

## C2 – Struktura nukleových kyselin – studijní materiál VMD

V tomto studijním materiálu se budeme zabývat instalací a použitím grafického programu VMD. Ten je primárně určen k prohlížení velkých biomolekul a simulací jejich dynamiky. Stejně tak dobře nám však poslouží k prohlížení menších molekul, kterými se zabýváme. Pokud již máte na svém počítači tento program nainstalován a ovládáte jej, můžete s klidným svědomím přeskočit na poslední stranu.

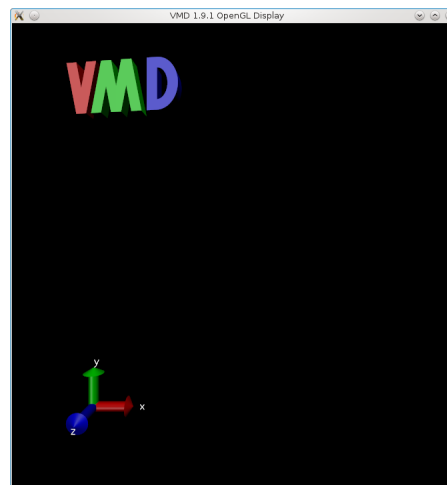
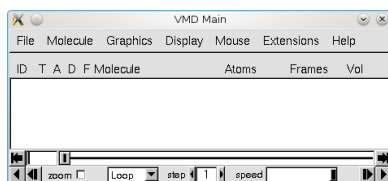
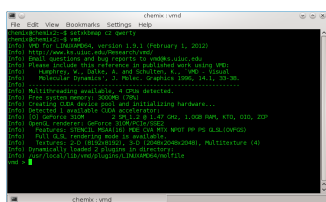
Nejprve je nutné VMD stáhnout. Vybral jsem pro to domovskou stránku tohoto projektu <http://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=VMD>. V nabídce vidíme instalace pro různé operační systémy:

### Version 1.9.1 (2012-02-04) Platforms:

We recommend that all users upgrade to VMD 1.9.1

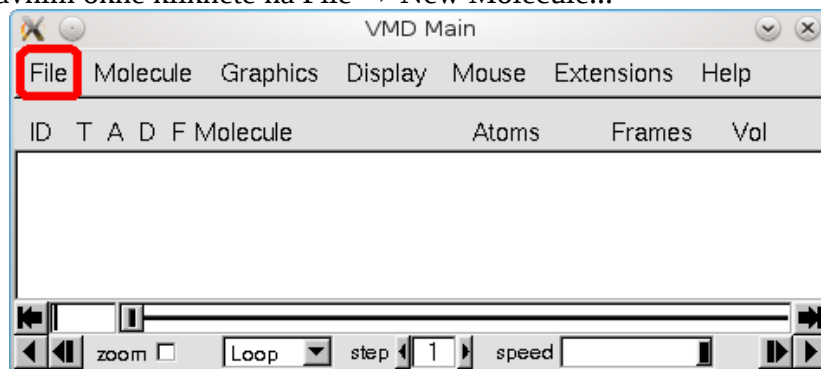
- **Source Code**
- **LINUX OpenGL, CUDA** (Linux (32-bit, RHEL4 or later) with CUDA)
- **LINUX\_64 OpenGL, CUDA** (Linux (64-bit Intel/AMD x86) with CUDA)
- **LINUX PPC64 Text-mode** (Linux PowerPC (64-bit) Text-mode)
- **MacOS X OpenGL, CUDA (32-bit Intel x86)** (Apple MacOS-X 10.5.x or later with CUDA)
- **MacOS X OpenGL (32-bit Intel x86)** (Apple MacOS-X 10.5.x or later)
- **MacOS X OpenGL (PowerPC)** (Apple MacOS-X 10.4.7 or later)
- **SOLARISX86\_64 OpenGL** (Sun Solaris 10 (64-bit x86) with OpenGL)
- **Windows OpenGL, CUDA** (Windows XP/Vista/7 (32-bit) with OpenGL and CUDA)
- **Windows OpenGL** (Microsoft Windows XP/Vista/7 (32-bit) using OpenGL)
- **Unofficial (unsupported) VMD builds** (Experimental builds for MacOS X)

Vyberte tedy ten váš. Většinou z vás bude vyhovovat možnost pro Windows. U ní vidíme též možnost CUDA, toto bych doporučil těm, kdo mají „novější“ grafickou kartu nVidia (ti si mohou stáhnout instalační soubor na adrese <http://dl.dropbox.com/u/99170296/vmd191win32cuda.msi>, který zde bude jen do konce třetí série). Pokud by vám program nefungoval po instalaci, pravděpodobně bude problém ve vašem výběru, proto neváhejte vyzkoušet různé možnosti (v rámci vašeho operačního systému), včetně starších verzí 1.9.0 nebo 1.8.7. Poté, co kliknete na váš výběr, objeví se dialogové okno pro registraci. Nebojte se, všechno je zadarmo. Vymyslete si nějaké uživatelské jméno a heslo a klikněte na pokračovat („Continue with registration or download“). Na stránce, která se vám objeví, vyplňte jméno (klidně falešné ☺), emailovou adresu a dále zaškrtněte následující: Academic, 1, Research, No; na závěr zopakujte heslo, které jste zadali na začátku, a zaregistrujte se. Na následující stránce budete souhlasit s licenčními podmínkami a tím se vám začne stahovat instalační soubor. Stažený instalační soubor spusťte, všude klikejte na Next a se vším souhlaste. Pokud jste program nainstalovali správně, při jeho spuštění se objeví tři okna: příkazová řádka s informacemi o běhu programu, hlavní okno s menu a grafický výstup, kde se bude točit nápis VMD (viz obr. 1). Ani jedno z nich nezavírejte! Pokud byste měli problémy s kteroukoli fází postupu, neváhejte mě kontaktovat nebo napište do diskuze.

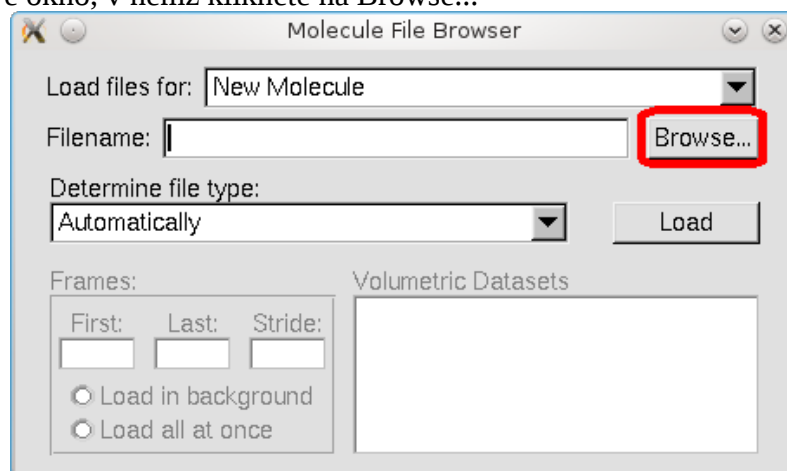


Obrázek 1 Přibližně takto mají vypadat tři okna po spuštění VMD

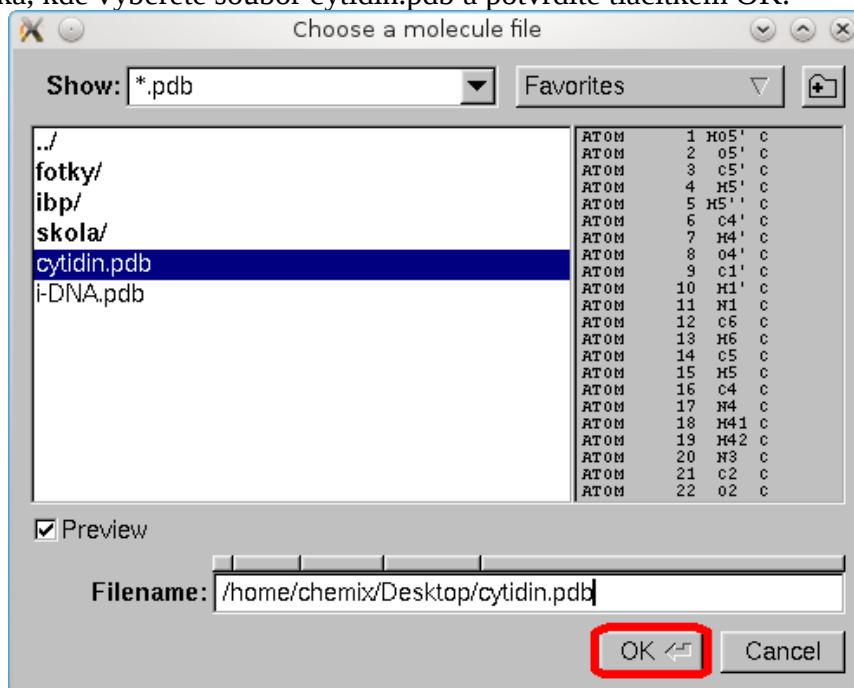
Nyní přišel čas na nahrání první molekuly. Stáhněte si ze studijních materiálů soubor cytidin.pdb. V hlavním okně klikněte na File → New Molecule...



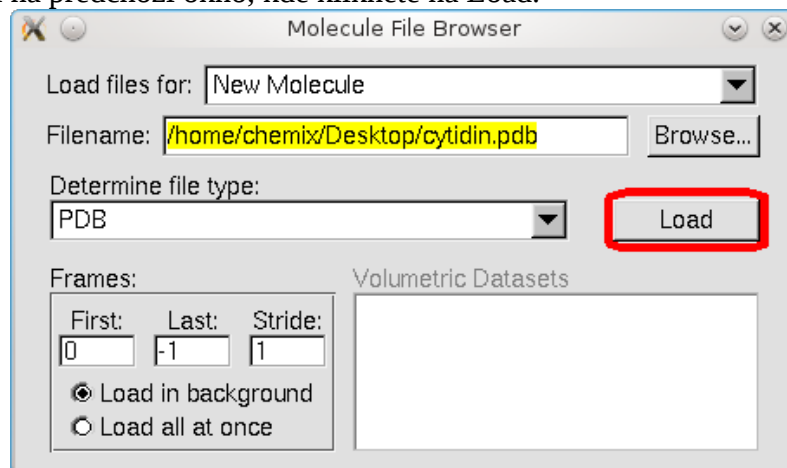
Objeví se dialogové okno, v němž klikněte na Browse...



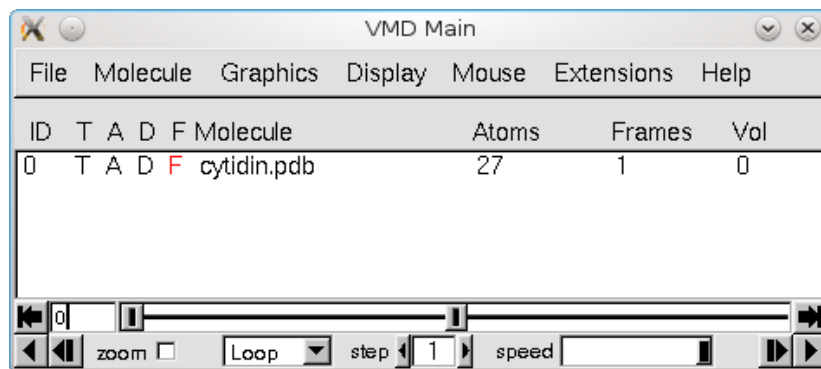
Objeví se nabídka, kde vyberete soubor cytidin.pdb a potvrdíte tlačítkem OK.



Tato akce vás vrátí na předchozí okno, kde klikněte na Load.



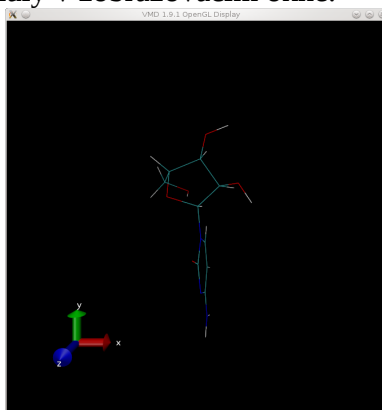
Pokud jste vše udělali správně a nikde není technický problém, objeví se načtená molekula v hlavním okně,



v textové příkazové řádce se objeví info,

```
Info) Using plugin pdb for structure file /home/chemix/Desktop/cytidin.pdb
Info) Using plugin pdb for coordinates from file /home/chemix/Desktop/cytidin.pdb
Info) Determining bond structure from distance search ...
Info) Analyzing structure ...
Info)   Atoms: 30
Info)   Bonds: 31
Info)   Angles: 0 Dihedrals: 0 Impropers: 0 Cross-terms: 0
Info)   Bondtypes: 0 Angletypes: 0 Dihedraltypes: 0 Improper types: 0
Info)   Residues: 1
Info)   Waters: 0
Info)   Segments: 1
Info)   Fragments: 1   Protein: 0   Nucleic: 0
Info) Finished with coordinate file /home/chemix/Desktop/cytidin.pdb.
```

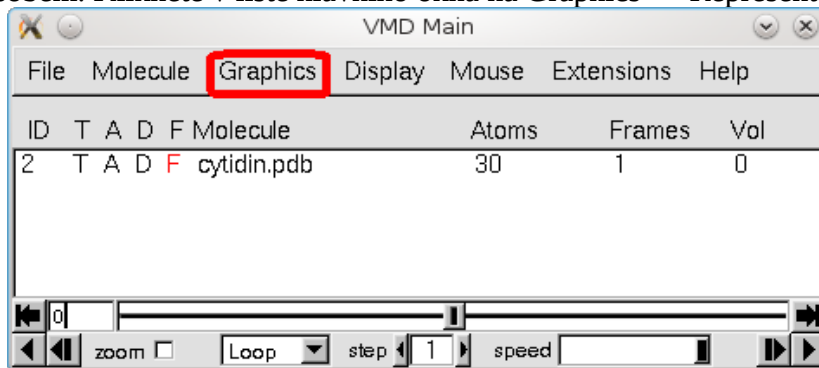
ale hlavně se objeví obrázek molekuly v zobrazovacím okně.



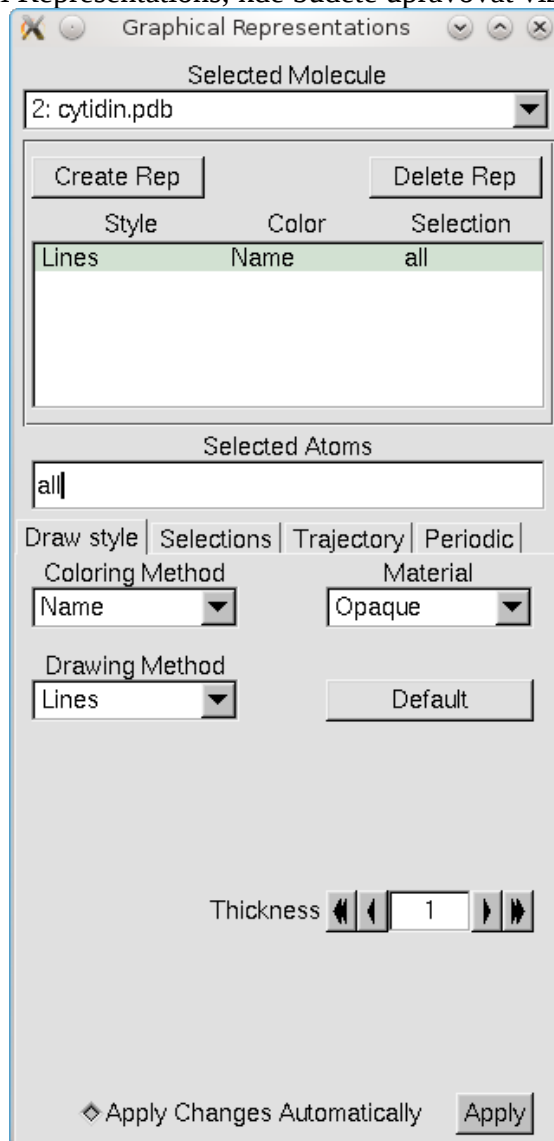
Pokud se nevyskytl až po sem žádný problém, tak další kroky už budou hračka. Nahranou molekulu můžeme smazat tak, že na ni jednou klikneme levým tlačítkem, a pak pravým tlačítkem a v nabídce, která se objeví, dáme Delete Molecule.

S molekulou v zobrazovacím okně můžete točit pomocí levého tlačítka myši, přibližuje a oddaluje se kolečkem myši.

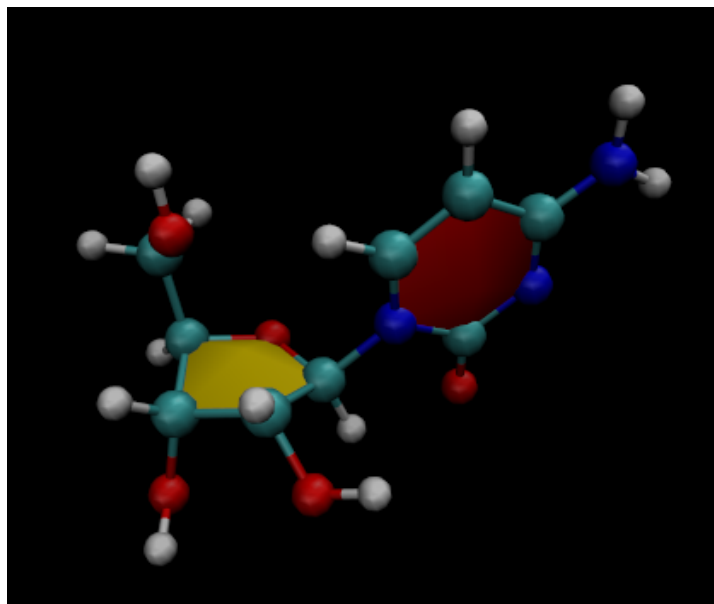
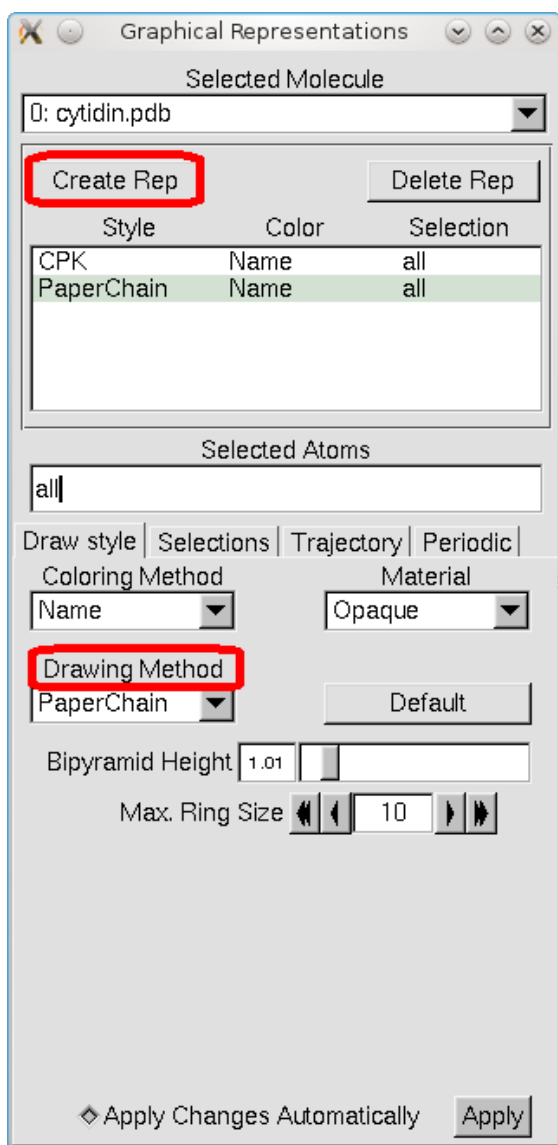
Molekula je vyobrazena pouze pomocí barevných čar. Změna vyobrazení se provádí následujícím způsobem. Klikněte v liště hlavního okna na Graphics → Representations...



Objeví se nabídka Graphical Representations, kde budete upravovat vizáž vaší molekuly.



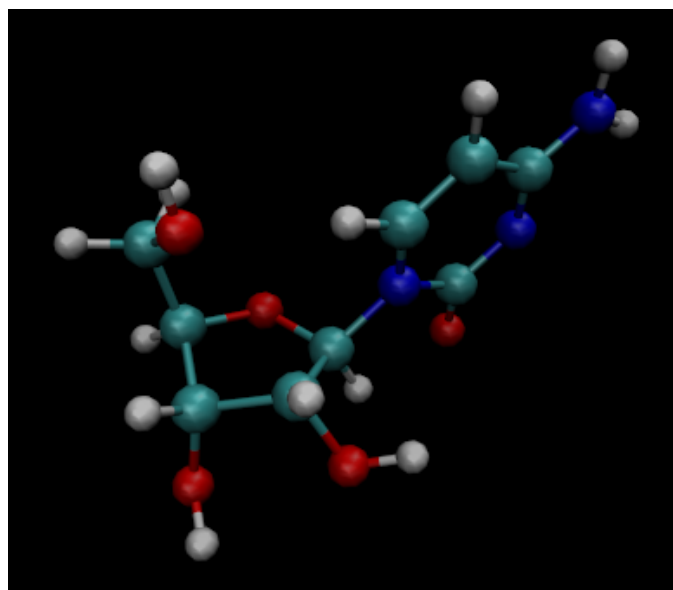
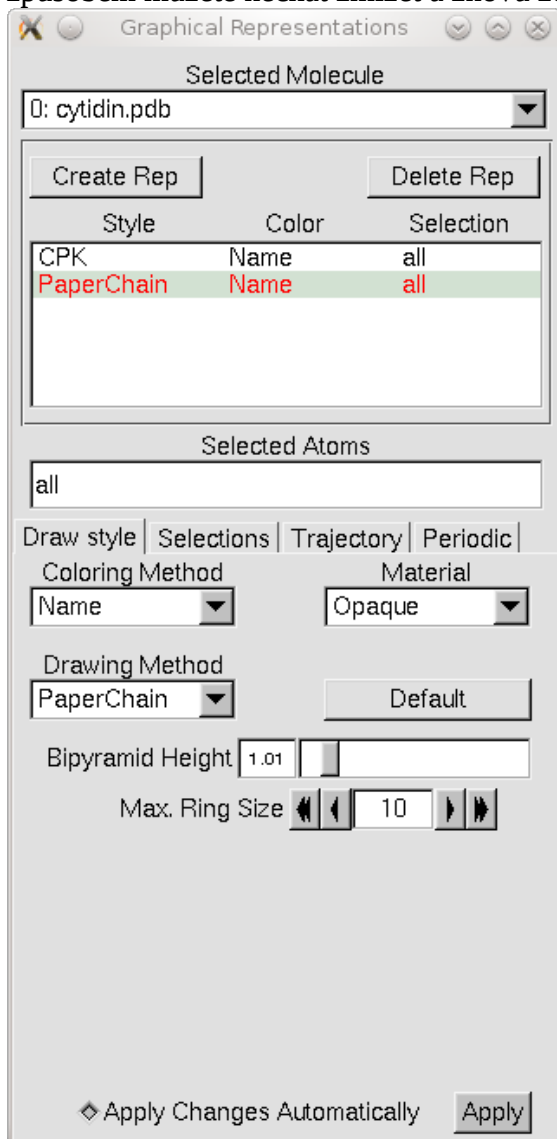
V rozbalovací nabídce Drawing Method klikněte třeba na CPK a molekula cytidinu bude zobrazena pomocí kuličkového modelu. Zkuste si proklikat i další metody zobrazení. Některé nebudou fungovat a budete mít černou obrazovku, protože chybí potřebná data. Ponechte jako zobrazovací metodu CPK a klikněte na tlačítko Create Rep. Nyní jste vytvořili klon zobrazení a z nabídky Drawing Method vyberte PaperChain. Cyklické části molekuly se vyplní a obarví.



Nyní máme dvě různé tzv. reprezentace molekuly. Jejich seznam vidíme v okně Graphical representations. Pokud na některou z nich kliknete, můžete ji upravovat. Na obrázku na této stránce vidíte označenou reprezentaci PaperChain-Name-all. Základem je si uvědomit, že reprezentace se navzájem překrývají, pokud byste vytvořili další reprezentaci a jako Drawing Method byste zvolili Lines (tedy základní metodu zobrazení), neviděli byste změnu, protože linie by byly schované „uvnitř“ kuličkového vyobrazení.

Upravovat můžete nejen metodu vykreslení molekuly, ale i vybarvování v kolonce Coloring Method. Označte reprezentaci CPK-name-all a změňte Coloring Method na Chain. Molekula se obarví celá modře, protože všechny její atomy jsou součástí jednoho řetězce nukleové kyseliny (žádný další řetězec tu teď není). Nutno podotknout, že v případě cytidinu nemá takové obarvování žádný smysl a přehledné zůstává i základní zobrazení podle prvků (Name). Různé metody vybarvování ocení uživatelé při prohlížení komplikovanějších struktur.

Pokud jste vytvořili nějakou reprezentaci a nechcete ji v daném momentě vidět, můžete ji buď označit a kliknout na Delete Rep, čímž ji smažete trvale. Můžete ji rovněž skrýt dočasně tak, že ji označíte dvojklikem. Skryté reprezentace jsou vyznačeny červeně. Zviditelnění provedete dalším dvojklikem na danou reprezentaci v seznamu (zde je na místě důležitá poznámka, že stejným způsobem můžete nechat zmizet a znovu zobrazit molekuly v seznamu v hlavním okně).



Zbývá ještě pole Selected Atoms, kde v tuto chvíli máme „all“. Do této kolonky se píšou klíčová slova, která označují různé části molekul. V případě molekuly cytosinu je zbytečné se tím zabývat, ale jakmile si necháte zobrazit větší molekuly DNA, bude se vám to hodit. Na následujících příkladech se pokusím objasnit, jak fungují klíčová slova „resid“ a „chain“, která se vám budou hodit nejvíce.

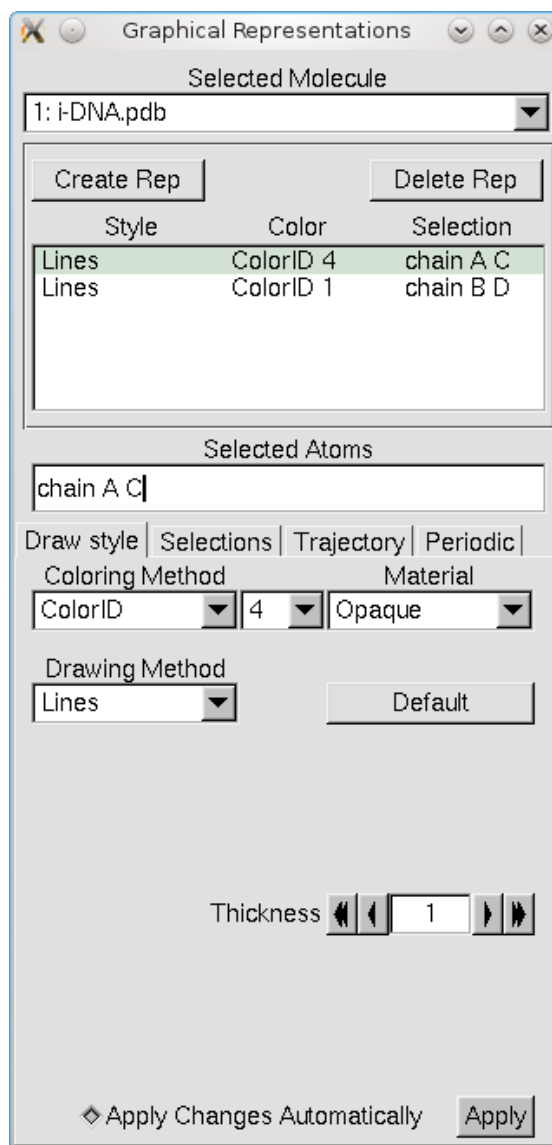
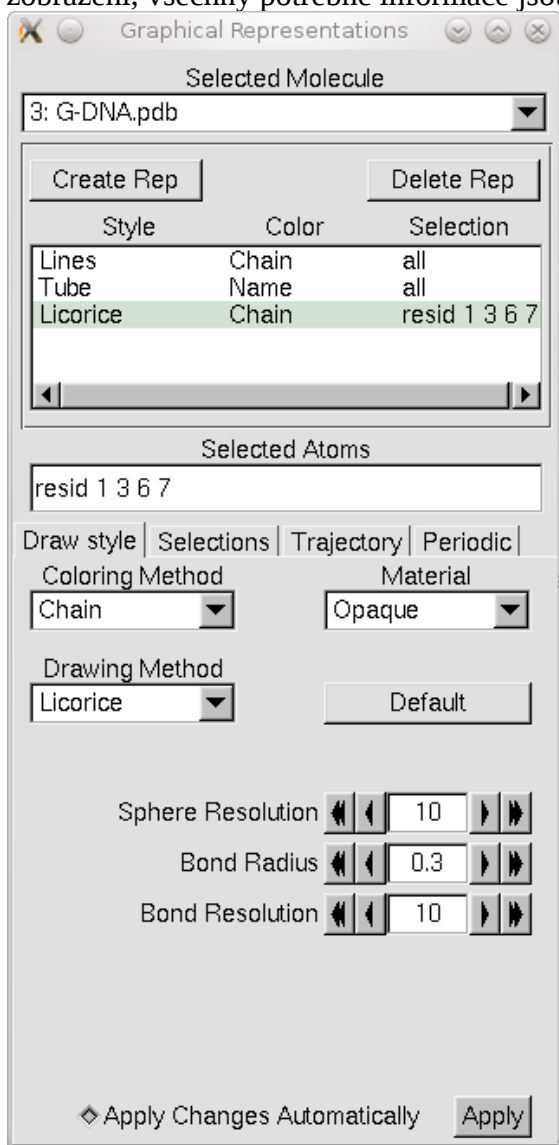
resid 1 3 – zobrazí v dané reprezentaci pouze reziduum s číslem 1 a 3

resid 1 to 3 – totéž, ale zobrazí se rezidua 1 až 3, tzn. 1, 2 a 3 ☺

analogicky

chain A B D – zobrazí řetězec A, B a D, tedy první, druhý a čtvrtý

Závěrem bych pro vás měl alespoň jeden tip, jak si nechat vykreslit molekuly ze studijních materiálů pro lepší pochopení jejich struktury. Zkuste na molekulách G-DNA a i-DNA následující zobrazení, všechny potřebné informace jsou vidět.



To je ze základů VMD vše, doufám, že vás to moc nezatíží a zároveň je to pro vás postačující. A ještě bych vám měl prozradit, že v molekule i-DNA, kterou jsem vám umístil do studijních materiálů, chybí ten proradný proton na dusíku N3 v každém C<sup>+</sup>C páru, ale myslím, že poznáte, kde si ho domyslet/nakreslit. Pokud byste měli jakékoli dotazy (nejen) ohledně používání VMD, neváhejte se ozvat.