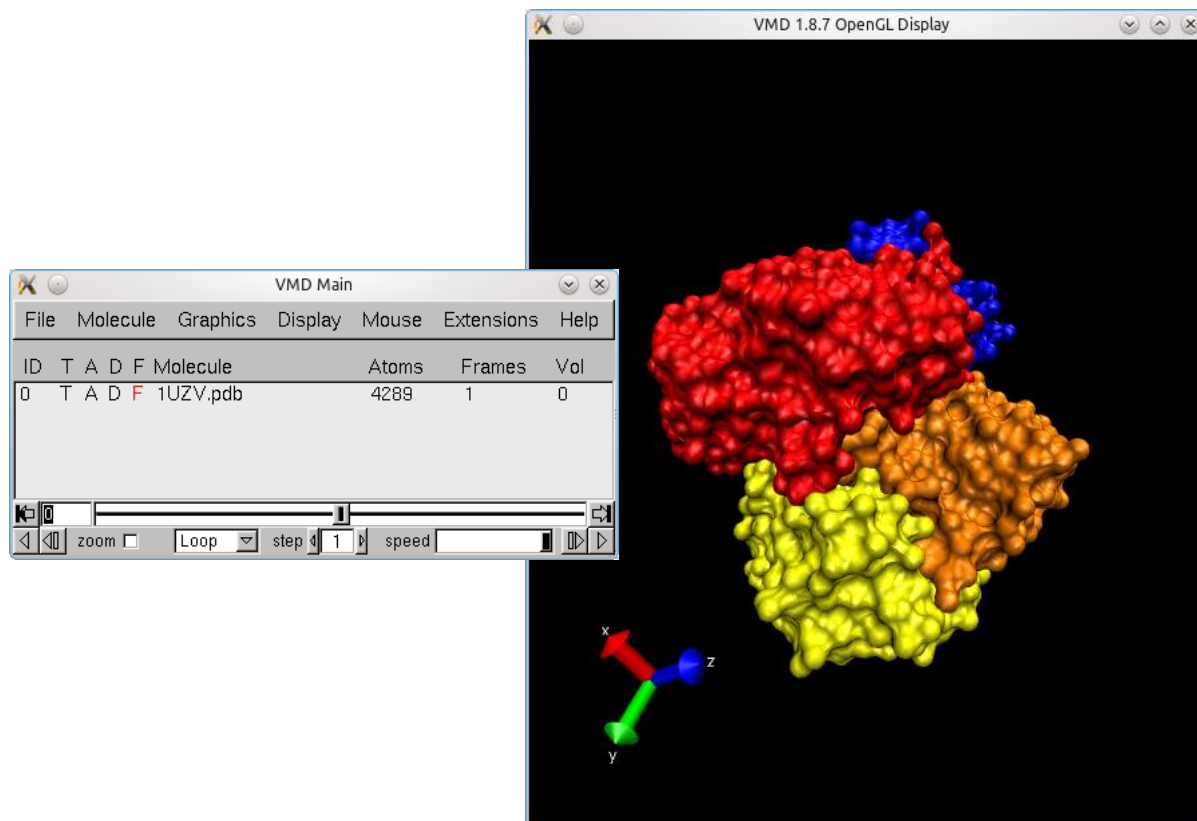
Program VMD

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

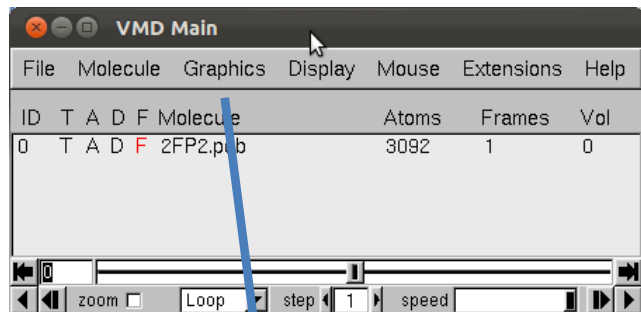
Program slouží k vizualizaci (bio)molekul a k analýze výsledků molekulárně dynamických simulací. Program je volně dostupný (vyžaduje registraci) a je dostupný i pro operační systém MS Windows.

Spuštění programu:

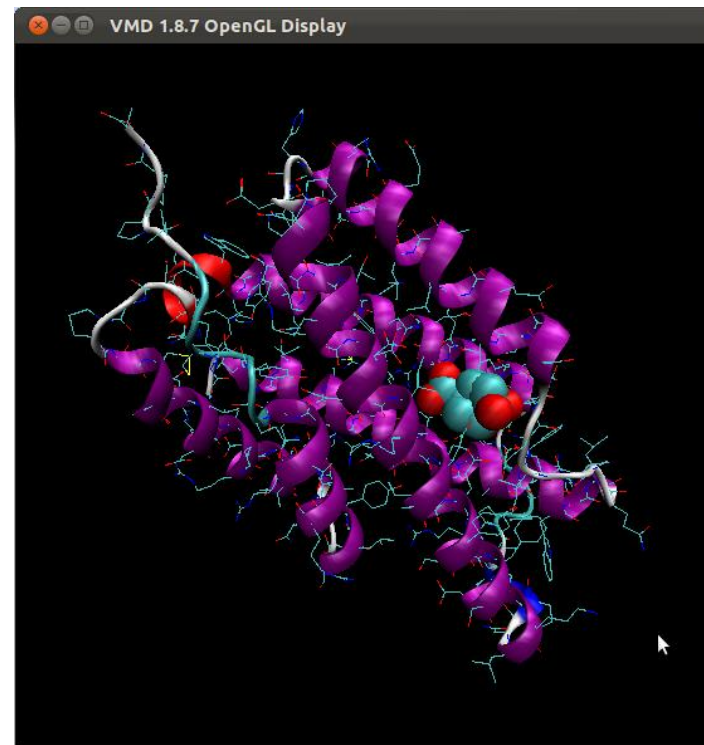
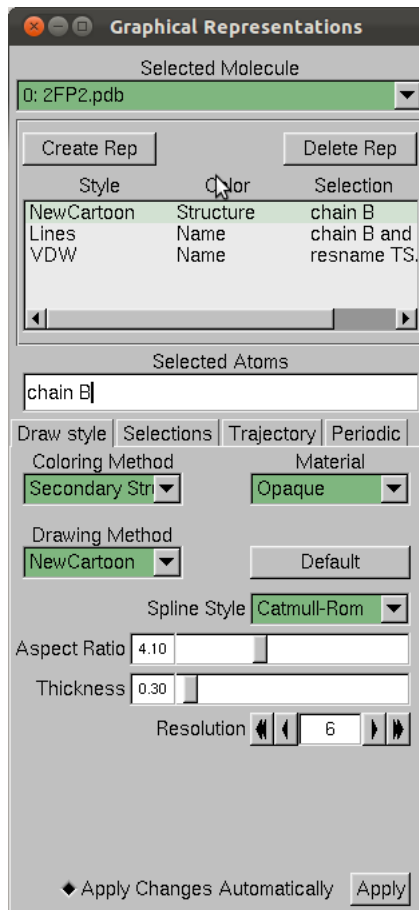
```
$ module add vmd  
$ vmd
```



VMD



Representation

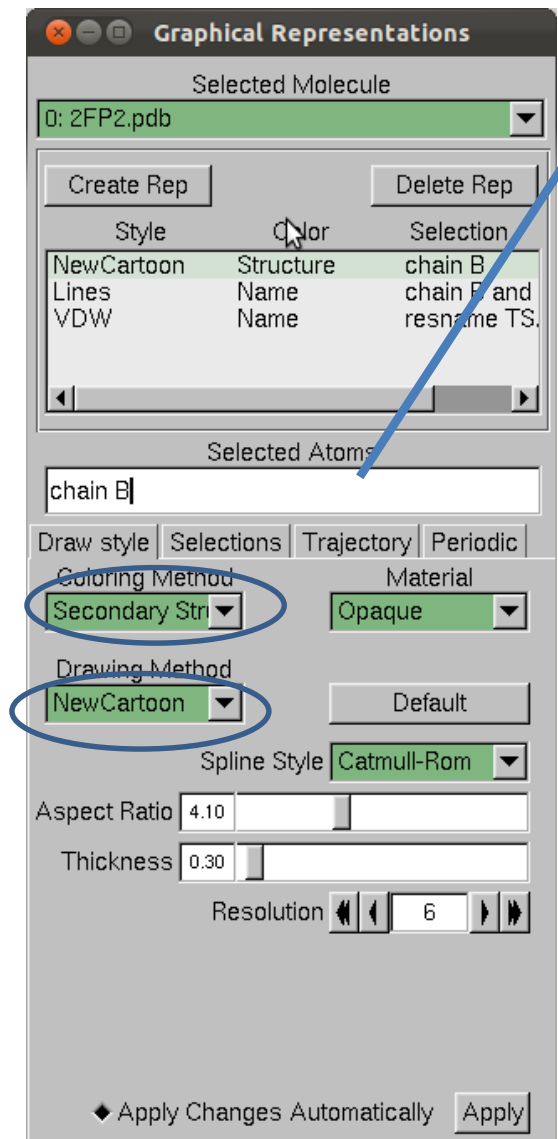


VMD

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

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

Program VMD – změna modelů



Selekcce (volba, maska) části molekuly:

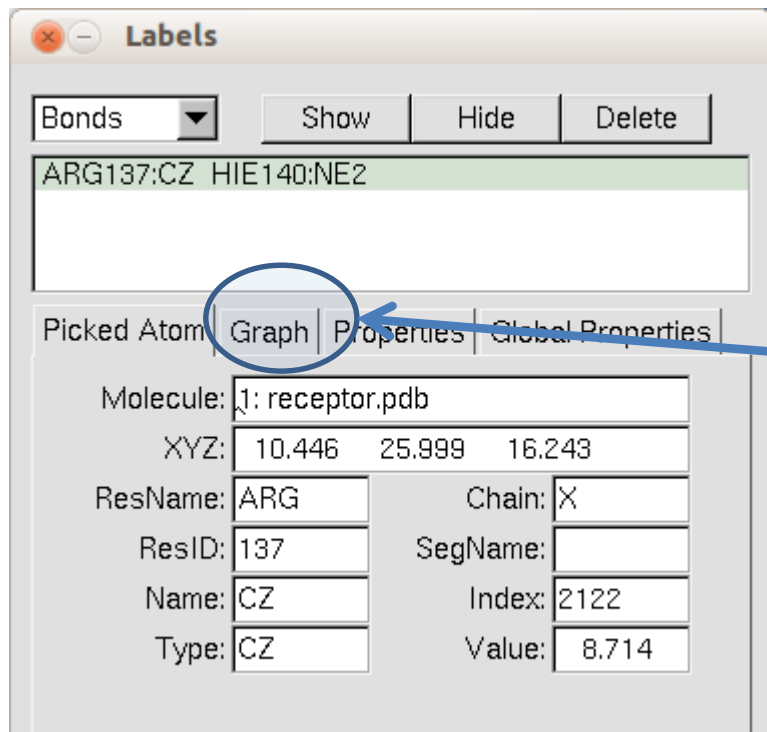
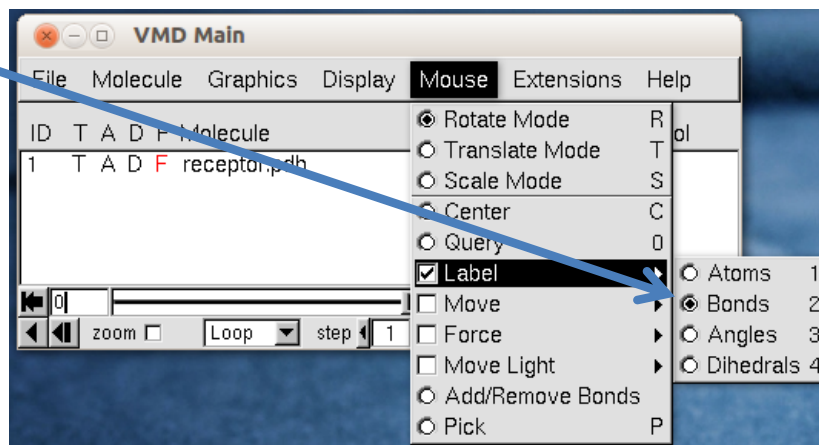
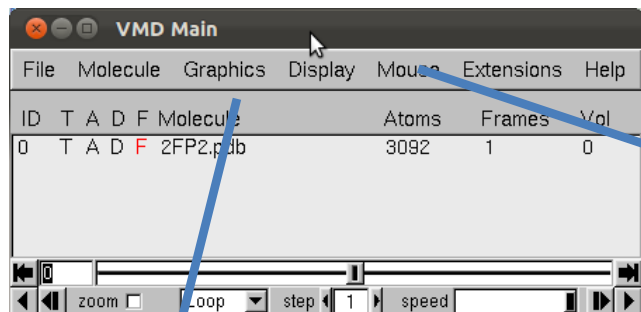
- water – zvolí všechny molekuly vody
- resname X – zvolí residuum s názvem X
- resid X – zvolí residuum s číslem X
- not hydrogen – nezobrazuj atomy vodíků

Příklady:

- resid 1 to 7
- resid 8 9 10

residuum může být aminokyselina, ligand, či část ligandu

Program VMD – měření



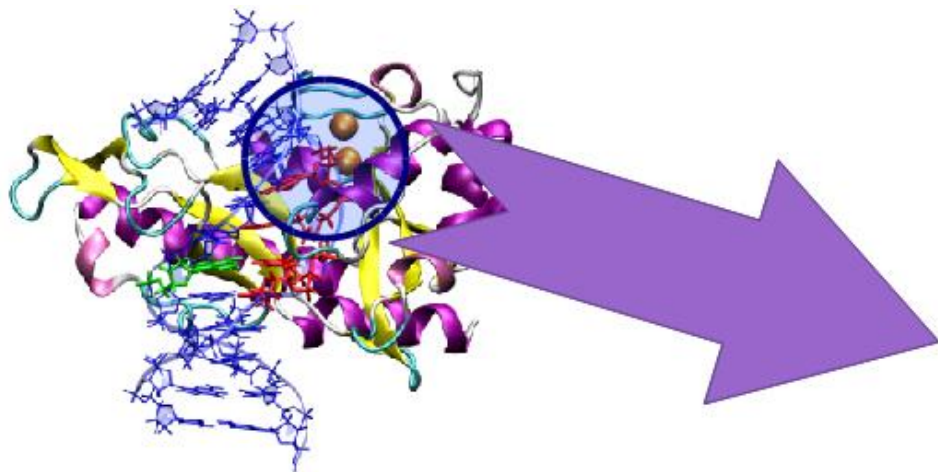
pokud máme načtenou trajektorii, zobrazí časový průběh měřené vzdálenosti

Úkoly

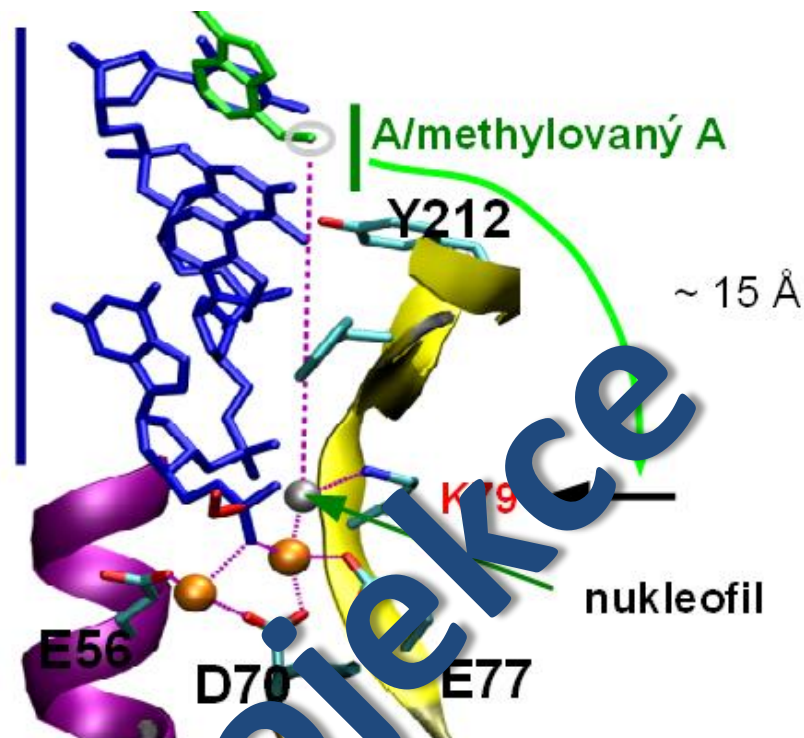
- Kolik atomů obsahuje model?
- O jaký cucurbit[n]uril se jedná?
- Co se děje s molekulami vody na rozhraní simulačního boxu?
- Jaké funkční skupiny obsahuje osička?
- Jaký je celkový náboj osičky?

Simulace enzymatické reakce

Endonukleáza MutH



Je součástí opravných mechanismů poškozené DNA v bakteriích.

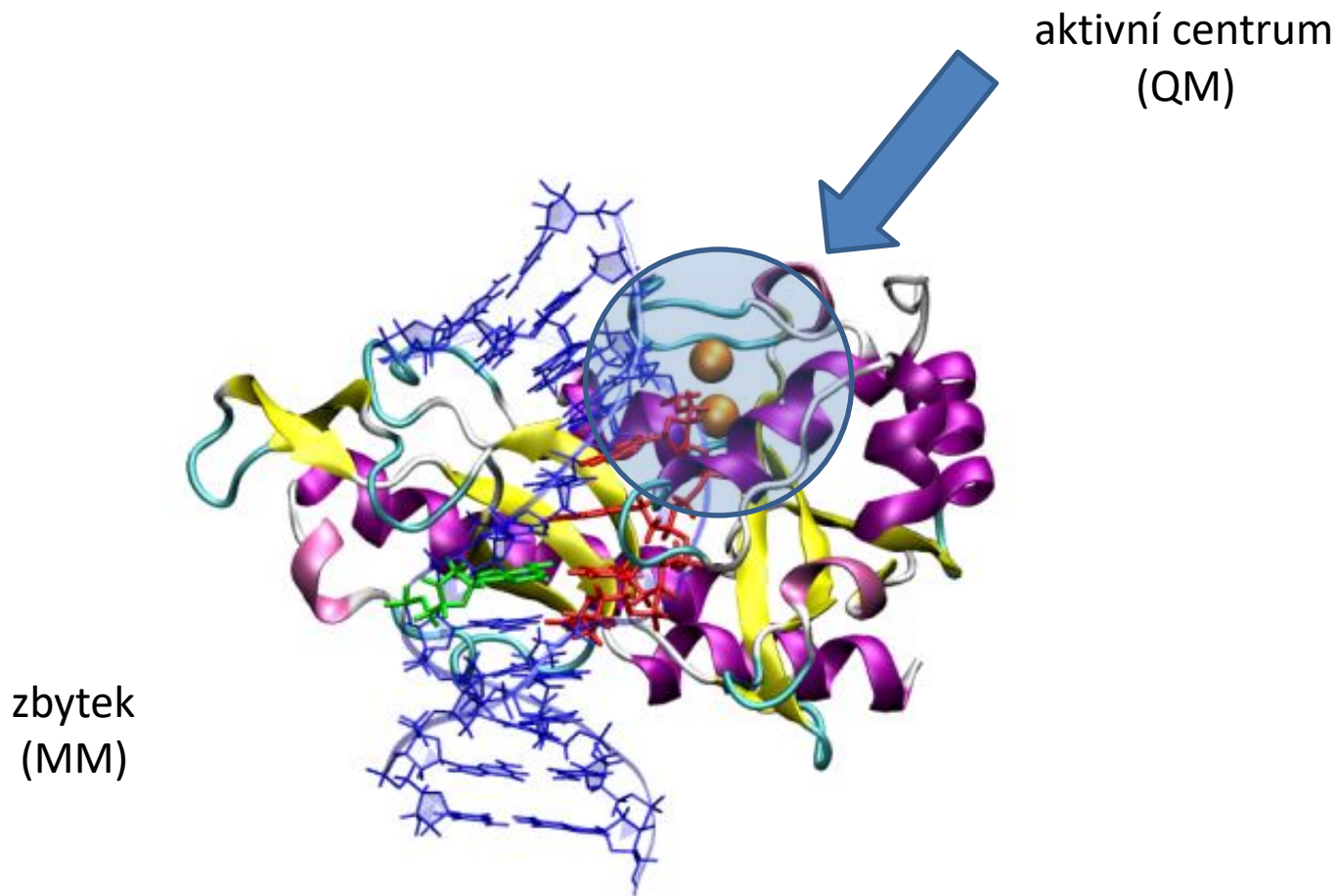


Katalyzovaná reakce - hydrolýza fosfodiesterové vazby



Endonukleáza MutH

Hybridní QM/MM přístup



Zobrazení simulace



Spuštění terminálu

```
$ ~kulhanek/start-vmd-2
```

Úkoly

- Lokalizujte aktivní místo enzymu. Jakou roli mají hořčnaté kationty?
- Jakou reakci enzym katalyzuje?
- Lokalizujte štěpenou molekulu DNA.
- Ve struktuře DNA nalezněte GC páry.
- Změřte vzdálenost atakujícího atomu kyslíku k atomu fosforu a zobrazte její časový vývoj.
- Co se stane s odstupující alkoxy skupinou?