

C7790

Počítačová chemie a molekulové modelování I

C7800 Počítačová chemie a molekulové modelování I - cvičení

4. 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=xdmLoBILmq5>

Nemesis

<https://nemesis.ncbr.muni.cz/>

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

Stavba modelu

Program Avogadro

Spuštění programu Avogadro

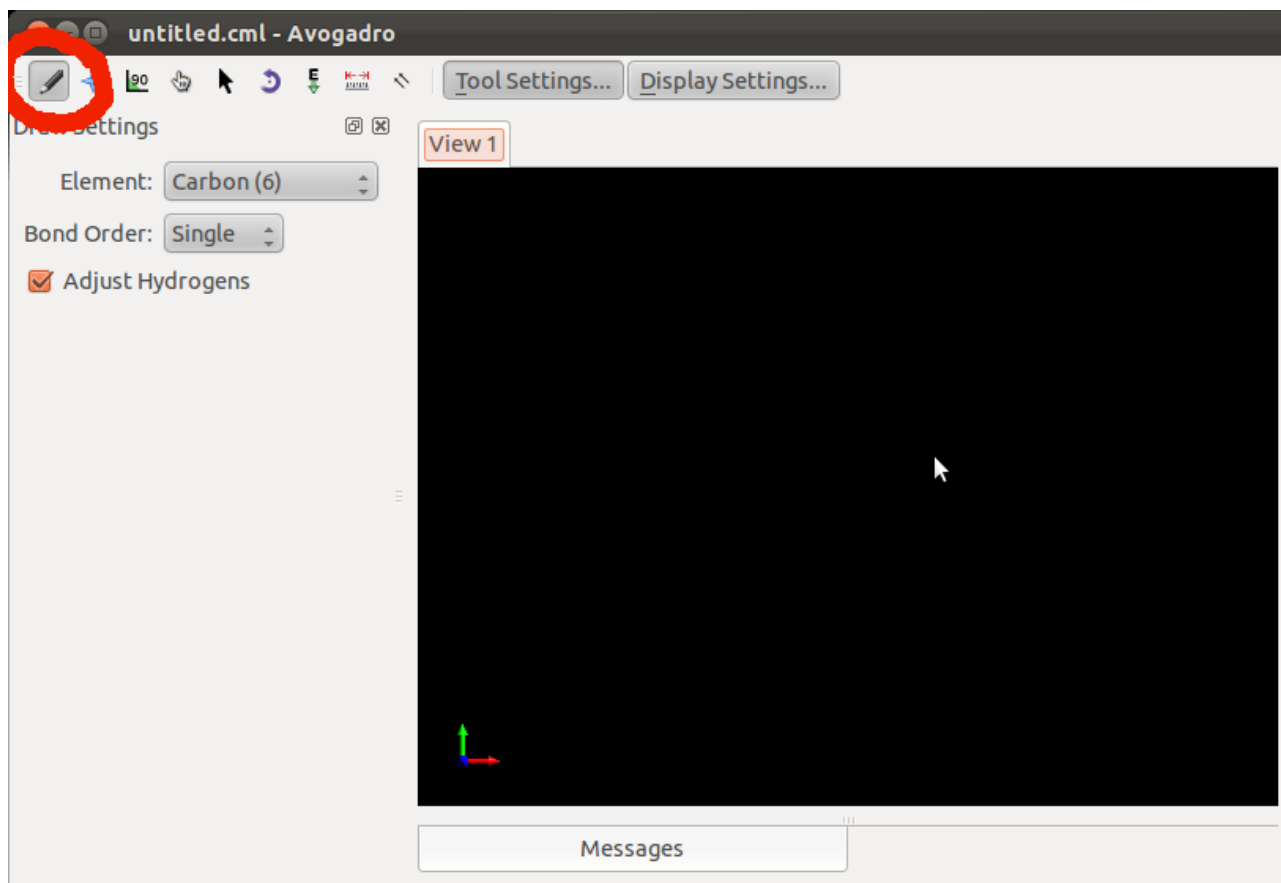


Spuštění terminálu

```
$ avogadro
```

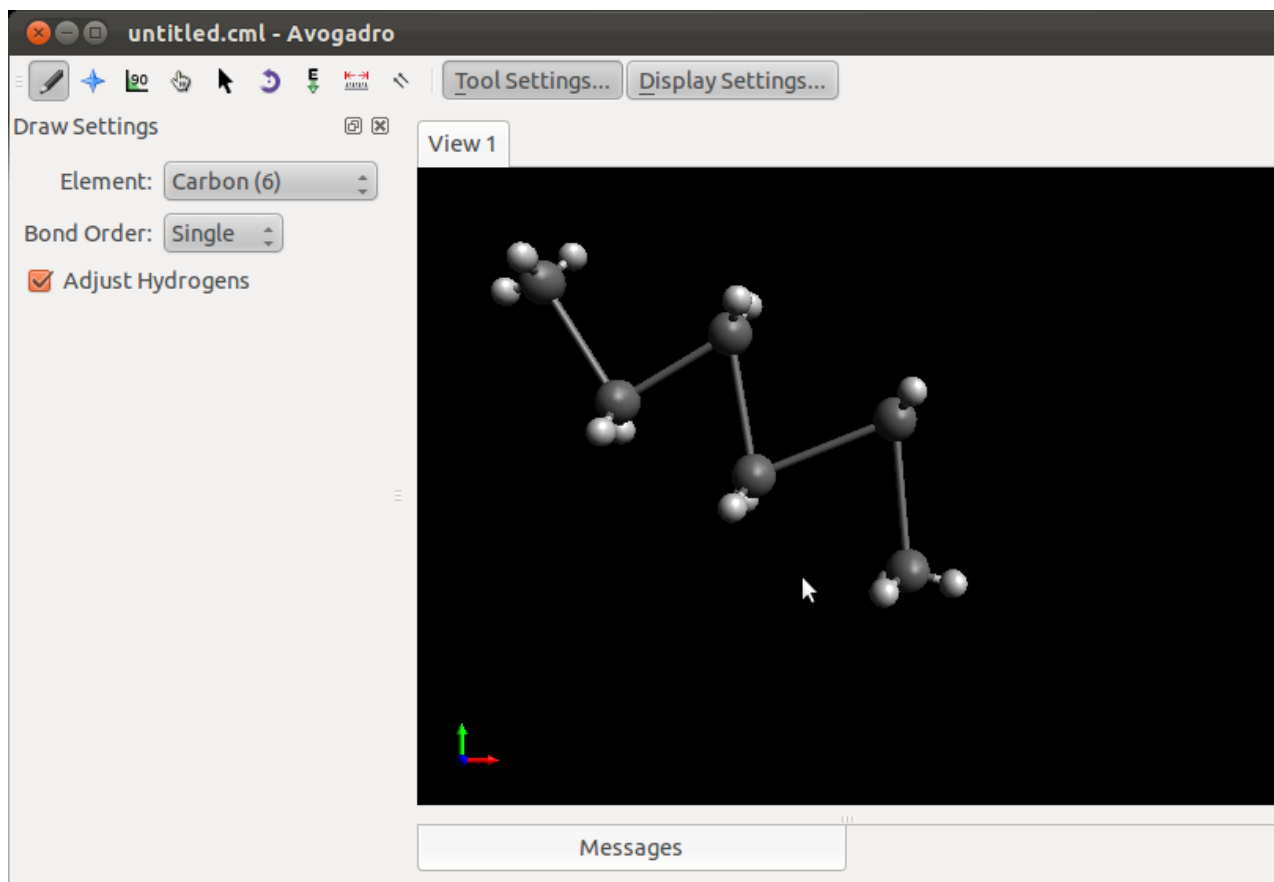
Stavba modelu

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).



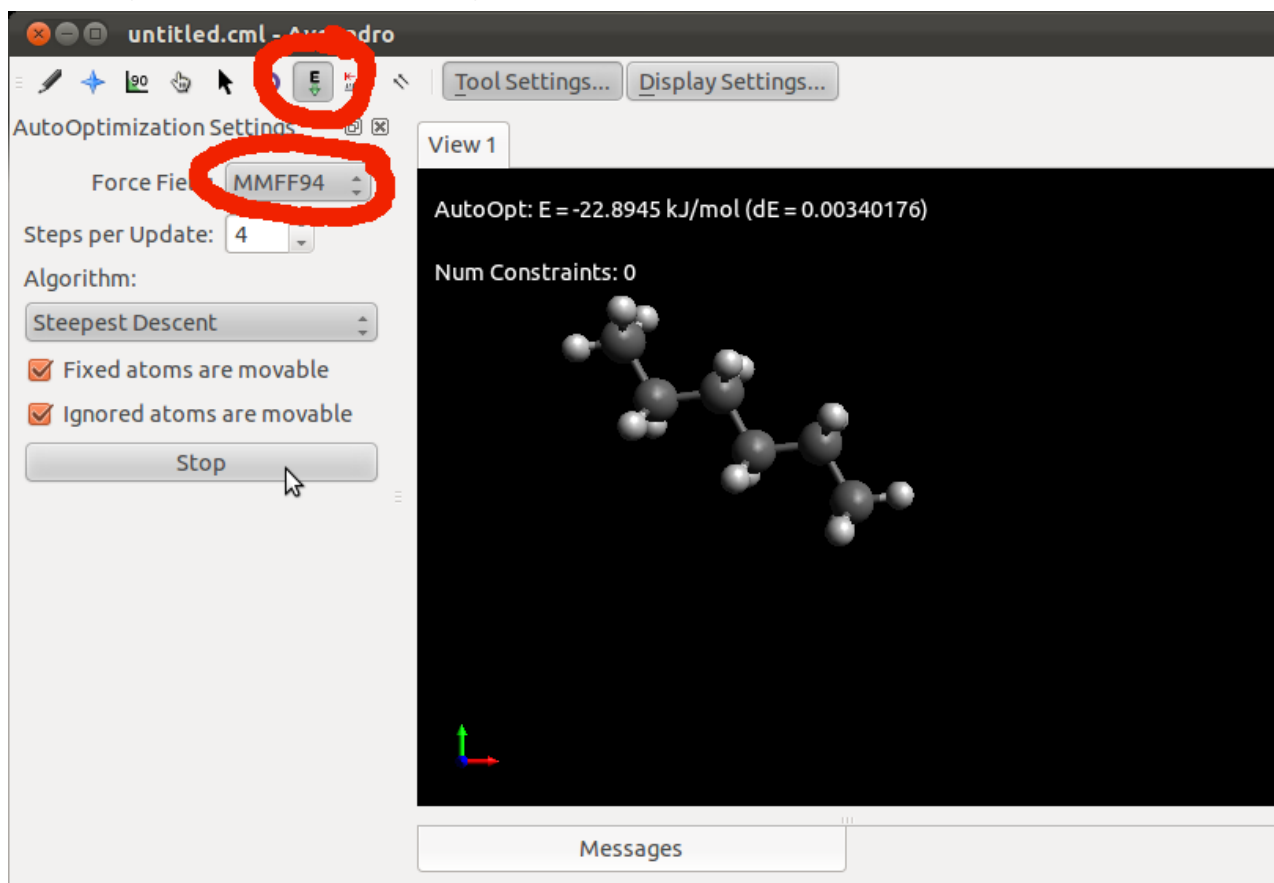
Draft modelu

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.



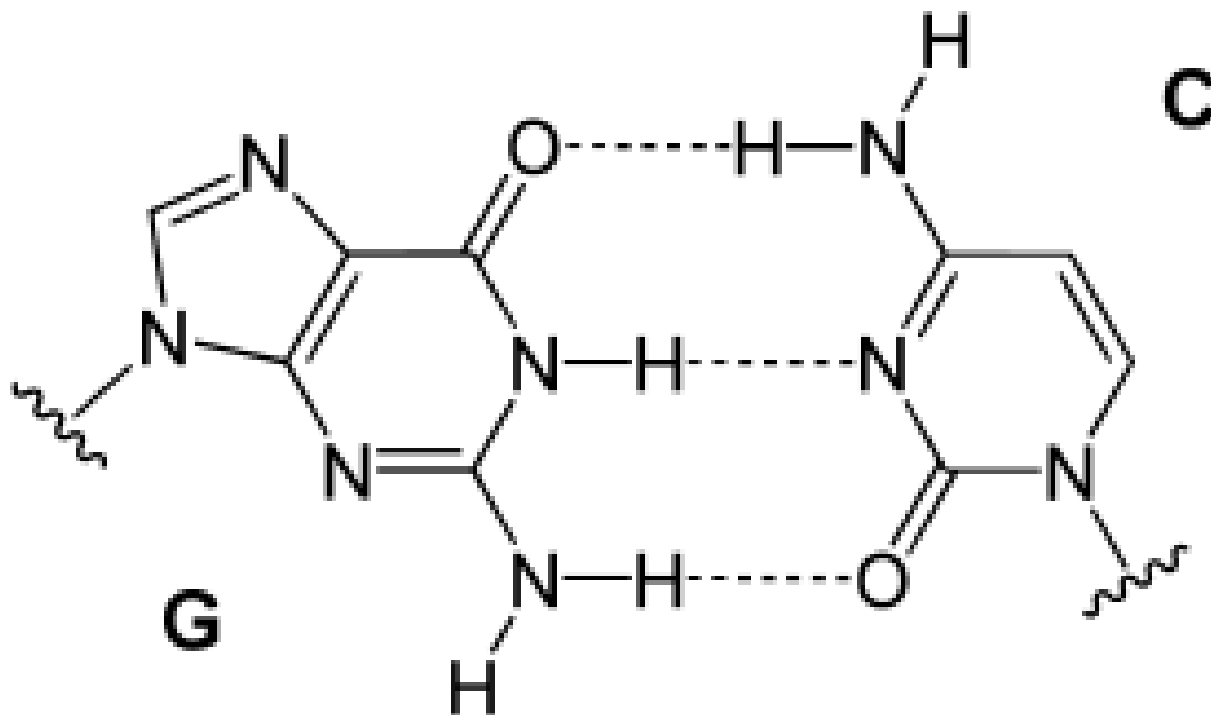
Cvičení 1

1. Postupně vytvořte modely následujících molekul:

- metan
- ethan, ethen, ethyn
- benzen
- adamantan
- kyselina benzoová
- trinitrotoluen
- kyselina salicylová
- volitelně stavba C_{60}

Cvičení 2

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

Stavba modelu

Program Nemesis

Nemesis

Spuštění programu:

\$ module add nemesis

\$ nemesis

Myš:

Levé tlačítko selekce

Prostřední tlačítko rotace

Pravé tlačítko posun

Kolečko zoom

Modifikátory:

Shift XZ -> Y pohyby

Ctrl přepíná mezi sekundárním a primárním manipulátorem

Nemesis – Build Project

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

- Structures panel:** Contains a table with columns "Name", "SID", and "Ato". The first row is "Structure 1" with "SID" 1. A blue arrow points to this row with the label "vrstvy".
- Build panel:** Located on the right, it has tabs for "Basic" and "General". Under "General", there are buttons for building molecules: C=C, C#C, C=C, F-, Cl-, Br-, I-, O=, O-, S=, S-, N=, N-, N-, N-. A blue arrow points to the Cl- button with the label "stavba/editace molekuly". Below these are buttons for "Delete atom", "Make bond", "Break bond", and "Delete bond". The "Optimize" button is circled in red, with a blue arrow pointing to it from the label "optimalizace geometrie pomocí silového pole".
- Geometry panel:** Located below the Build panel, it has tabs for "Position", "Distance", "Angle", and "Torsion". A blue arrow points to this panel with the label "měření geometrie".
- Profile objects panel:** Located at the bottom left, it contains a table with columns "Name" and "Ty". The first row is "Light 1" with "Light" type. Other rows include "Background 1", "Standard Model 1", and "Freezed Atoms 1". A blue arrow points to this panel with the label "grafické modely".

At the bottom of the interface, there is a toolbar with icons for "S", "T", "C", "G", "D", "P", and "S".

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

Cvičení 3

1. Postupně vytvořte modely následujících molekul:

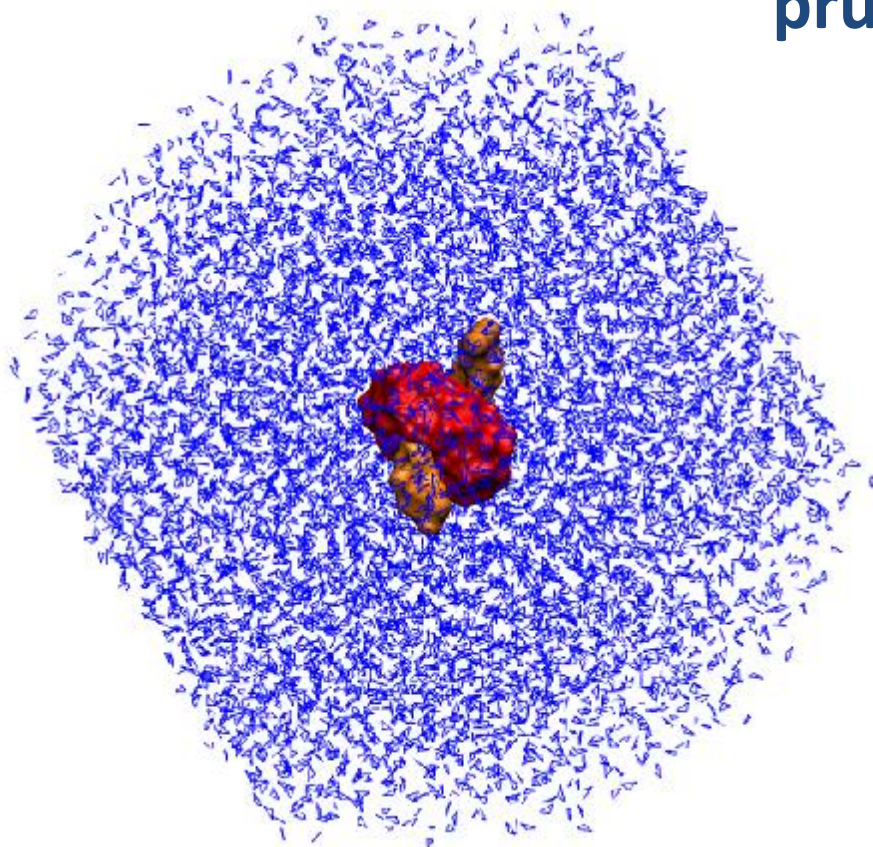
- metan
- ethan, ethen, ethyn
- benzen
- adamantan
- kyselina benzoová
- trinitrotoluen
- kyselina salicylová

Vizualizace molekulárně dynamických simulací

Program VMD

Cvičení 4

průběh molekulárně dynamické
simulace molekulárního
přepínače



Zobrazení simulace



Spuštění terminálu

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

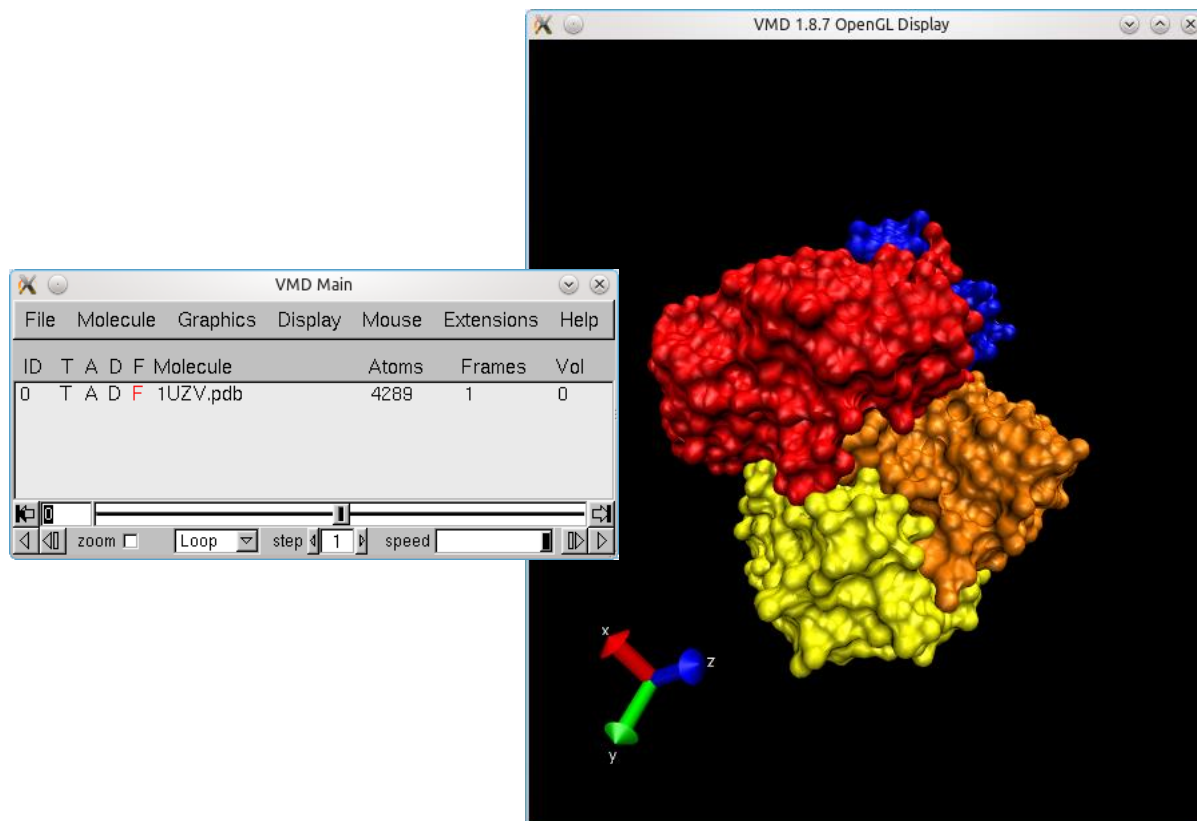

Program VMD

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

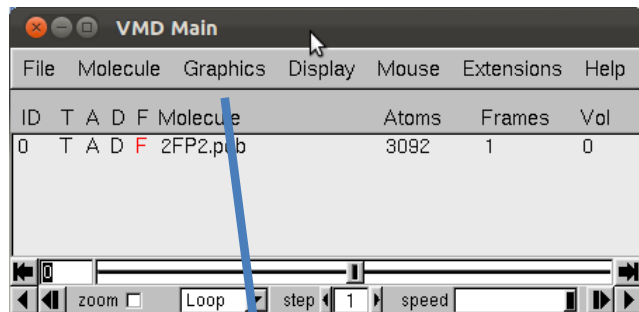
Program slouží k vizualizaci (bio)molekul a k analýze výsledků molekulárně dynamických simulací. Program je volně dostupný (vyžaduje registraci) a je dostupný i pro operační systém MS Windows.

Spuštění programu:

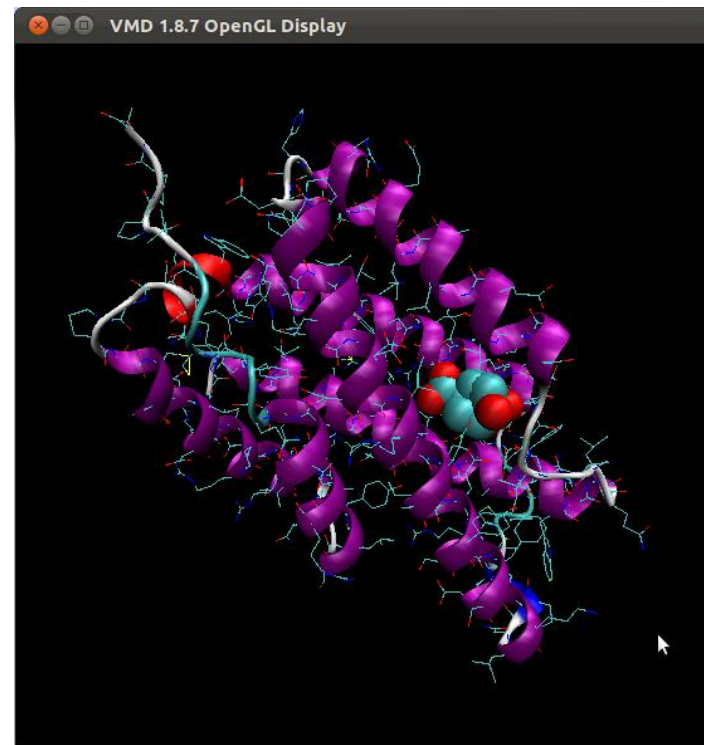
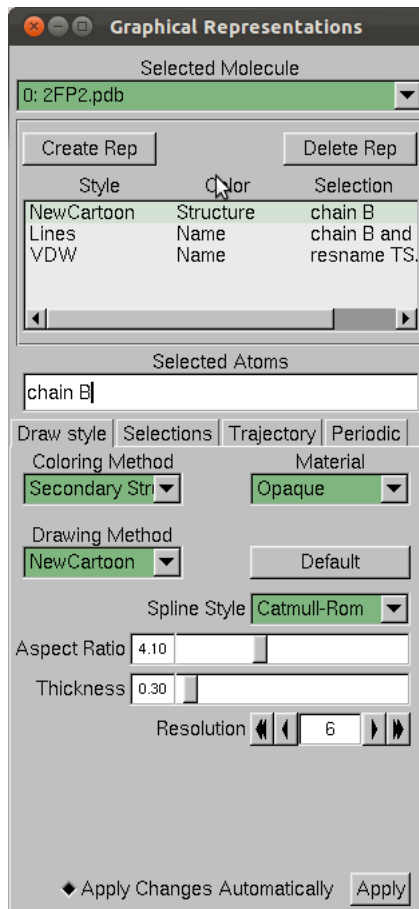
```
$ module add vmd  
$ vmd
```



VMD



Representation

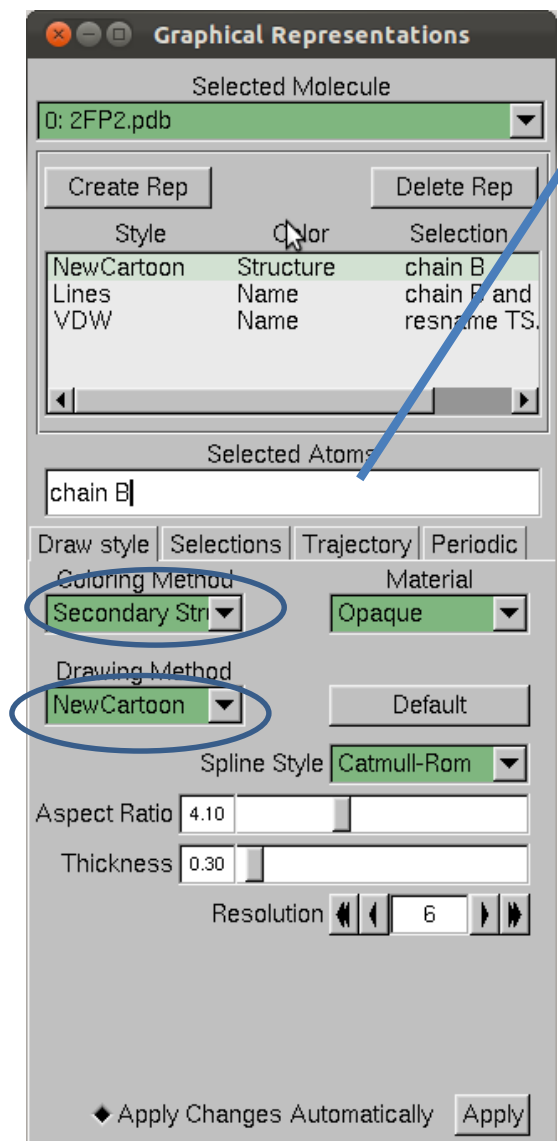


VMD

<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:

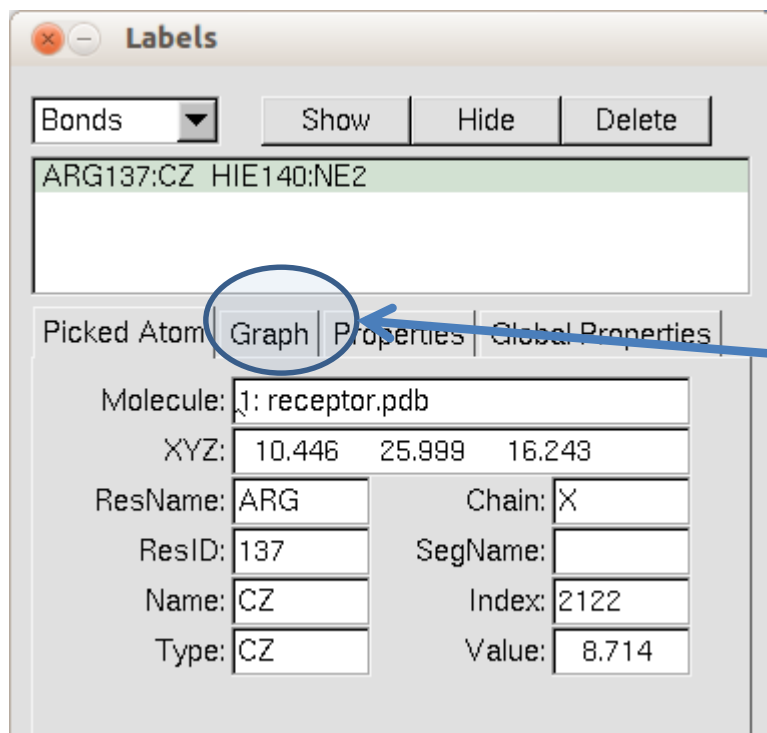
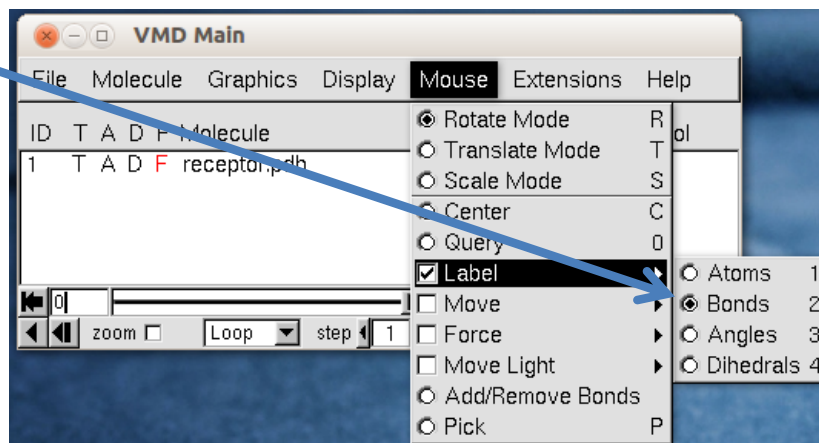
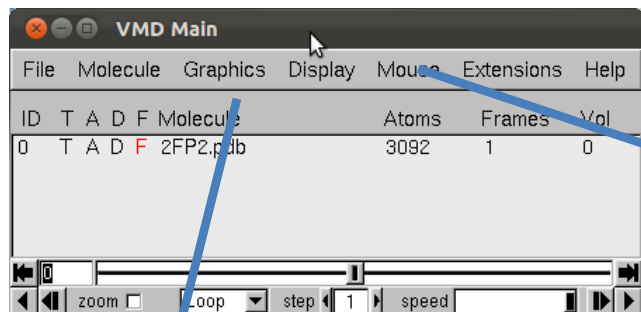
- water – zvolí všechny molekuly vody
- resname X – zvolí residuum s názvem X
- resid X – zvolí residuum s číslem X
- not hydrogen – nezobrazuj atomy vodíků

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?