

Installation und Benutzung der vorgestellten Skripte zur Buttonkontrolle von Biomoleküldarstellungen

Peter Schellenberg, Center of Physics, University of Minho,
Campus de Gualtar, 4710-057 Braga

 peter.schellenberg@fisica.uminho.pt

In diesem Text soll kurz aufgezeigt werden wie man das Programm 'Visual Molecular Dynamics' (VMD) in Verbindung mit den Skriptfiles vmdscriptger.zip bzw. vmdscriptger.tar.gz. installiert und verwendet (Der Inhalt der beiden gezippten files ist identisch!). Für ein besseres Verständnis lesen Sie bitte meine Anleitung: 'Improving presentations with the program 'Visual Molecular Dynamics' by controlling the display with the help of button navigation windows'.

Installation:

- Versichern Sie sich, dass VMD auf Ihrem Computer installiert ist. Falls nicht, laden Sie VMD herunter (<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>) und folgen Sie der Installationsanleitung.
- Entpacken Sie vmdscriptger.zip bzw. vmdscriptger.tar.gz. Der Ordner vmdscriptger wird erzeugt. Bis jetzt sind nicht alle Präsentationen in diesem Ordner auf Deutsch. Sollten Sie Englisch bevorzugen, wählen sie die entsprechenden gezippten Files vmdscripteng.zip bzw tar.gz.
- Falls Sie Linux/Unix gebrauchen, sind die Skripte gebrauchsfertig, vorausgesetzt Sie starten VMD in Ihrem home –Verzeichnis, Dies ist der Fall, wenn VMD in diesem Verzeichnis von der Kommandozeile aus oder durch Klicken des entsprechenden Icons auf ihrem Desktop gestartet wird.

Falls Sie Windows or Mac-OS verwenden, müssen Sie die Pfade zu den pdb-files in jedem VMD- Skript Ihrer Pfadstruktur anpassen. Dies geht problemlos, wenn Sie einen Editor verwenden, der einen Suchstring in allen geladenen Files auf einmal ändern kann. Dafür kommen z.B. die Freeware Editoren Notetab(-light), Crimson Editor oder der Shareware Editor Winedt in Frage. Falls aus irgendwelchen Gründen nötig, können Sie unter Linux ganz entsprechend den Editor jedit verwenden, oder von der Kommandozeile aus eingeben:

```
sed -i -e 's|vmdscriptger/|home/myname/vmdneudir/|' *.vmd
```

Zusätzliche Informationen finden Sie in der Anleitung vmdinstruct. Alle und nur Filenamen beginnen in den Skriptfiles mit 'vmdscriptger/', die Sie somit suchen und

durch Ihren Pfad ersetzen können z.B. durch `C:/users/myname/vmdscriptger/`. Benutzen Sie forward-slashes! Der Rest des Pfades (`/pdbfiles/1abc.pdb`) sollte gleich bleiben!

- Starten Sie VMD, gehen Sie zu File -> Load State und laden eines der *.vmd - Skripte. Unter Linux/Unix können Sie statt VMD auch eines der Shell -Skripte `vmddemoger.sh` bzw. `vmdteachger.sh` im Verzeichnis starten, dabei wird ein Buttonfenster mit einer Auswahl der zur Verfügung stehenden Themenkomplexe gestartet. Diese Skripte können Sie auch auf die graphische Benutzeroberfläche kopieren und von dort starten. Durch Editieren des Skriptes sind die Buttons entsprechend Ihren Anforderungen modifizierbar.

In jedem Fall sollte ein Protein im Graphikfenster zu sehen sein, und zusätzlich sollte das Buttonkontrollfenster erscheinen. Falls Sie das Protein nicht sehen, haben Sie wahrscheinlich im vorherigen Schritt einen Fehler gemacht. Falls Sie das Molekül sehen, aber es bewegt sich nicht oder nur langsam, prüfen Sie Ihre Graphikkarte und installieren Sie ggf. die 3D- Graphiktreiber für OpenGL!

Inhaltsverzeichnis der Skripte in `vmdscriptger.zip` / `*.tar.gz`

Das folgende Inhaltsverzeichnis soll Ihnen eine grundlegende Idee geben, welche Biomoleküle in den einzelnen Skripten dargestellt und welche pdb- Files dafür benutzt werden. Eine gründlichere Beschreibung finden Sie im Text `vmdinstruct.pdf`.

Alle Filenamen starten mit einem Keyword, das Ihnen schon eine grundlegende Idee geben sollte, welches System dargestellt ist. Dahinter ist das eines der Wörter `button`, `radiobutton`, `hypertext` oder `animation` verwendet und sagt aus welcher Art die Präsentation ist. In der Button -Präsentation ist ein einzelnes Keyword zur Charakterisierung der durch Drücken das Buttons erzeugten Darstellung zu finden. In Hypertext und Radiobutton Präsentationen sind ganze Sätze mit Erklärungen zur Darstellung gegeben. Falls keines dieser Worte folgt, handelt es sich um ein Standard -VMD -Skript.

antibodybutton.vmd: `1fdl.pdb`, `1igj.pdb`, `1igt.pdb`, `1ndg.pdb`, `1yqv.pdb`

kompletter Antikörper, Digoxin bindendes FAB Fragment als Beispiel für die Anbindung eines kleinen Liganden, drei unterschiedliche monoklonale Anti -lysozyme FAB Fragmente mit angebundenem Lysozym als Beispiel für einen grossen Antigen und um die unterschiedlichen Anbindungsgeometrien für die drei unterschiedlichen monoklonalen Antikörper darzustellen.

aptamerbutton.vmd: `1hao.pdb`

Anbindung eines 15mer DNA-Aptamers an Thrombin, alternativer Bindungsstelle für ein 29mer, quenchen der TRP und TYR -Fluoreszenz bei den beiden Aptameren.

atpsynthaseanimation.vmd: `1c17.pdb`, `1e79.pdb`, `1l2p.pdb`, `2a7u.pdb`

ATP-Synthase, Animation zeigt die spezifische Rotation der ATP-Synthase

bacterialrc.vmd: `1pcr.pdb`

Bakterielles Photosynthetische Reaktionszentrum, mit einem angebondenen Cytochrom.
bacteriorhodopsinanimation.vmd: 1iw6.pdb, 1ixf.pdb, 1iw9.pdb, 1ucq.pdb
 Die cis -trans Isomerisierung nach Anregung als überlappende Strukturen und als Animation.

bovinerhodopsin.vmd: 1gzm.pdb
 Seepigment der Säugetiere, keine Buttonkontrolle (bis jetzt)

Designerproteinbutton.vmd: 1qys.pdb
 α -Helix- β -Sheet Struktur mit typischen Wasserstoffbrücken, Designerprotein. Diese Präsentation wird auch zur Demonstration des Übergangs von einer atomaren Strukturdarstellung zur abstrakten Proteindarstellung verwendet.

DielsAlderRibozymebutton.vmd: 1ykq.pdb, 1ykv.pdb, 1y1s.pdb
 Künstliche, katalytisch wirksame RNA mit und ohne Substrat.

ElongFactortrnabutton.vmd: 1ttt.pdb
 Protein - t-RNA Komplex, Tertiärstruktur von RNA, modifizierte Nucleobasen.

gfbutton.vmd: 1emb.pdb
 wt-Green Fluorescent Protein, Protonennetzwerk, das relevant für das Verständnis der Photophysik und des ESPT ist.

gfpswitchanimation.vmd: 1a53.pdb, 1a56.pdb
 GFP -analoges Protein asFP595, Photoschaltung dargestellt als Überlapp zwischen cis -und trans Struktur und als Animation.

hollidayjunction.vmd: 1crx.pdb, 2crx.pdb, 3crx.pdb, 4crx.pdb, 1p4e.pdb
 Holliday Junction Konstrukt, Startzustand, Intermediate und Endzustand.

phototropinanimation.vmd: 1n9l.pdb, 1n9o.pdb
 Phototropin light Lichtdetektionsmechanismus, reversible Bildung einer kovalenten Bindung zwischen dem Flavin und einem Cystein Schwefel atom.

psIIbutton.vmd, psIIradiobutton.vmd, psIIhypertext.vmd: 1s5l.pdb
 PhotosystemII -Komplex, mit allen Antennenpigmenten und dem Mn-Cluster sowie mit dem eigentlichen RC -Teil D₁D₂ hervorgehoben.

pypanimation.vmd: 1s1y.pdb, 1s1z.pdb, 1otb.pdb
 Photoactive Yellow Protein (PYP), die Photoschaltung ist dargestellt als Überlapp der cis und trans Formen sowie als Animation.

rclh1button.vmd: 1pyh.pdb, 1kzu.pdb
 Shown: Reaktionszentrum - Antennen Komplex mit LHI/RC und separat Darstellungen von LHII

ribosomebutton.vmd: 1jgp.pdb, 1giy.pdb
 Komplettes Ribosome mit Protein und r-RNA -Gerüst, und drei t-RNA in atomarer Auflösung und bei der Übersetzung einer m-RNA dargestellt.

ricedwarfvirus.vmd: 1uf2.pdb
 Vollständige virale Struktur.

sensoryproteinanimationbutton.vmd: 2f93.pdb, 2f95.pdb
 Sensory Protein, die Photoschaltung ist dargestellt als Überlapp der cis und trans Formen sowie als Animation. Das Protein ähnelt demjenigen, das beim Sehprozess von Tieren beteiligt ist.