

บทปฏิบัติการ: Try to visualize

(อ้างอิงจาก เอกสารการอบรม Concise Thai version of VMD guide: Usage and demonstrations

โดย ดร. วรณัฐลันท์ ทิพย์มณี ภาควิชาชีวเวชศาสตร์ คณะแพทยศาสตร์ มหาวิทยาลัยสงขลานครินทร์)

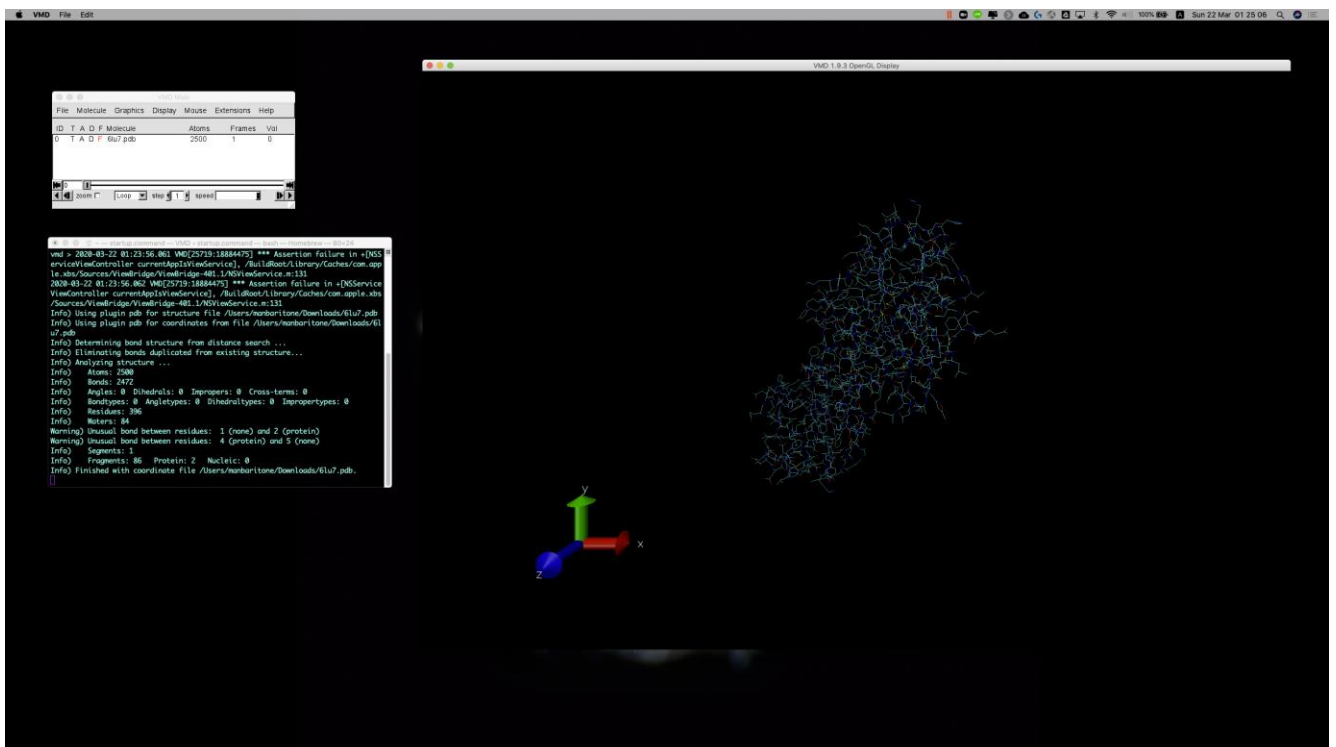
Introduction to VMD

1. ทำการเปิดโปรแกรม VMD

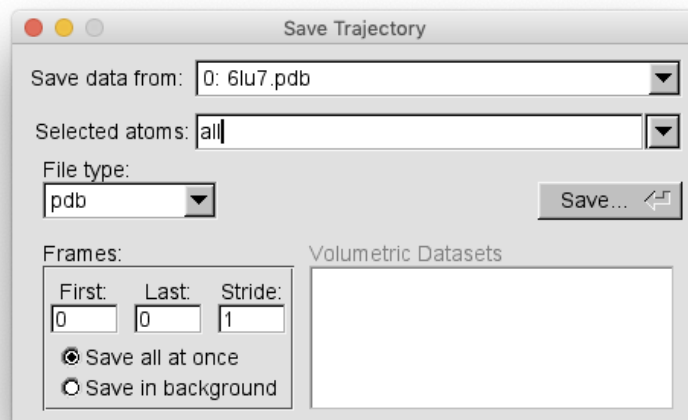
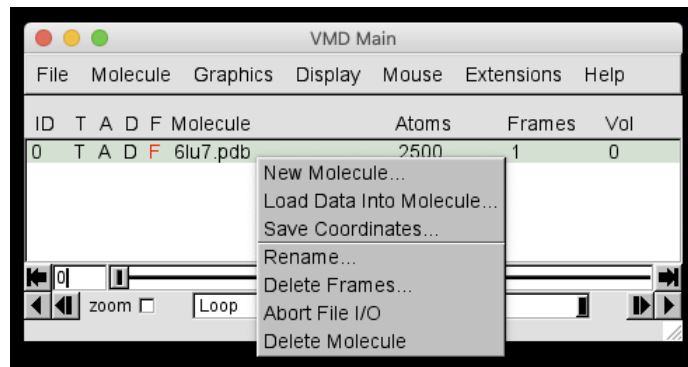
ซึ่งโปรแกรมจะประกอบไปด้วย 3 หน้าต่าง คือ

1. หน้าต่าง Display เป็นหน้าต่างที่แสดงโครงสร้าง 3 มิติ
2. หน้าต่าง VMD Main เป็นหน้าต่างที่แสดงรายละเอียดของโมเลกุล และเมนูต่าง ๆ
3. หน้าต่าง command line เป็นส่วนที่แสดงถึงการทำงานโหมด command line ซึ่งสามารถใช้งานโดยการพิมพ์คำสั่งได้

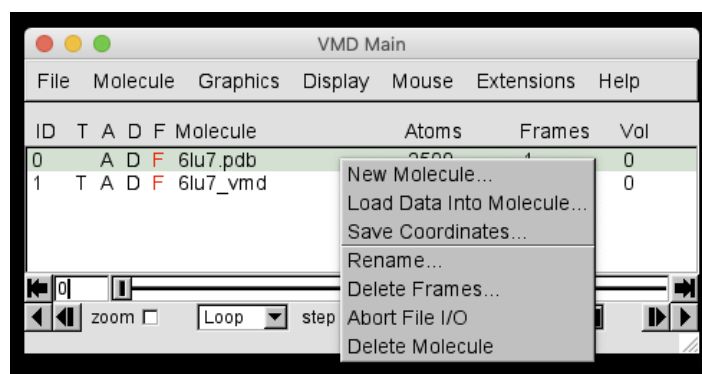
2. ทำการโหลดไฟล์ .pdb ที่ดาวน์โหลดมาเข้าสู่โปรแกรม VMD ไปที่หน้าต่าง VMD Main เลือกเมนู File > New Molecule... > Browse แล้วเลือกไฟล์ 6lu7.pdb และกดปุ่ม Load



3. ทำการบันทึก coordinate ด้วยโปรแกรม VMD เพื่อตัดไฟล์ส่วนแรกออกไป (จะแสดงเฉพาะในส่วนของ coordinate) วิธีการบันทึกทำได้โดย คลิกซ้ายเลือกโครงสร้างที่หน้าต่าง VMD Main ก่อน แล้วทำการคลิกขวา แล้วเลือก Save coordinates... แล้วตรง Selected atoms เลือก all จากนั้นกดปุ่ม Save แล้วบันทึกชื่อตามที่ต้องการ ตามด้วย .pdb



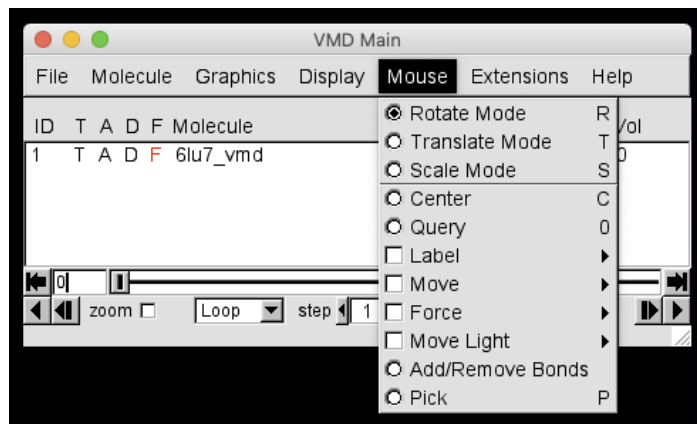
4. ทำการโหลดไฟล์ที่ทำการบันทึกเมื่อสักครู่เข้าสู่โปรแกรม VMD จากนั้นทำการลบโมเลกุล 6lu7.pdb ในเมนู VMD Main โดยทำการคลิกขวา เลือก Delete Molecule



โดยปกติหน้าต่าง Display จะมี Background เป็นสีดำ และอะตอมของ N C O H P และ S จะแสดงสีตามแบบ Corey-Pauling-Koltun (CPK) method ได้แก่

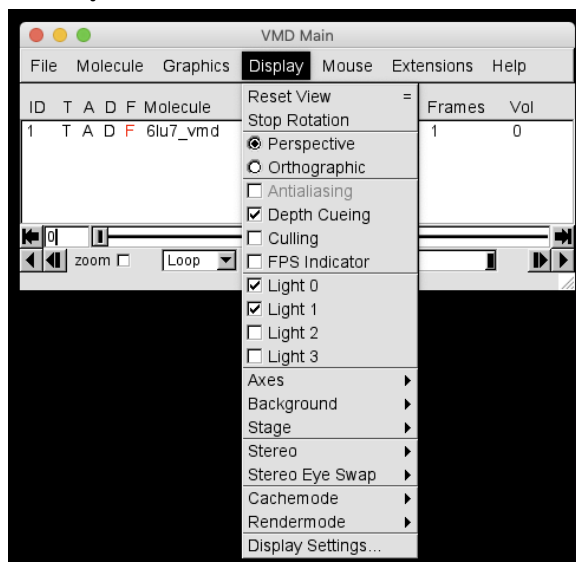
อะตอม Nitrogen (N) = สีน้ำเงิน อะตอม Carbon (C) = สีฟ้า อะตอม Oxygen (O) = สีแดง
 อะตอม Hydrogen (H) = สีขาว อะตอม Phosphorus (P) = สีน้ำตาล อะตอม Sulfur (S) = สีเหลือง

5. เมื่อทำการโหลด pdb file ในการเริ่มต้นใช้งานผ่าน mouse สามารถเลื่อน หมุน เพิ่ม/ลดขนาด โดยสามารถใช้ปุ่มลัดบนคีย์บอร์ด ดังเมนู Mouse ดังนี้

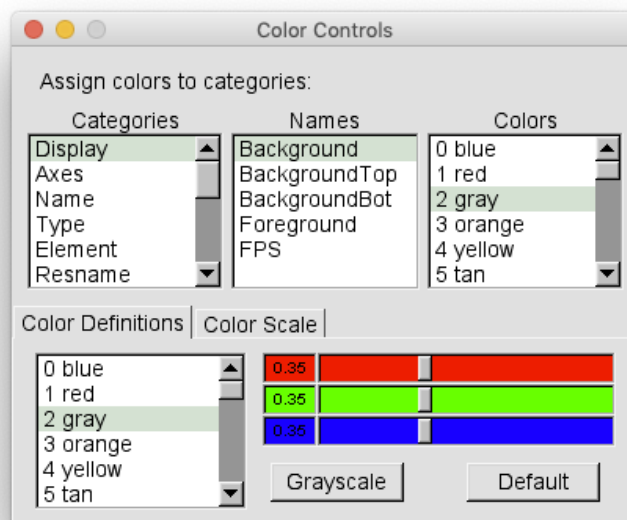
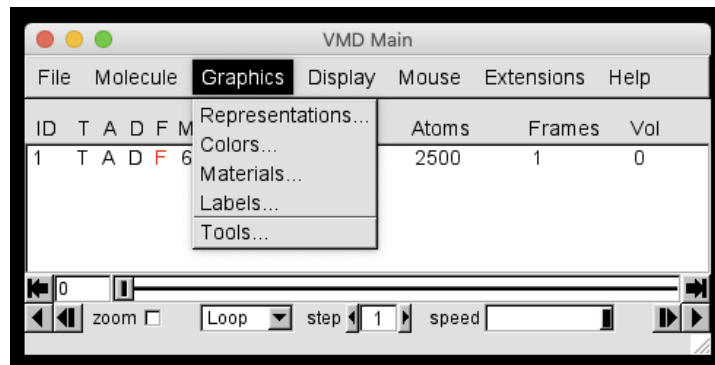


Translate (T) เลื่อนโครงสร้างตามแนวแกน X Y Z
 Rotate (R) หมุนโครงสร้าง
 Scale (S) ลด/เพิ่มขนาดในการมองโครงสร้าง (Zoom in/out)
 Reset View (=) Reset ขนาดโครงสร้างให้เหมือนตอนเริ่มต้น

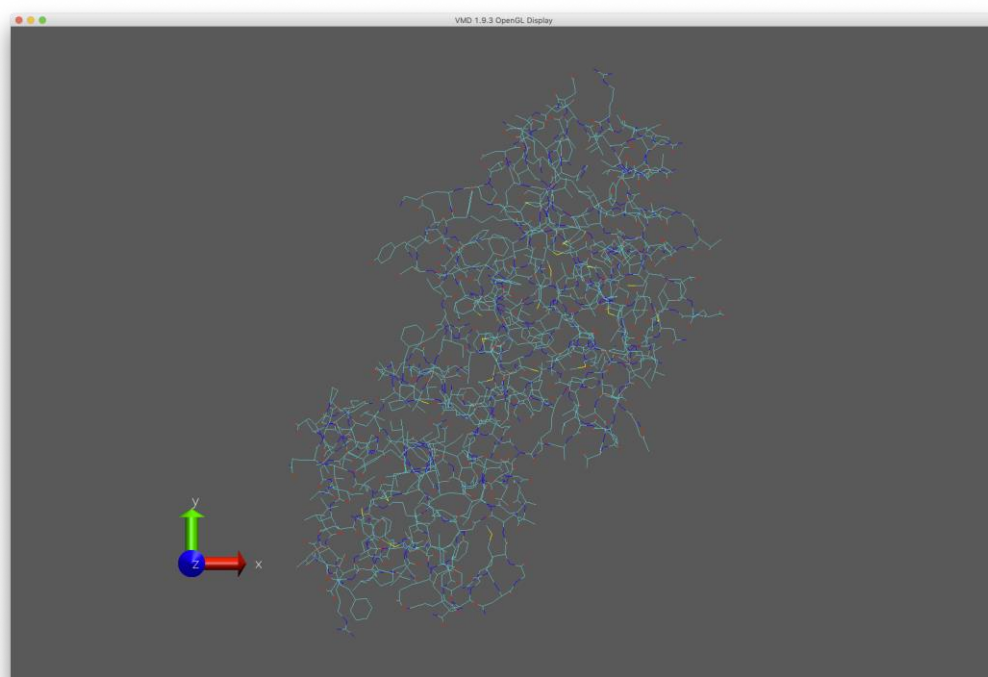
นอกจากนี้ผู้ใช้งานยังสามารถปรับมุมมองการมองโครงสร้างสามมิติแบบ Perspective หรือ แบบ Orthographic ได้ สามารถเอาแกน X Y Z ออก ปรับแสงต่าง ๆ ได้จากเมนู Display



6. สำหรับการตั้งค่า Display ขอให้ผู้ใช้ปรับรูปแบบมุมมองเป็นแบบ Orthographic และเอาเครื่องหมายถูกของ Depth Cueing ออก และแนะนำให้เปลี่ยนสีพื้นหลังของหน้าต่าง Display เป็นสีเทา (02 Gray) เพื่อให้การมองเห็นโครงสร้างชัดเจน โดยไปที่เมนู Graphic > Colors... เลือก Categories เป็น Display เลือก Names เป็น Background และเลือก Colors เป็น 2 gray ดังรูป



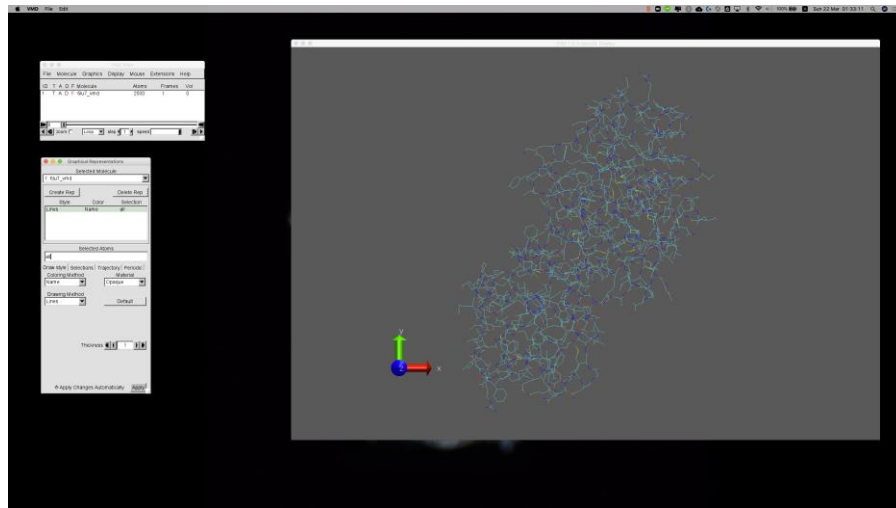
จะได้รับการแสดงผลโครงสร้าง ดังแสดง



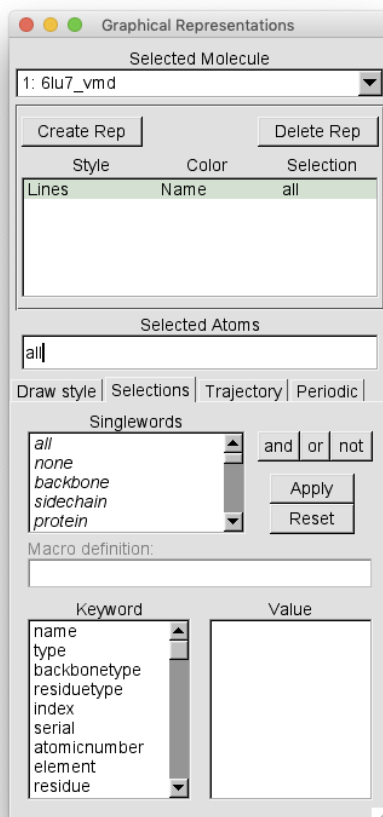
Basic selection and Graphical Representations

สำหรับในหัวข้อนี้จะแสดงวิธีการใช้คำสั่งในการเลือกเฉพาะส่วน และการแปลงภาพโครงสร้างให้เป็นแบบต่าง ๆ อันเป็นคำสั่งที่สำคัญต่อการใช้งาน VMD ในการดูโครงสร้างสามมิติของโปรตีน

1. โหลดไฟล์โปรตีน 6lu7 ที่ได้ทำการบันทึก coordinate โดยใช้ VMD จากนั้นไปที่เมนู Graphics > Representations



2. จากนั้นให้คลิกที่แถบ Selection จะปรากฏหน้าต่างคำสั่งออกมา โดยคำสั่งแบ่งออกเป็น 2 แบบ ได้แก่ Singlewords และ Keywords



คำสั่งแบบ Singlewords ที่มักใช้งานบ่อย

all	แสดงโครงสร้างทั้งหมด
backbone	แสดงในส่วน backbone (N, CA, C, O)
sidechain	แสดง sidechain ของ residue
protein	แสดงในส่วนของ protein
water	แสดงในส่วนของโมเลกุลน้ำ
sheet	แสดงในส่วนของโครงสร้างที่เป็น sheet
helix	แสดงในส่วนของโครงสร้างที่เป็น helix
coil	แสดงในส่วนของโครงสร้างที่เป็น coil
turn	แสดงในส่วนของโครงสร้างที่เป็น turn
acidic	แสดงในส่วน residue ที่เป็นกรด ASP, GLU
basic	แสดงในส่วน residue ที่เป็นเบส LYS, ARG, HIS
charged	แสดงในส่วน residue ที่มีประจุ ASP, GLU, LYS, ARG, HIS
polar	แสดงในส่วนของ residue ที่มีขั้วหรือมีประจุ
hydrophobic	แสดงในส่วนของ residue ที่ไม่มีขั้ว

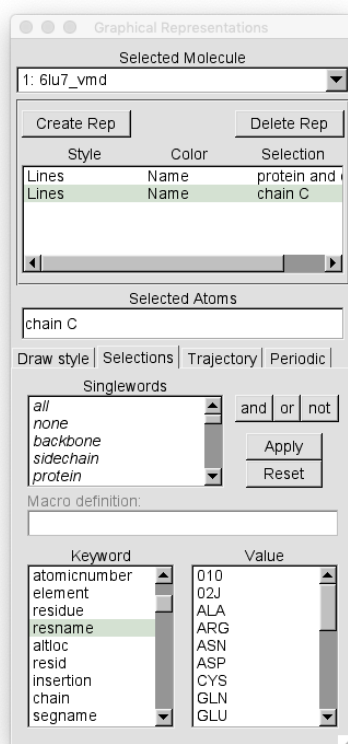
ผู้ใช้งานสามารถ scroll down ลงมาเพื่อดูคำสั่งอื่น ๆ ได้ ที่สำคัญ ก่อนทำการเลือกคำสั่ง ควรลบคำสั่งเก่าที่มีอยู่ก่อนหน้าในส่วนของ Selected Atoms แล้วจึง Double click เลือกคำสั่งที่ต้องการ และกด Enter เพื่อใช้คำสั่ง

สำหรับคำสั่ง Keywords ที่นิยมใช้งานบ่อย ๆ ได้แก่

name	ชื่ออะตอม
index	ลำดับของอะตอม (ลำดับจะเริ่มจาก 0)
atomicnumber	เลขอะตอม ตามตารางธาตุ
resname	ชื่อ residue (แบบอักษรสามตัว)
resid	ลำดับ residue

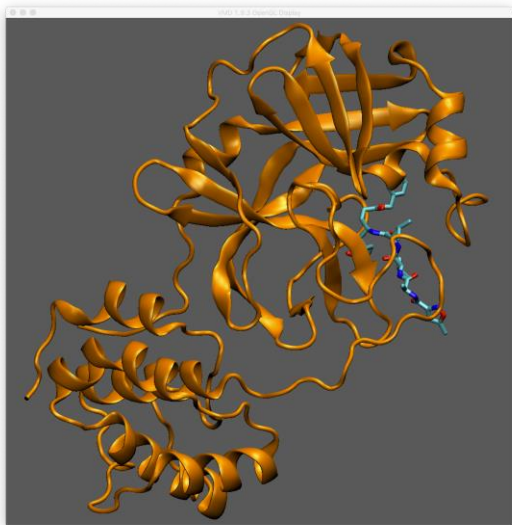
สำหรับการใช้งานนั้น จะใช้แบบ “Keyword Value” เช่น name C1A หรือ resname TRP เป็นต้น โดยค่าหรือคำสั่งสามารถดูได้จากช่อง Value ของ Keywords นั้น ๆ

3. จากไฟล์ 6lu7 นั้นให้ผู้ใช้งานแสดงในส่วนของโปรตีนเฉพาะ chain A และแสดงในส่วนของลิแกนด์เฉพาะ chain C โดยทำการกด Create Rep เพื่อการแสดงในส่วนของโปรตีน และลิแกนด์



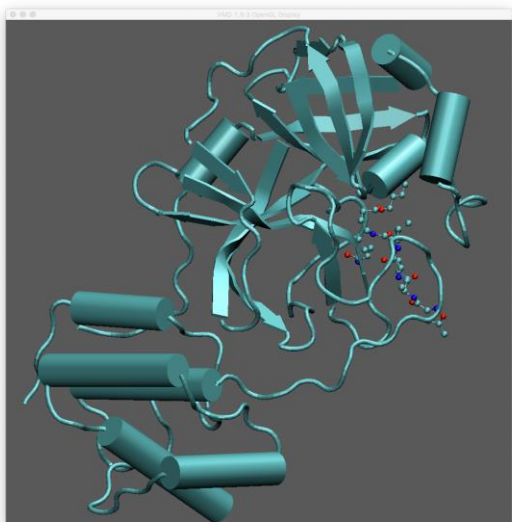
ในส่วน of field แรกให้เปลี่ยนเป็น protein โดยทำการคลิกซ้ายเลือก field แรก จากนั้นลบ all ในช่อง Selected Atoms ที่ และทำการพิมพ์ protein and chain A แทนลงไป สำหรับ field ที่สองให้พิมพ์ chain C

สำหรับการปรับแต่งการแสดงผลโครงสร้างให้อยู่ในรูปแบบ หรือลักษณะและสีต่าง ๆ สามารถทำได้โดยใช้เครื่องมือใน representations โดยสามารถทำได้ในหลายรูปแบบ เช่น



protein and chain A เลือก Drawing method
แบบ NewCartoon Coloring Method แบบ
ColorID (orange)

chain C เลือก Drawing method แบบ
Licorice



protein and chain A เลือก Drawing method
แบบ Cartoon Coloring Method แบบ
ColorID (cyan)

chain C เลือก Drawing method แบบ CPK

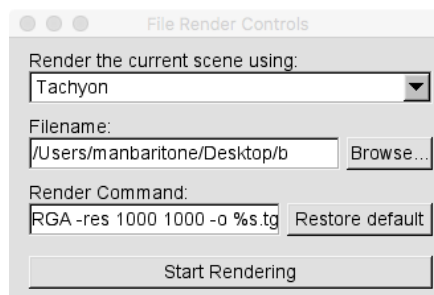
แบบฝึกหัด

จากไฟล์ 6lu7

เงื่อนไขเบื้องต้น ให้ปรับ Background เป็นสีขาว (8 White) ปรับมุมมองเป็น Orthographic นำ Depth Cueing ออก และกำหนดให้ไม่แสดง Axes

Draw Style:

- ส่วนของ Protein Chain A (protein and chain C) ใช้ Drawing Method เป็น New Cartoon, Coloring Method เป็นสีเหลือง (ColorID) และ Material เป็น Transparent
- ส่วนของ Ligand Chain C (chain C) ใช้ Drawing Method เป็น Licorice, Coloring Method เป็น Name และ Material เป็น Glossy



หลังจากนั้นให้ทำการบันทึกรูปภาพ โดยเข้าไปที่ File > Render โดยในช่อง Render the current scene using: ให้เลือก Tachyon จากนั้นกด Browse เลือกตำแหน่งที่ต้องการบันทึกไฟล์ พร้อมตั้งชื่อไฟล์ ในส่วนของ Render Command ให้ทำเปลี่ยนคำสั่ง -format TARGA เป็น -BMP และทำการการเพิ่มคำสั่งหลัง -format BMP เป็น -res 1000 1000 สำหรับการเปลี่ยน resolution โดยเราสามารถปรับเปลี่ยน resolution ตามที่เราต้องการได้

