

# Software pro tvorbu molekul a systémů

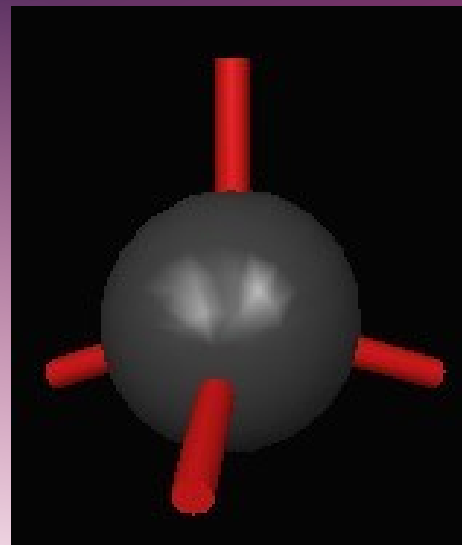
Vojtěch Stránský

# Obecně

- Generují celé molekuly (DNA podle sekvence, nanotrubičky)
- Musí exportovat pro požadovaný SW
- Většinou konzolové

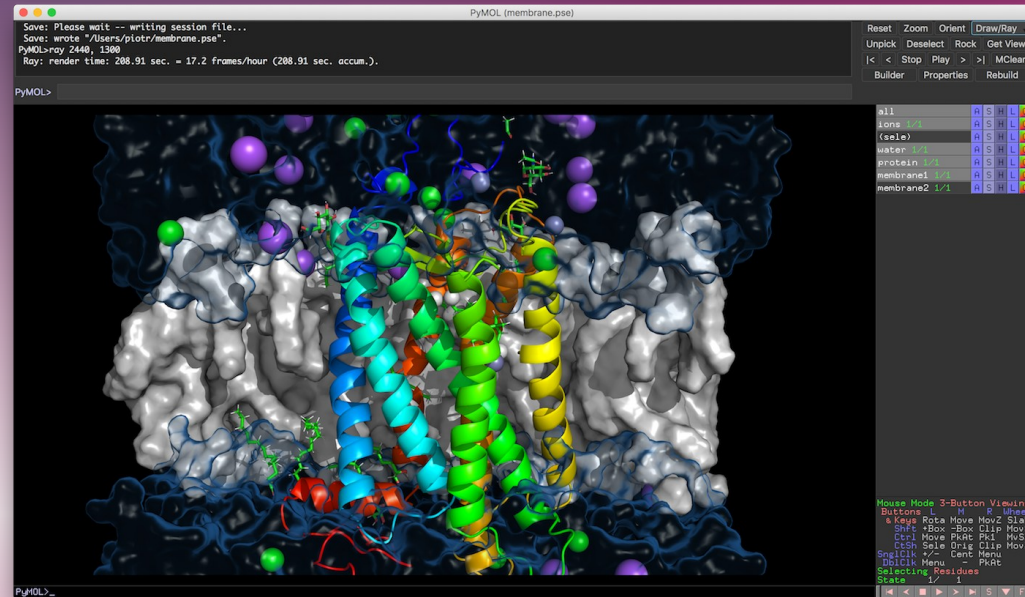
# MacMolPlt

- GUI
- Volný
- WS, Linux, MacOS
- Dokumentace stručná
- Postaveno na GAMESS
  - Rok 1977
- Na internetu neznámý



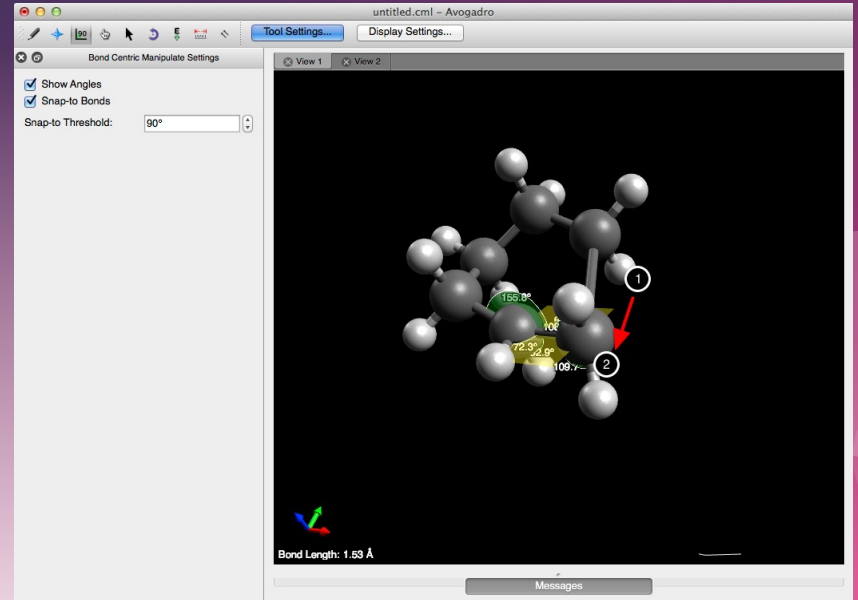
# PyMOL

- Konzolový s intíme vizualizací
- Placený, volný pro studijní účely
- WS, Linux, MacOS
- Obsáhlý
- Lze k němu dohledat návody



# Avogadro

- GUI
- Volný
- WS, Linux, MacOS
- Často používaný
- Rozsáhlé nástroje (DNA)
- Pěkná, přehledná vizualizace
- Lze k němu dohledat návody



# Atomsk

- Konzolový
- Volný
- WS, Linux, MacOS
- Dokumentace obstojná
- Návodý lze dohledat
- Není interaktivní
- Používaný

Děkuji za pozornost