

Dokumentácia 3Dmol.js

3Dmol.js je objektovo orientovaná JavaScriptová knižnica, ktorá umožňuje vizualizovať molekuly uložené vo formáte PDB (Protein Data Bank). Táto knižnica je navrhnutá tak, aby bola intuitívna a ľahko integrovaná do webových aplikácií.

Funkcionalita:

- *Vizualizácia molekúl:* Dokáže vyobraziť ľubovoľnú molekulu z PDB súboru v 3D prostredí.
- *Interaktivita:* Podporuje interakciu s jednotlivými atómami a rezíduami.
- *Informácie:* Poskytuje podrobné informácie o atónoch napríklad:
 1. Typ atómu (napr. C, N, O).
 2. Rezíduum (názov a číslo).
 3. Reťazec ku ktorému rezíduum patrí
- *Štýl vyobrazenia:* Knižnica poskytuje možnosť prispôbiť vzhľad molekúl, napríklad my sme pre náš projekt požadovali štýl cartoon, pretože je prehľadný.

Prečo použiť 3Dmol.js ?

- *Jednoduché aplikovanie:* Stačí ju importovať do HTML súboru a môžete ju okamžite použiť.
- *Flexibilita:* Podpora viacerých formátov molekúl (napr. PDB, SDF).
- *Aktívna komunita:* Stále aktualizovaná a podporovaná komunita vývojárov.

Prečo by som uprednostil 3Dmol.js pred inými knižnicami v našom projekte ?

- Nemá problémy s vizualizáciou jednotlivých aj viacerých rezíduí naraz.
- Splňa všetky požiadavky.
- A ešte podporuje export molekúl a ich vizualizovaných častí priamo do PNG formátu.

Požiadavky na použitie:

- Webový prehliadač, ktorý podporuje JavaScript a WebGL.
- Samotná knižnica 3Dmol.js, ktorú stačí naimportovať.

Oficiálna dokumentácia:

- <https://3dmol.org/doc/index.html>, <https://github.com/3dmol/3Dmol.js>