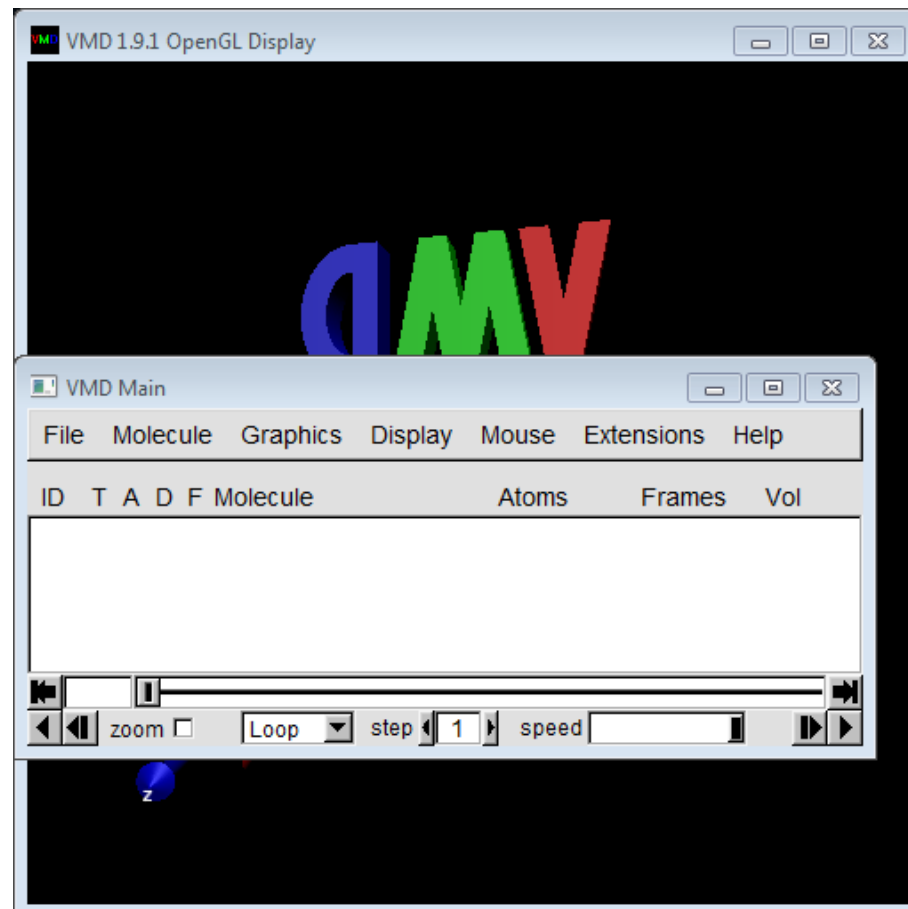


Bioquímica

Aula 02

Com o aumento do poder gráfico do computadores, a partir da década de 1980, começaram a ser desenvolvidos programas para visualização da estrutura tridimensional de macromoléculas biológicas. Apresentaremos um dos principais programas usados hoje em dia nas áreas de bioquímica e biofísica, o VMD (*Visual Molecular Dynamics*). Clique no ícone VMD e você terá as janelas mostradas ao lado. Há duas janelas principais no VMD, uma gráfica (*Open GL Display*), mostrada ao fundo, e outra chamada de menu principal (*VMD main*). Esta é usada para inserirmos os comandos do VMD, como comandos para carregarmos arquivos de macromoléculas biológicas e modificarmos sua representação na tela. Abra a pasta da disciplina e carregue o arquivo *dna.pdb* no menu principal.

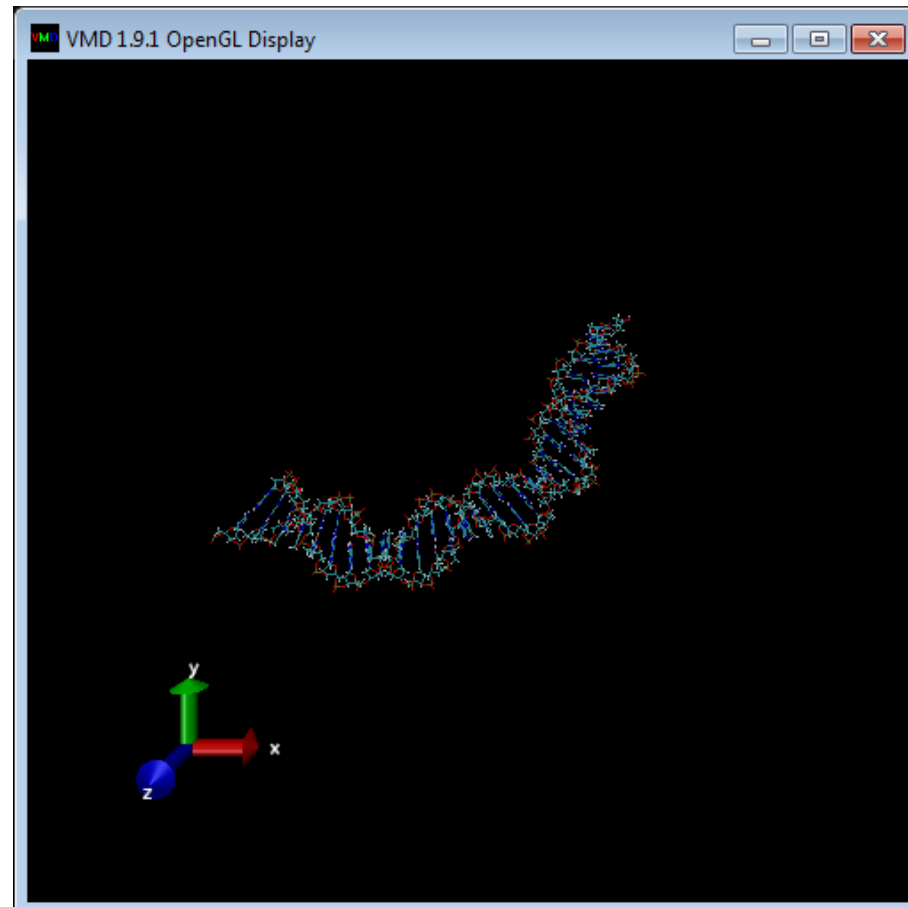


Menu principal e janela gráfica do programa VMD.

Referência:

HUMPHREY W; DALKE A; SCHULTEN K. VMD - Visual Molecular Dynamics. *Journal of Molecular Graphics*, Amsterdã, v.14, p.33-38, 1996.

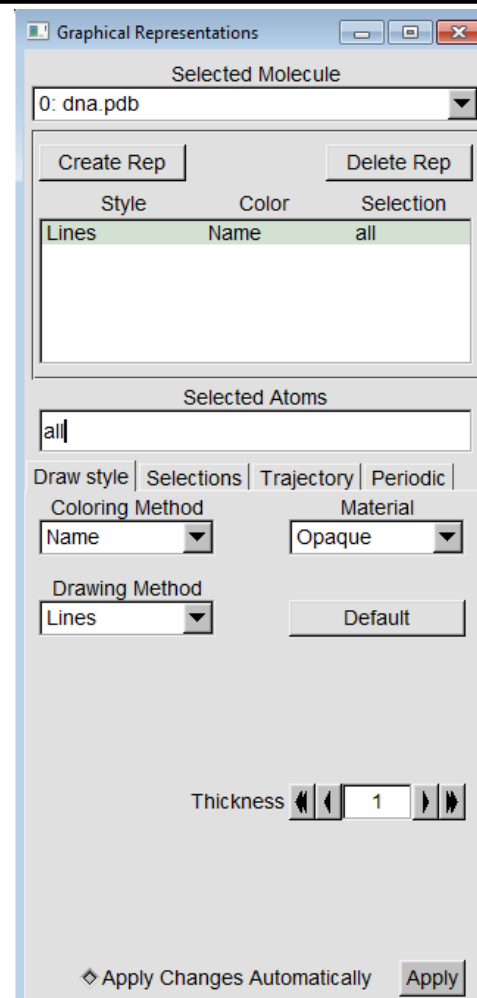
Depois de carregar a estrutura do DNA, clique na tela gráfica. Você terá a imagem ao lado. O botão da esquerda do mouse permite que você gire a molécula, o botão central permite que você aumente e diminua a estrutura na tela do computador. Movimente a molécula, de forma a familiarizar-se com os comandos do mouse. A representação indicada é chamada de *Lines*. Nela temos as ligações covalentes entre os átomos, com um código de cores. Ciano para ligações que saem do carbono, branco para ligações que saem do hidrogênio, vermelho para ligações que saem do oxigênio, azul escuro para ligações que saem do nitrogênio e amarelo escuro para ligações de saem do fósforo. A representação *Lines* dá uma ideia da conectividade dos átomos da molécula.



Janela gráfica do programa VMD, com a estrutura do DNA mostrada com a opção *Lines*..

Clique no menu principal na seguinte sequência: *Graphics > Representations*. Você terá um novo menu de comandos, como mostrado ao lado.

Neste menu podemos mudar a representação gráfica da molécula. Identifique no menu o campo *Drawing Method*. Este campo permite que você escolha diferentes formas de desenhar a mesma molécula no terminal gráfico. Há opções para destacar a estrutura secundária do DNA (*New Cartoons*). Há outra para destacar as posições dos átomos e suas ligações (CPK). A opção CPK desenha os átomos como esferas e as ligações covalentes como bastões entre os átomos. No próximo slide teremos uma descrição dos principais campos do menu gráfico.



Menu gráfico do programa VMD, com o campo *Drawing Method* em *Lines*..

Cria representações gráficas múltiplas para a mesma molécula, na indicada temos a representação *Lines* mostrada no campo branco.

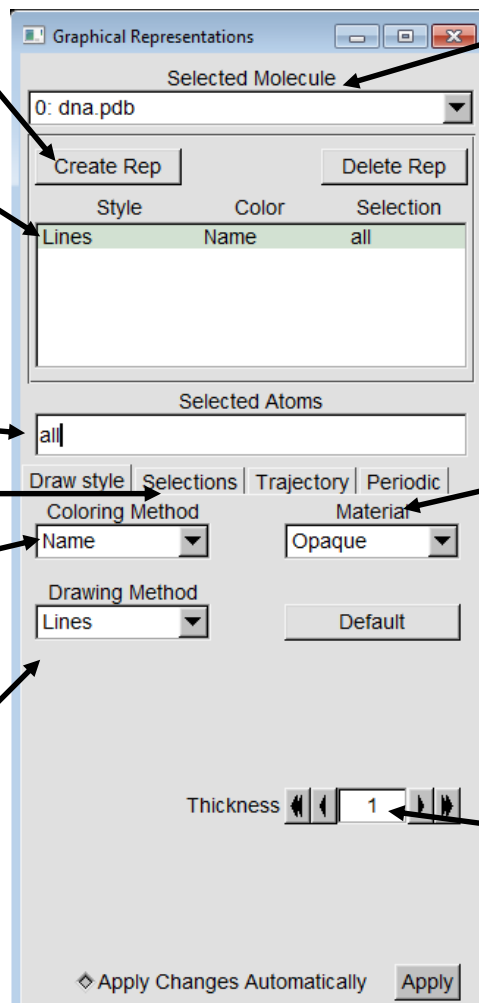
Quando temos mais de uma representação, é nesta janela que ficam as informações.

Indica quais átomos são mostrados, na situação indicada temos todos (*all*).

Você pode trabalhar com seleções específicas de átomos, clicando na opção *Selections*.

Campo que muda a cor ou critério de coloração da molécula.

Campo que seleciona a forma de desenhar a molécula.



Seleciona a molécula a ser mostrada, caso tenhamos mais de uma.

Campo que indica o efeito visual do material. Temos diversas opções, como desenhar os átomos da molécula com uma textura metálica.

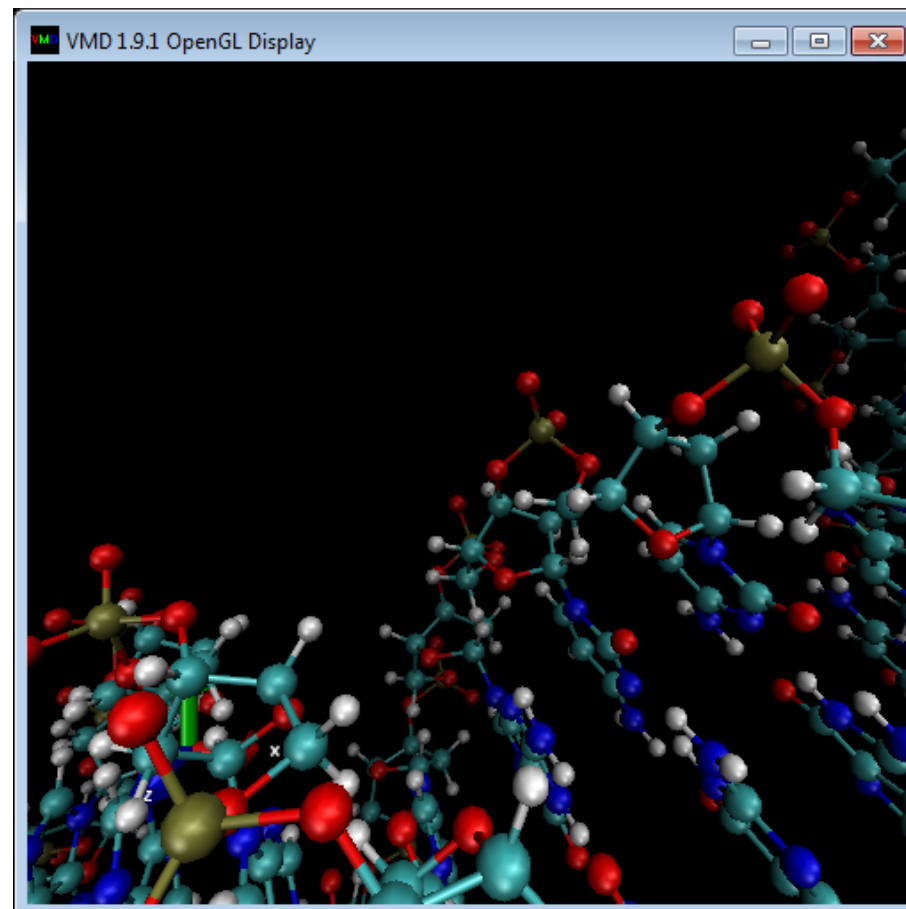
Campo que indica a espessura da linha usada para desenhar a molécula.

Mude a opção de *Drawing method* de *Lines* para CPK. A representação CPK é assim chamada em homenagem aos cientistas que a propuseram (Corey, Pauling e Koltun) (COREY e PAULING, 1953; KOLTUN, 1965). Ao mudarmos para CPK teremos a representação ao lado.

Referências:

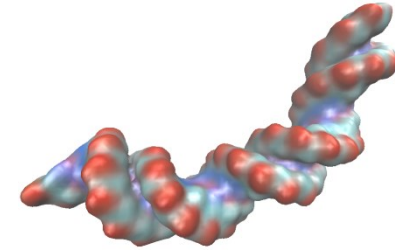
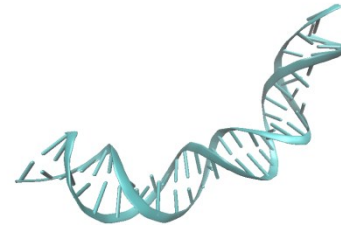
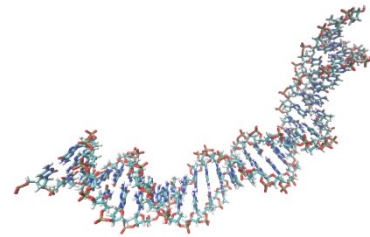
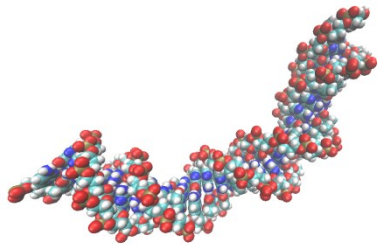
-COREY, RB; PAULING L. Molecular models of amino acids, peptides and proteins. Review of Scientific Instruments, Nova York, v. 24, n.8, p.621-627, 1953.

-KOLTUN WL. Precision space-filling atomic models. Biopolymers, Hoboken, v.3, n.6, p.665-79, 1965.



Janela gráfica do programa VMD, com a estrutura do DNA mostrada com a opção CPK..

Explore as diferentes opções de representação gráfica da molécula de DNA. Teste as seguintes opções: *VDW* (para representar átomos como esferas com raios proporcionais ao raios de van der Waals), *Licorice* (representa as ligações covalentes como bastões), *New Cartoon* (representa a estrutura secundária do DNA, com destaque para as fitas e as bases) e *QuickSurf* (mostra a superfície molecular do DNA).



VDW

Licorice

New Cartoon

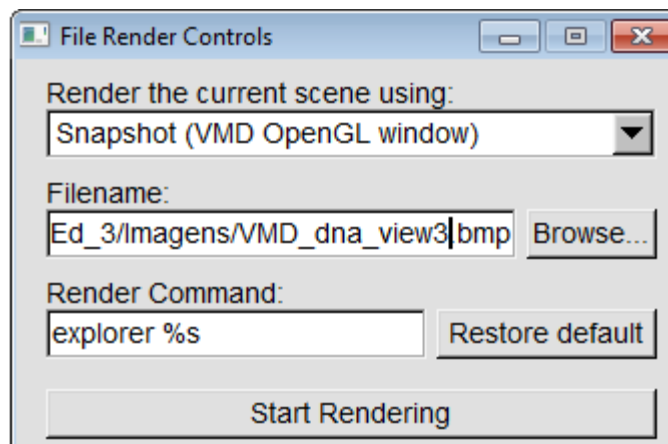
QuickSurf

O VMD é um programa gratuito, que tem versões para Mac OS X, Linux e Windows. Para fazer download entre no site:

<http://www.ks.uiuc.edu/Development/Download/download.cgi?PackageName=VMD>

Você precisa registrar-se no site.

Uma característica interessante do VMD, é que ele permite que você crie arquivos de imagens da molécula que você está visualizando. Essas figuras apresentam qualidade gráfica ideal para publicações científicas. Para gerar a imagem, que está na tela, vá ao menu principal clique: *File > Render...* . Você terá o menu abaixo. No campo *Filename* escolha a pasta e o nome do arquivo. Coloque a extensão *.bmp* . Há outras opções de formatos. Depois clique: *Start Rendering*. No Mac OS X tente a opção *.ps* para o formato de saída figura. Depois de gerada a figura, clique duas vezes no arquivo *.tga* gerado, para visualizar a figura.



ALBERTS, B. *et al.* **Biologia Molecular da Célula**. 4a edição. Porto Alegre: Artmed editora, Porto Alegre, 2004.

Última atualização: 12 de março 2018.