Software zur Visualisierung von Proteinen

von
Tim Dingersen

Grundsätzliche Eigenschaften:

-Erstellen eines dreidimensionalen Modells aus einer dafür vorgesehenen Datei.
Diese kann vom Benutzer anschließend betrachtet werden.

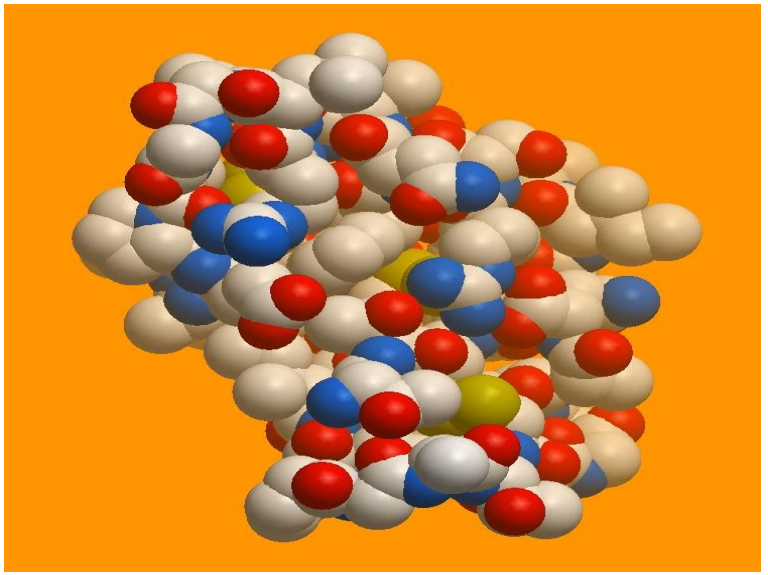
-Verschiedene Darstellungsmodi sind auswählbar, wie z.B. das van der Waals Modell oder die Banddarstellung, oder auch Kombinationen daraus

-Die Atome oder Aminosäuren (oder ganze Gruppen) sind anwählbar und deren Darstellung kann einzelnd eingestellt werden

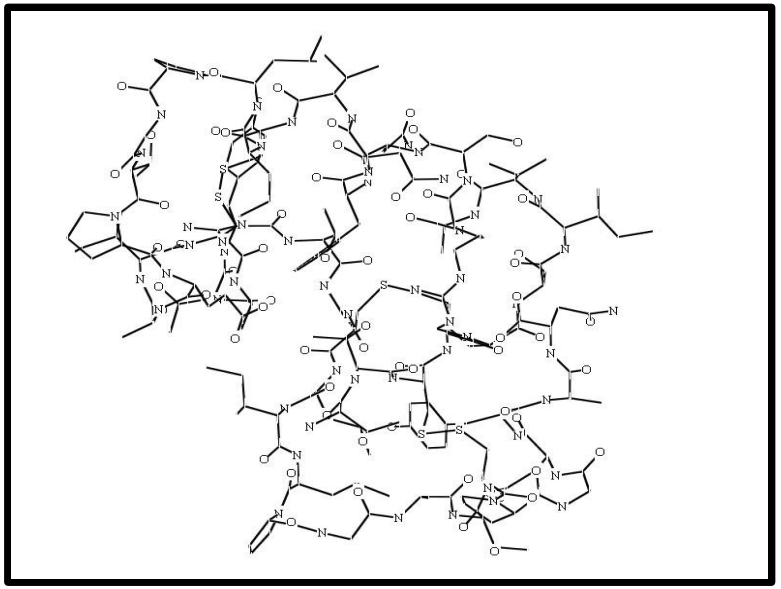
Verschiedene Darstellungsmodi

des Crambins aus dem Samen der Pflanze „CRAMBE ABYSSINICA“

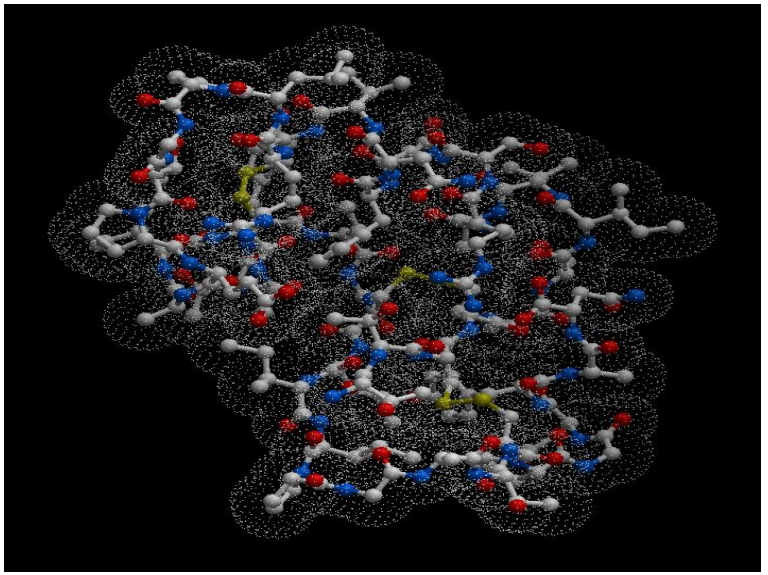
Band - Modell



Van der Waals - Modell



Chemisches Modell



Sticks and Balls - Modell

Programme, die ich hier kurz vorstellen möchte:

- SwissView
- Chimera
- ICM-Browser
- JMol
- Amira

SwissView

...oder auch als „Deep View“ oder „Swiss pdb-Viewer“ bekannt

-entwickelt vom Swiss Institute of Bioinformatics

-verfügbar für Mac, Windows und seit kurzem auch Linux

-Lizenz: Freeware

Features:

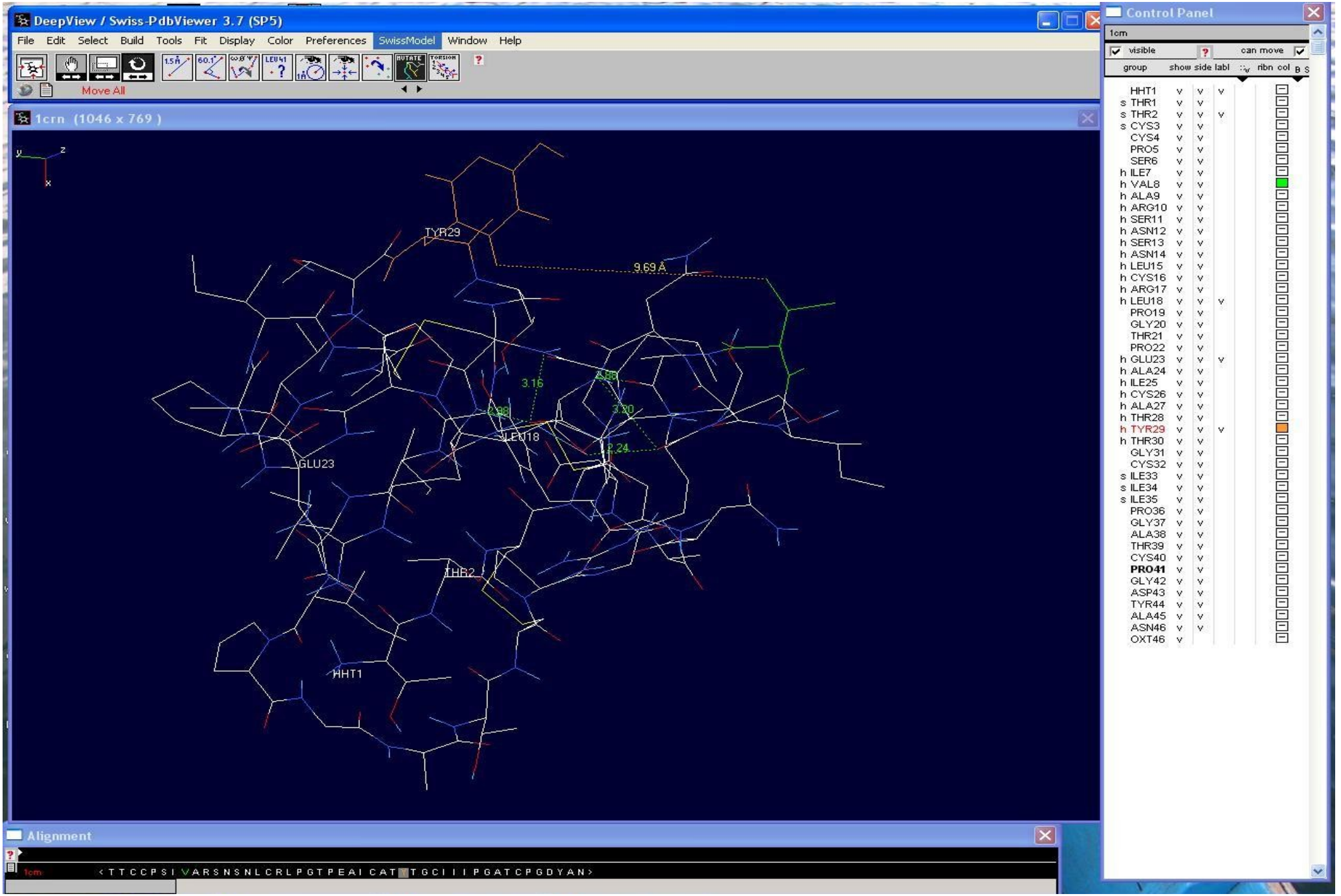
-simultanes Bearbeiten von mehreren Molekülen in getrennten Layern

-zusammenfügen dieser Moleküle in eine Darstellung bzw. zu einem Pdb-File

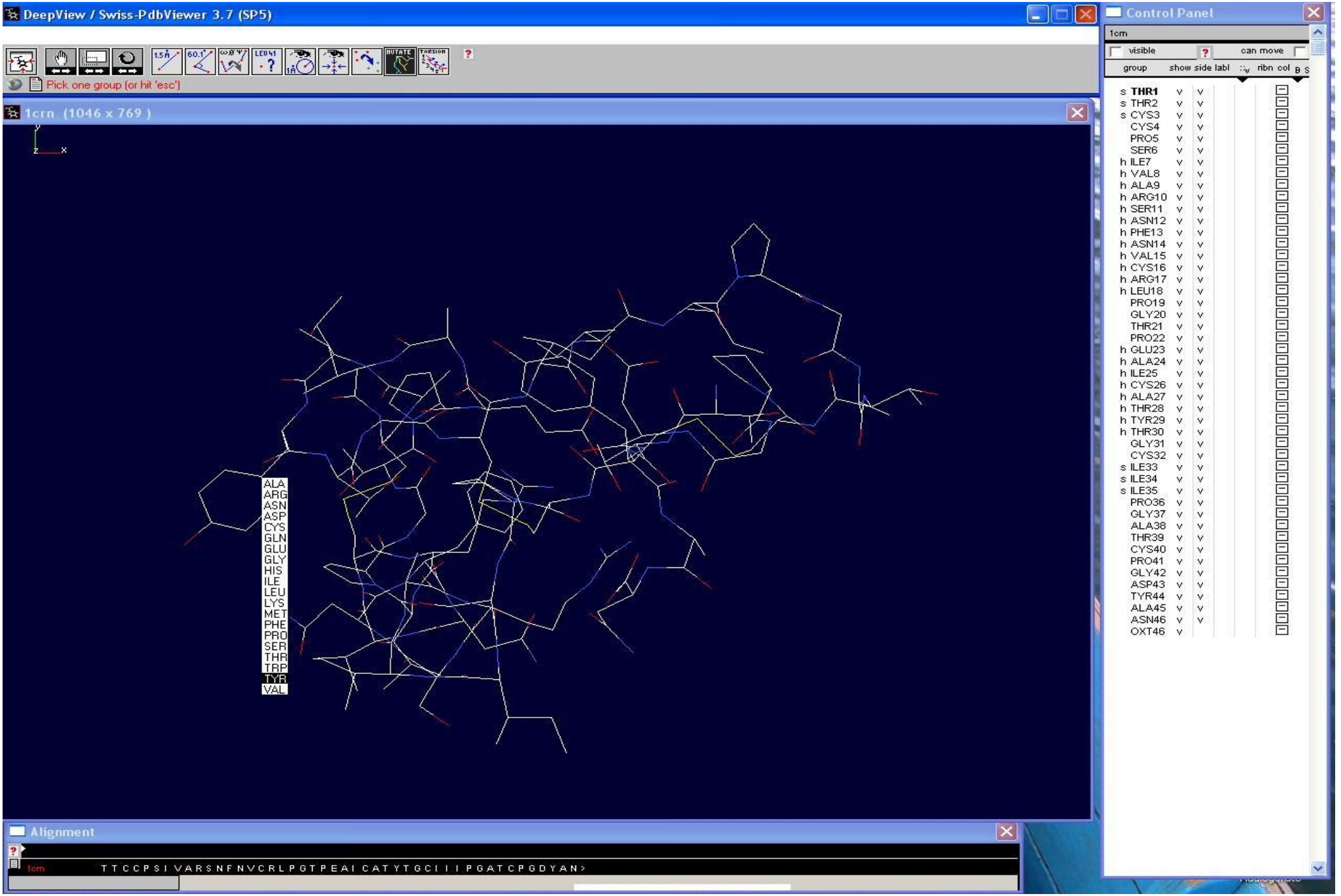
-einfache Point-and-Click Mutationen und Torsionen

-mit nur c.a. 4 mb Festplattenbedarf und (falls nicht anders eingestellt) simplem Rendering sehr sparsam

SwissView Gui



SwissView Gui



Chimera

-entwickelt vom Computer Graphics Laboratory der University of California

-verfügbar für Mac, Windows diverse Linux-Systeme

-Lizenz: Freeware

Features:

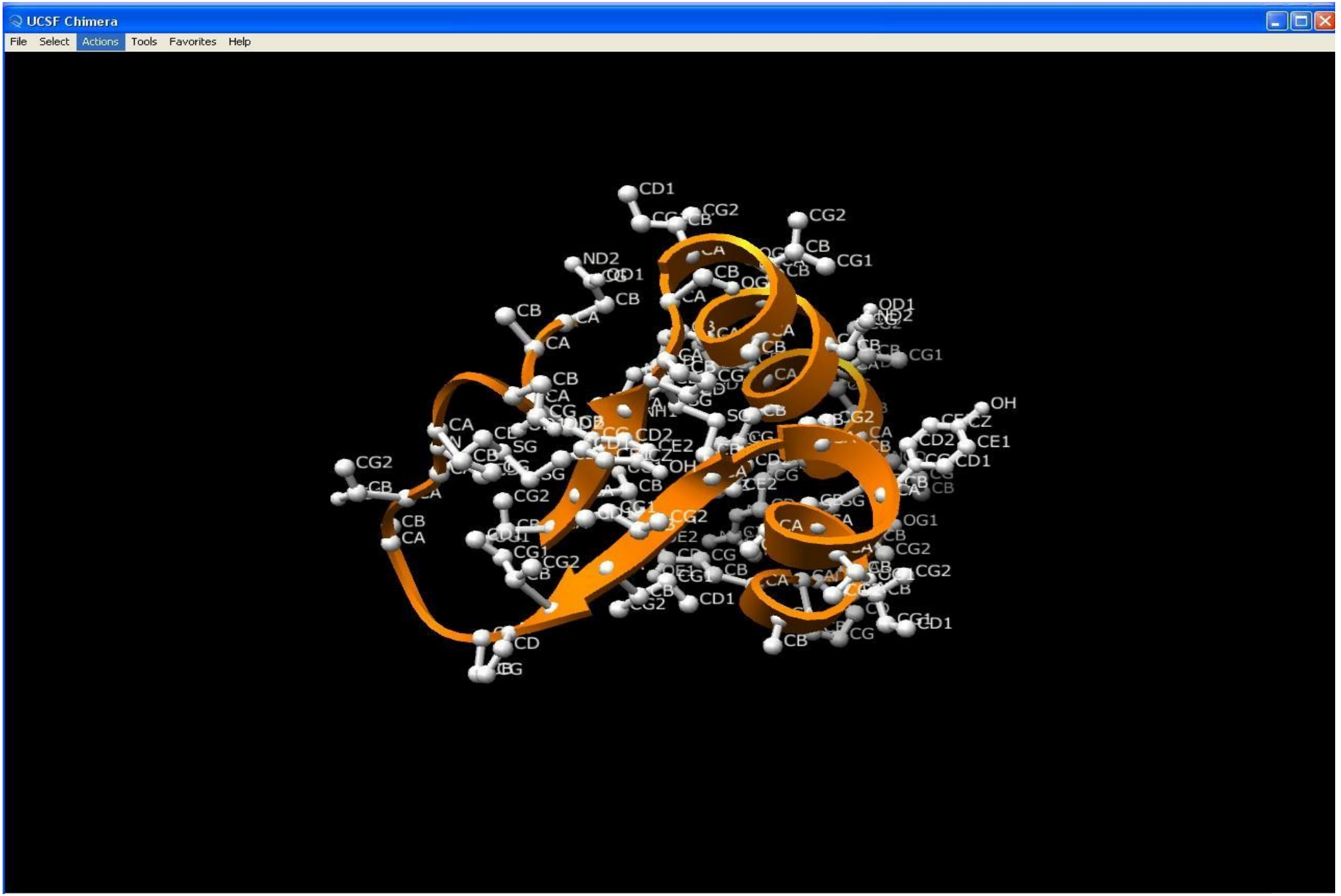
-das Design des Programms steht für Erweiterbarkeit.
Zusätzliche Features können bei Bedarf heruntergeladen
werden, z.B. Reader für neue Formate, Betrachtungsmodi usw

-kann über die Collaboratory-Erweiterung auch eine gemeinsame
Session mit mehreren Usern über eine Netzwerkverbindung betreiben

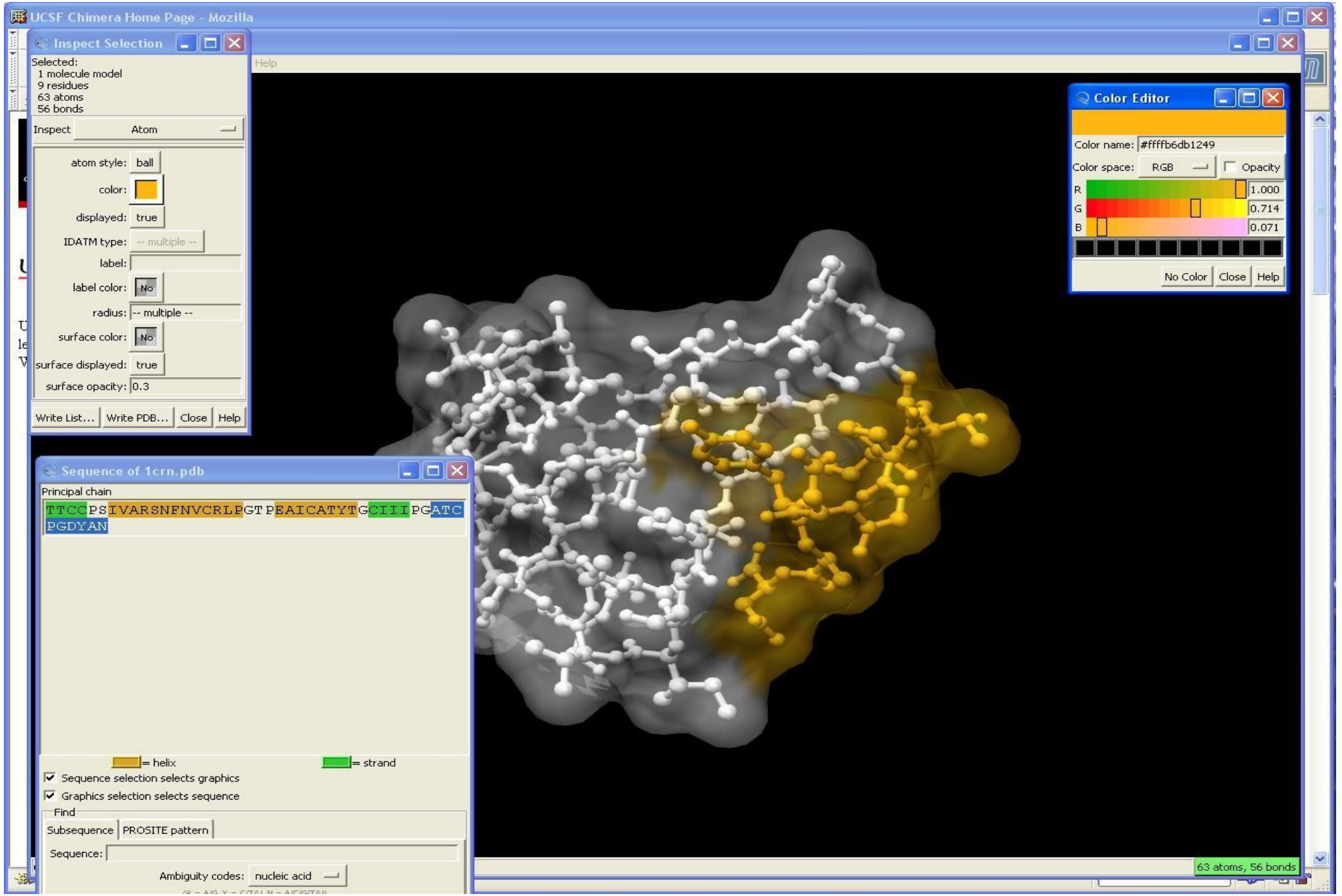
-viele Effekte und Optionen zur Visualisierung

-Demos

Chimera Gui



Chimera Gui


UCSF Chimera Home Page - Mozilla
Inspect Selection
Selected:
1 molecule model
9 residues
63 atoms
56 bonds
Inspect Atom
atom style: ball
color:
displayed: true
IDATM type: -- multiple --
label:
label color: No
radius: -- multiple --
surface color: No
surface displayed: true
surface opacity: 0.3
Write List... Write PDB... Close Help
Help
Color Editor
Color name: #ffffb6db1249
Color space: RGB Opacity
R 1.000
G 0.714
B 0.071
No Color Close Help
Sequence of 1crn.pdb
Principal chain
TTCCPSIVARSNFNVCRLPGTPEAICATYTGCIIIPGATC
PGDYAN
= helix
= strand
Sequence selection selects graphics
Graphics selection selects sequence
Find
Subsequence PROSITE pattern
Sequence:
Ambiguity codes: nucleic acid
63 atoms, 56 bonds

ICM - Browser

-entwickelt von Molsoft

-verfügbar für Mac, Windows, Linux, SGI

-Lizenz: Freeware

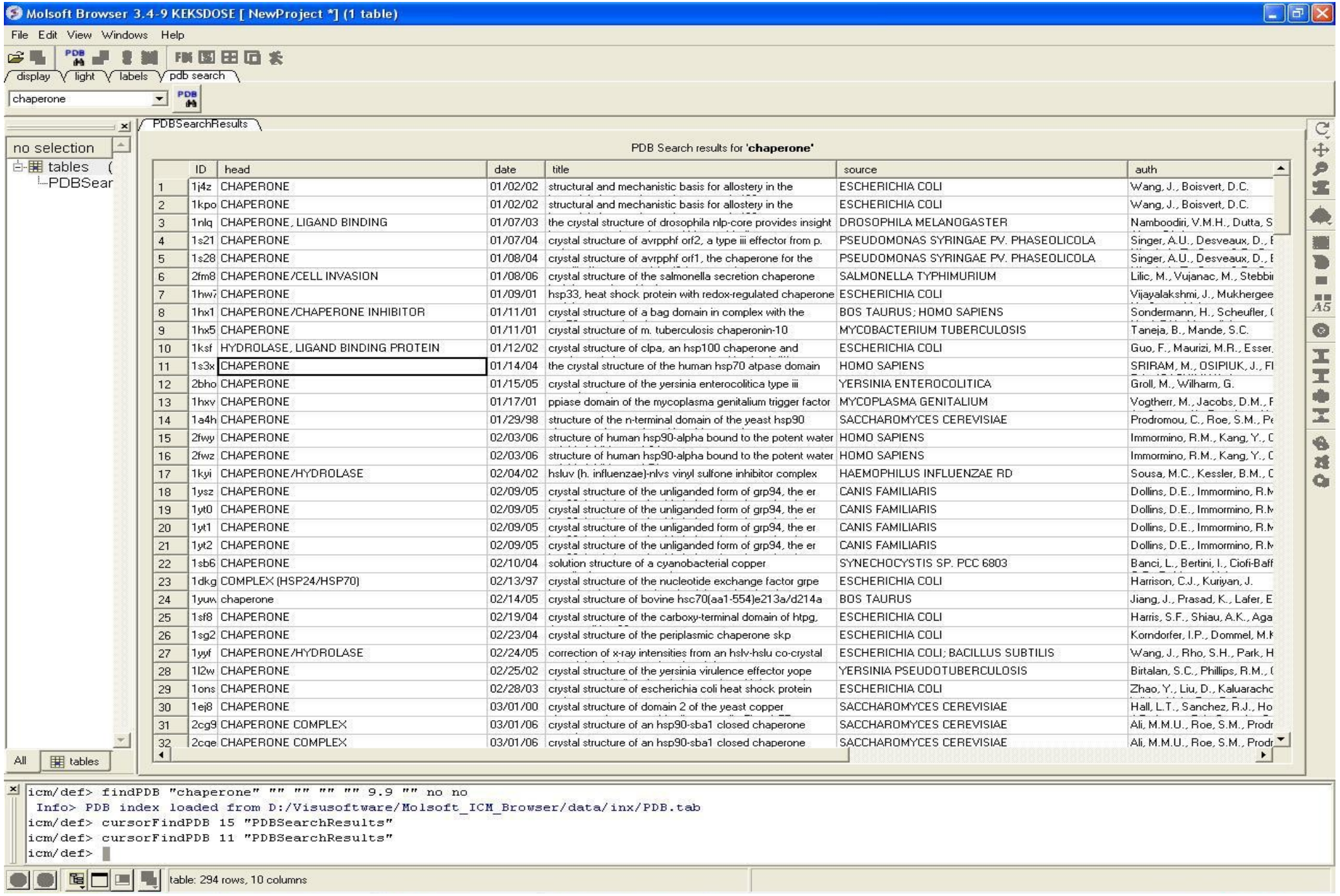
Features:

-interne Funktion zum Durchsuchen der zentralen Proteindatenbank.
Gefundene Proteine können ausgewählt und sofort dargestellt werden,
ohne dass ein manuelles Herunterladen erforderlich ist.

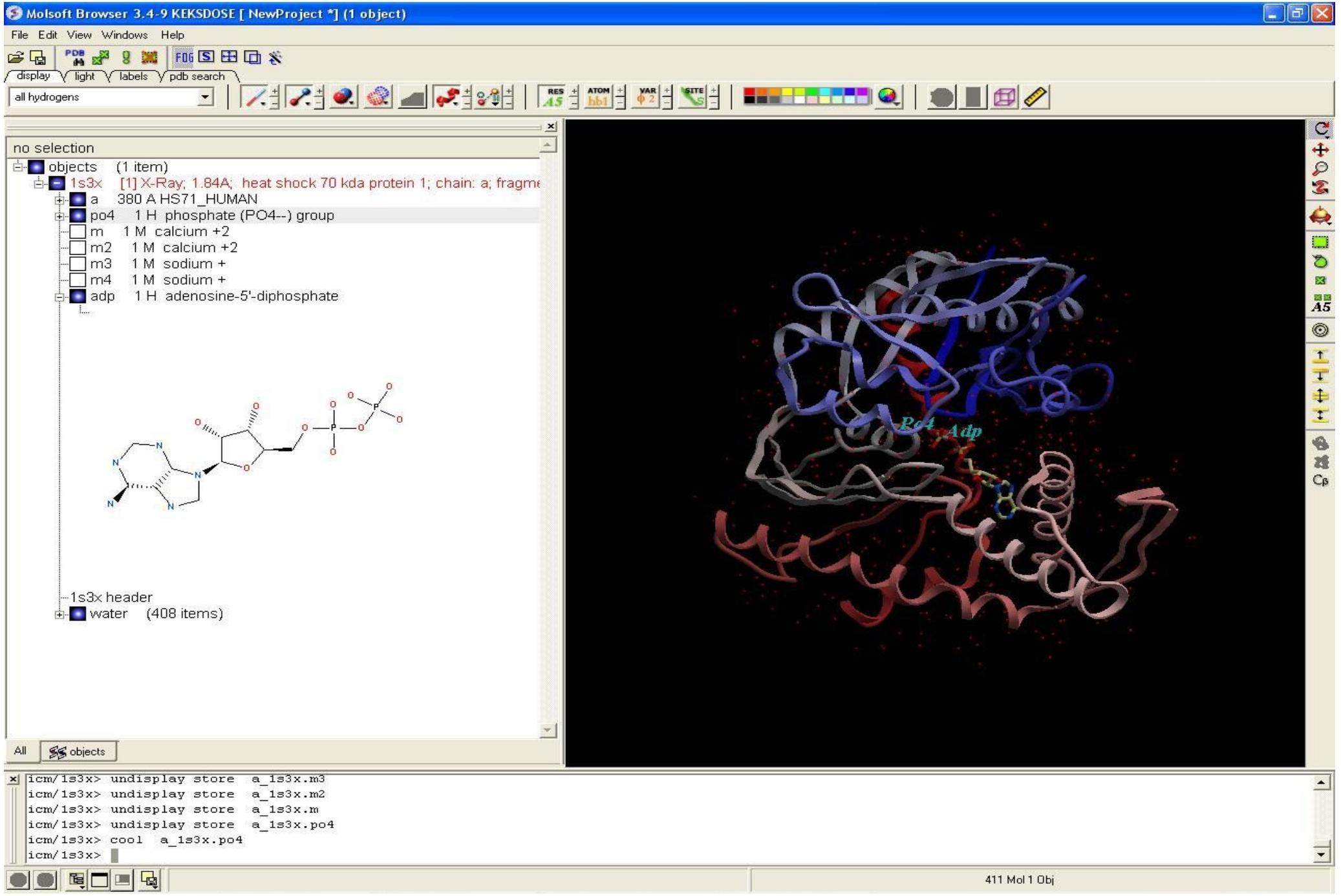
-ebenfalls sehr umfangreiche Visualisierungen und Effekte

-sehr intuitiv bedienbar

ICM – Browser Gui



ICM – Browser Gui



JMol

-verfügbar für Mac, Windows, Linux bzw. überall, wo Java läuft

-Lizenz: Open Source

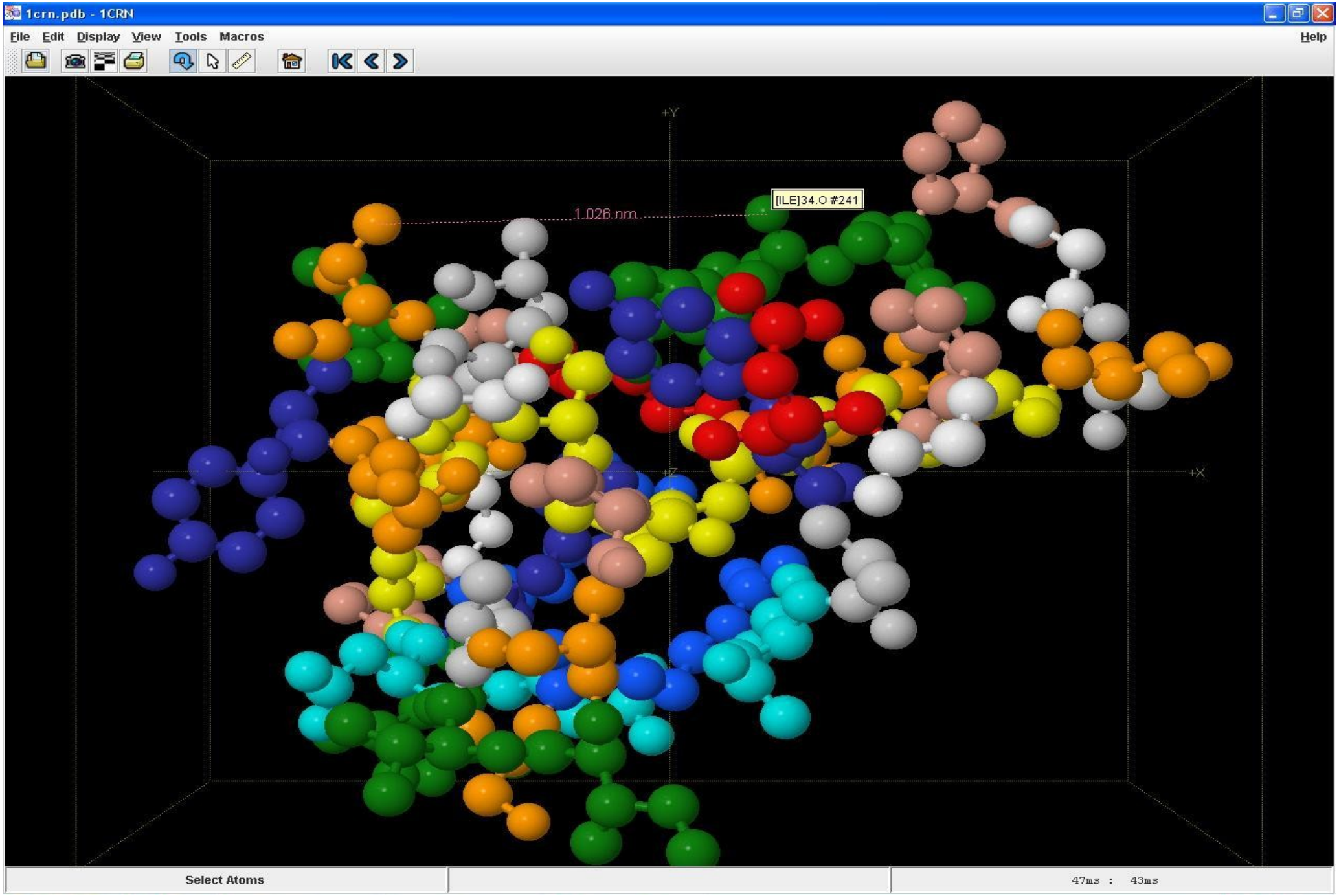
Features:

-dank eigener Software-Engine ist JMol hardwareunabhängig
und läuft bereits auf 1.1 Java Runtimes

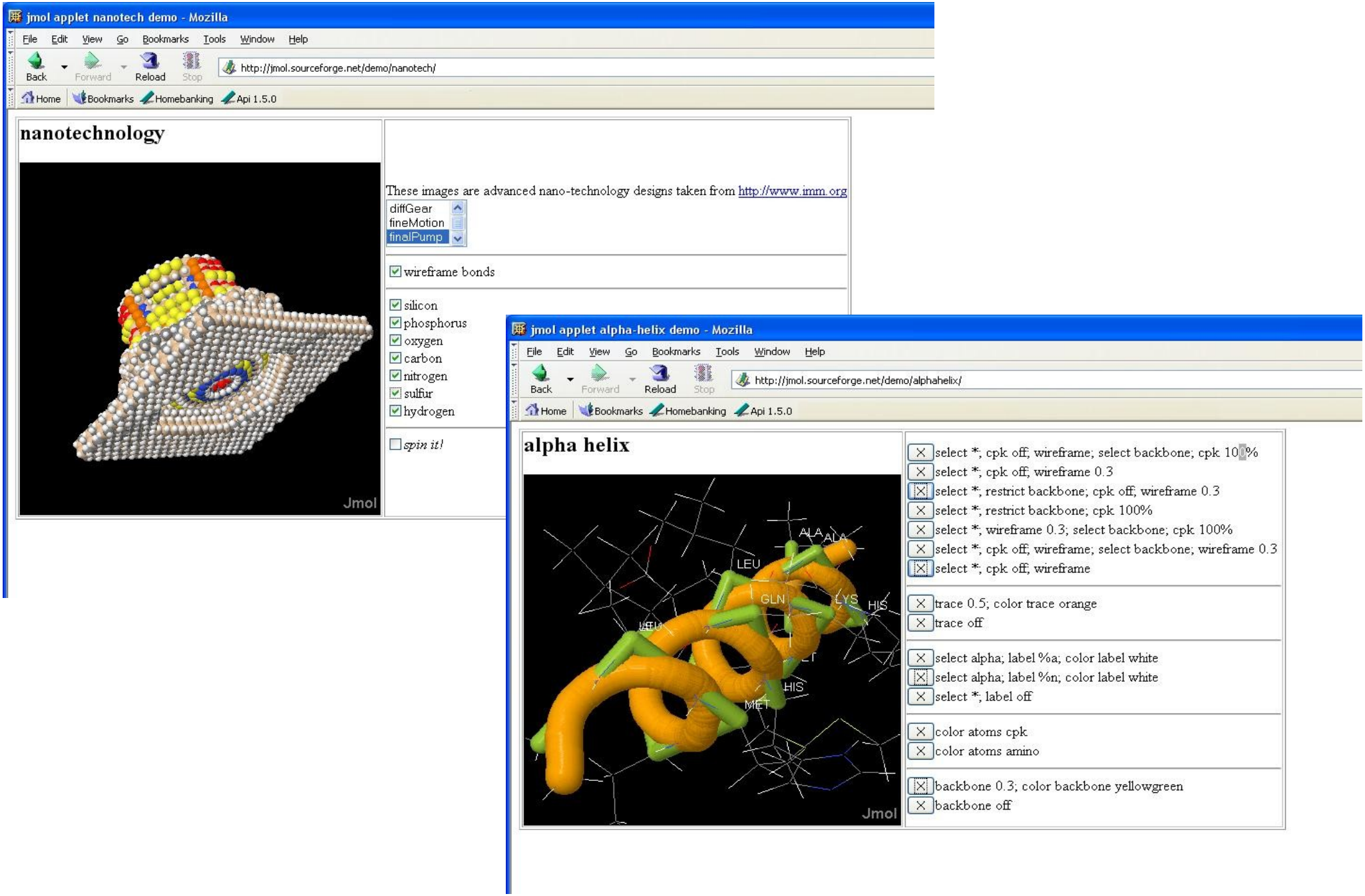
-erhältlich als Java Paket (JMol Viewer) zur Integration in eigene
Projekte.
Die darauf basierende JMol Applikation läuft standalone.

-sehr simpel gehalten standardmäßig, was besonders bei Browser Applets
sinnvoll ist

JMol Standalone Gui



JMol - Applet im Browser



Amira

-entwickelt vom Zentrum für Informationstechnik Berlin (ZIB) sowie Mercury Computer Systems

-verfügbar für Mac, Windows, Linux, SGI, Sun Solaris und HP-UX

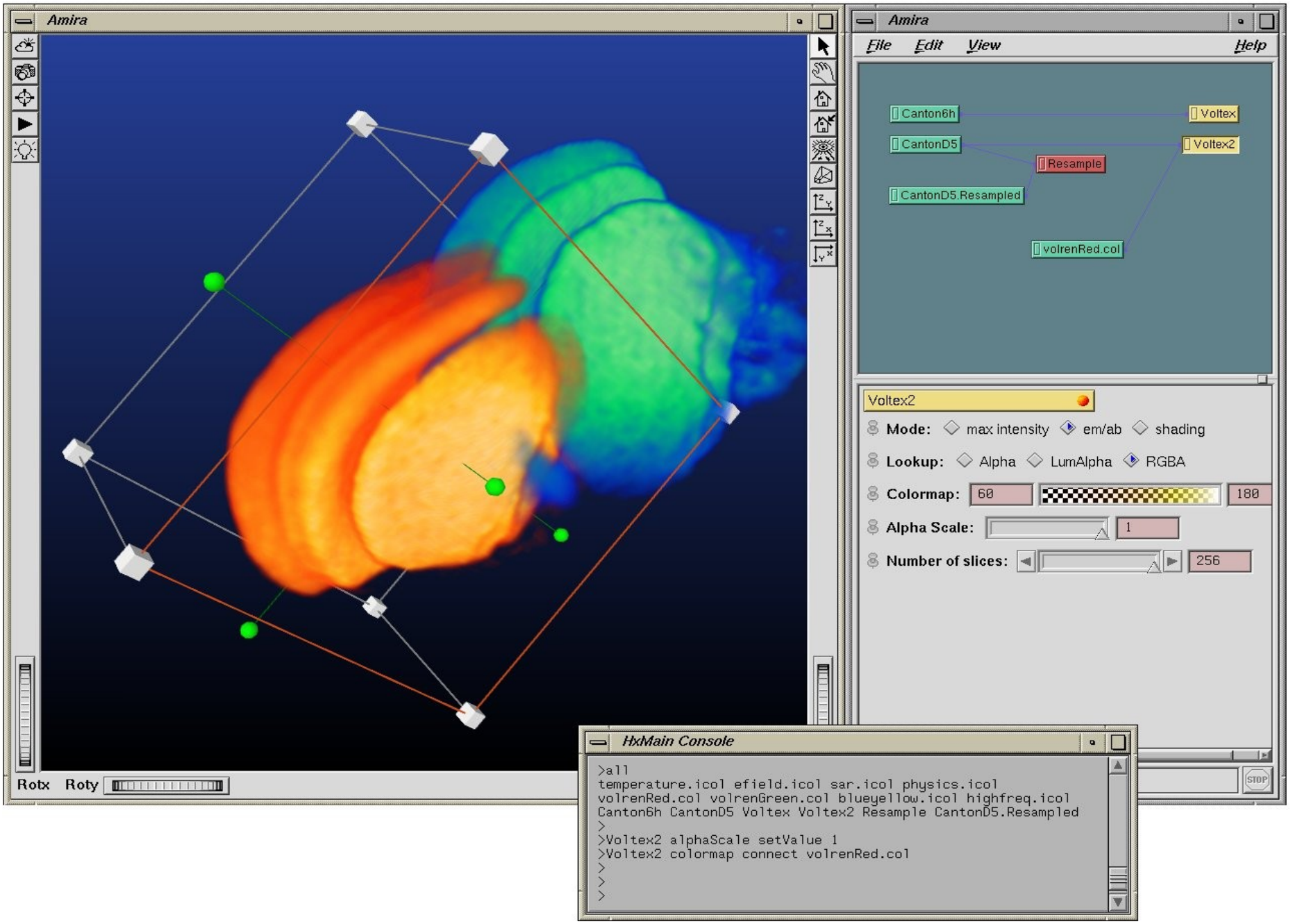
-Lizenz: kostenpflichtig

Features:

-modularer Aufbau : Programmfeatures können für jede Präsentation individuell zusammengestellt werden

-Schematisches Handling von Datenobjekten und Programmmodulen und deren Beziehungen untereinander

Amira - Gui


Amira
Amira
File
Edit
View
Help
Canton6h
CantonD5
CantonD5.Resampled
Resample
volrenRed.col
Voltex
Voltex2
Voltex2
Mode:
max intensity
em/ab
shading
Lookup:
Alpha
LumAlpha
RGBA
Colormap:
60
180
Alpha Scale:
1
Number of slices:
256
STOP
Rotx
Roty
HxMain Console
>all
temperature.icol efield.icol sar.icol physics.icol
volrenRed.col volrenGreen.col blueyellow.icol highfreq.icol
Canton6h CantonD5 Voltex Voltex2 Resample CantonD5.Resampled
>
>Voltex2 alphaScale setValue 1
>Voltex2 colormap connect volrenRed.col
>
>
>

Quellen

SwissView : www.expasy.org/spdbv/mainpage.htm
Chimera : www.cgl.ucsf.edu/chimera/
ICM – Browser : www.molsoft.com/icm_browser.html
JMol : jmol.sourceforge.net
Amira : www.amiravis.com