


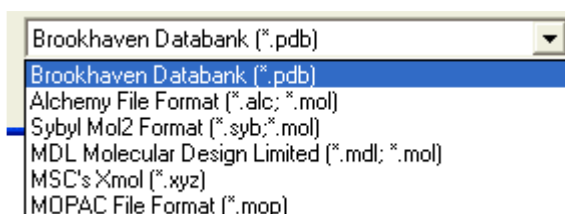
**IMPORTANTE:** Non saltare nessun passaggio. Procedi al passo successivo solo quando compare il semaforo verde in corrispondenza del passaggio precedente 

## Sezione 1 – Carica Molecola

### Passaggio A – Carica e Anteprima



Clicca sul pulsante on “**1 carica**” per caricare un file contenente le coordinate molecolari. È possibile caricare files in uno dei seguenti formati:



**SweetMollyGrace** usa **Babel** per tradurre il file caricato nel formato PDB (Protein Brookhaven Databank). Viene generato un file nominato *SMGfile.pdb*.

Generalmente Babel produce files PDB corretti. Per questo motivo SweetMollyGrace usa Babel anche per trasformare files PDB in PDB. Tuttavia se Babel non riesce ad effettuare correttamente la trasformazione da PDB a PDB, è possibile selezionare l'opzione “**Skip Babel**” (in questo caso il file PDB viene caricato così com'è senza la conversione da parte di Babel).

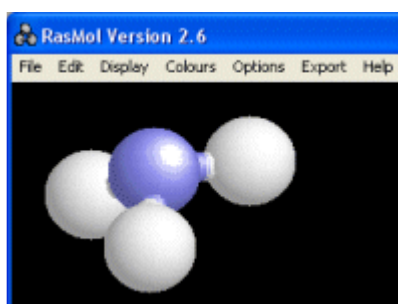


E' ora possibile vedere un'anteprima del file caricato

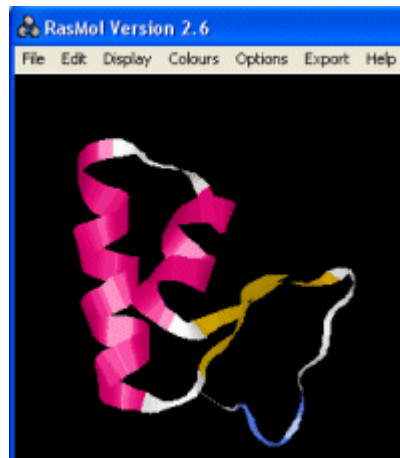


**SweetMollyGrace** usa **Rasmol** per visualizzare il file PDB.

Se la molecola non è una proteina, **Rasmol** la visualizza in formato *Ball & Stick*.



Se la molecola è una proteina, **Rasmol** ne visualizza la struttura secondaria in formato *Ribbons*.



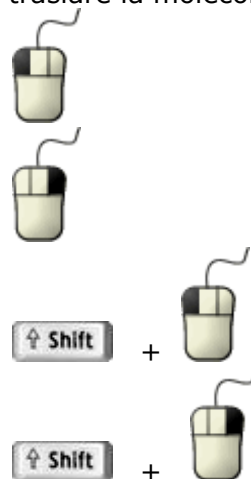
In **Rasmol** è possibile ruotare, ridimensionare e traslare la molecola usando il mouse:

- Rotazione: click\_sinistro

- Traslazione: click\_destro

- Zoom: shift+ click\_sinistro

- Rotazione Z: shift+ click\_destro



## Passaggio B – Aspetto e Orientazione

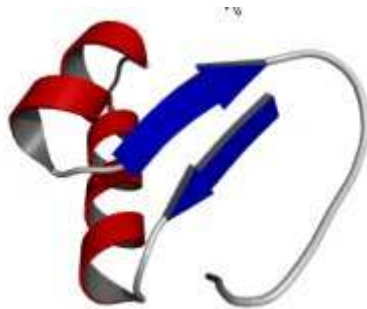
Qui è possibile definire l'orientazione e l'aspetto della molecola per le successive operazioni di rendering che verranno effettuate con i programmi di raytracing (Povray and Raster3D)

- **PROTEINA** – Se è stata caricata una proteina sono disponibili tutte le opzioni, ad eccezione di CPK.

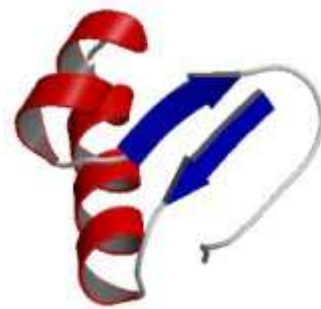


In genere per una proteina le opzioni migliori sono  
Aspetto: "Eliche" o "Cilindri"  
Colori: "Struttura"

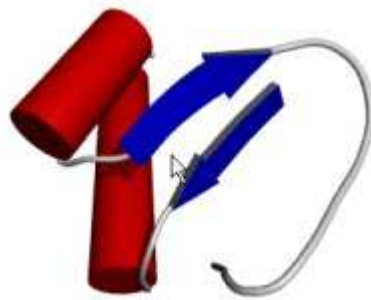
**Esempi:**



Eliche (Povray)



Eliche (Raster3D)



Cilindri (Povray)



Cilindri (Raster3D)

- **NON PROTEINA** – Se la molecola non è una proteina non sono accessibili tutte le opzioni

B - Aspetto e Orientazione

Aspetto

☐ Eliche

☐ Cilindri

☒ Sfere Bastoncini (BallStick)

☐ Bastoncini (Stick)

☐ Sfere piene (Spacefill)

☐ Thermal [VRML wireframe]

Colori

☐ Struttura ☐ Arcobaleno

☐ No colore ☒ CPK

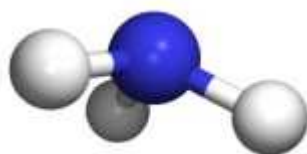
Ligando

☒ Ligando ☐ No ligando

Lo schema di colore **CPK** è basato sui colori dei popolari modelli molecolari sviluppati da Corey, Pauling e successivamente rielaborati da Koltun. Secondo questo schema ogni atomo presenta un colore caratteristico in relazione al tipo di elemento chimico a cui appartiene. Si tratta della convenzione cromatica normalmente utilizzata dai chimici.

C	H	O	N	S	P	Na	Mg	Ca	Zn	Cl	F	I	Li	He	all else
					Fe			Mn	Cu	B	Si				
					Ba			Cr	Ni		Ag				
								Al	Br						
								Ti	Ag						

## Esempi



Ball & Stick (Povray)



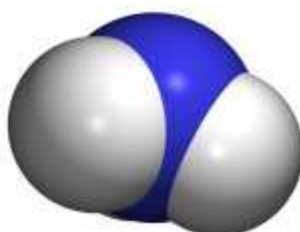
Ball & Stick (Raster3D)



Stick (Povray)



Stick (Raster3D)



Spacefill (Povray)



Spacefill (Raster3D)

E' possibile modificare il diametro dei legami e le dimensioni degli atomi (per la modalità ball & stick) ed il diametro dei bastoncini (per la modalità stick), cambiando i seguenti valori:

Raggio		
Legami	Atomi	Bastoncini
<input type="text" value="10"/>	<input type="text" value="25"/>	<input type="text" value="20"/>



Ball & Stick (Povray)  
(Legami = 15 Atomi = 20)



Stick (Povray)  
(Bastoncini = 10)

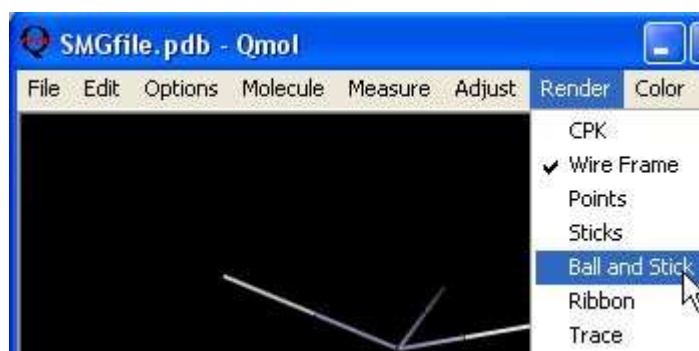
2 - Definisci Orientazione



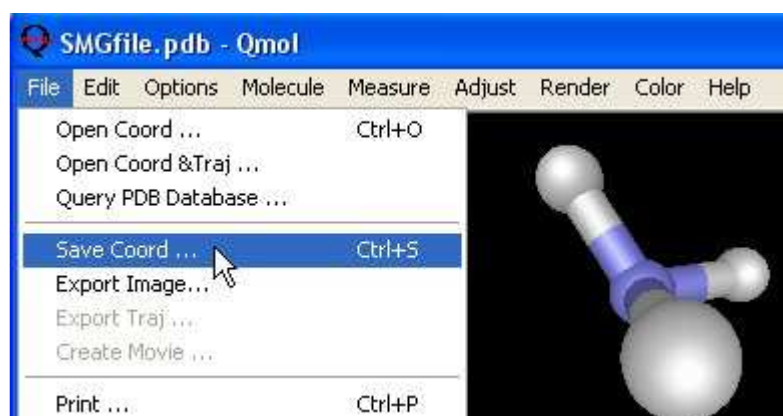
## Definisci Orientazione

Qui è possibile modificare l'orientazione e lo zoom della molecola. Il processo avviene con modalità diverse a seconda che la molecola sia o meno proteica.

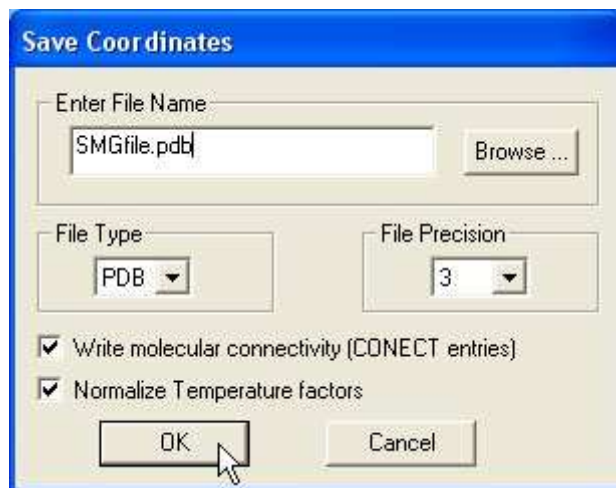
- **MOLECOLA NON PROTEICA** Se la molecola non è una proteina SweetMollyGrace usa **Qmol**. In questo caso è possibile modificare solo l'orientazione (non lo zoom). Ruotare la molecola tenendo premuto il pulsante sinistro del mouse. **Qmol** visualizza la molecola in modalità wireframe. È comunque possibile modificare la modalità di visualizzazione selezionandone una diversa dal "Render" di Qmol (questa operazione non ha comunque effetti sul successivo processo di rendering)



Una volta ottenuta l'orientazione desiderata, selezionare "Save Coord.." dal menu "File"



e salvare il file come '**SMGfile.pdb**'




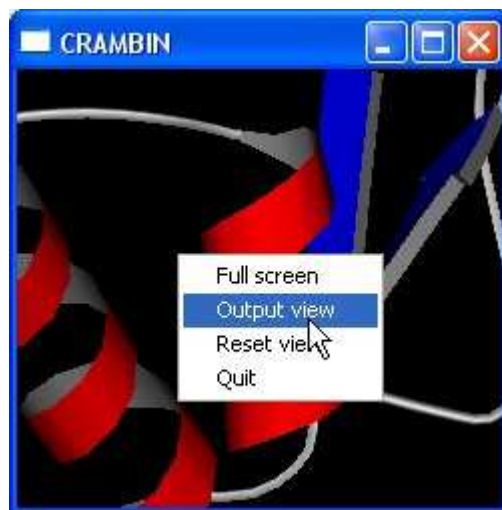
E' ora possibile chiudere **Qmol**.


- **MOLECOLA PROTEICA** Se la molecola è una proteina, SweetMollyGrace usa **MolAuto** e **MolScript** (OpenGL). **MolScript** visualizza la proteina in modalità "Struttura secondaria", ma ciò non ha effetti sul modo in cui la molecola verrà visualizzata dopo il processo di rendering.



E' possibile ruotare la proteina trascinandola mentre si tiene premuto il pulsante sinistro del mouse e modificarne lo zoom sempre trascinandola e tenendo premuto il tasto Maiuscolo (Shift) + il pulsante sinistro del mouse (shift+click\_sinistro). Una volta

ottenuto l'aspetto desiderato è necessario salvarlo facendo un click\_destro  all'interno della finestra e selezionando il comando "**Output view**" nel menù che compare



Ora è possibile chiudere **MolScript**: click\_destra  sull'immagine e "**Quit**" dal menù che compare (oppure si preme il tasto ESC da tastiera)



**Ricorda:** Non uscire da **MolScript** in nessun altro modo!!

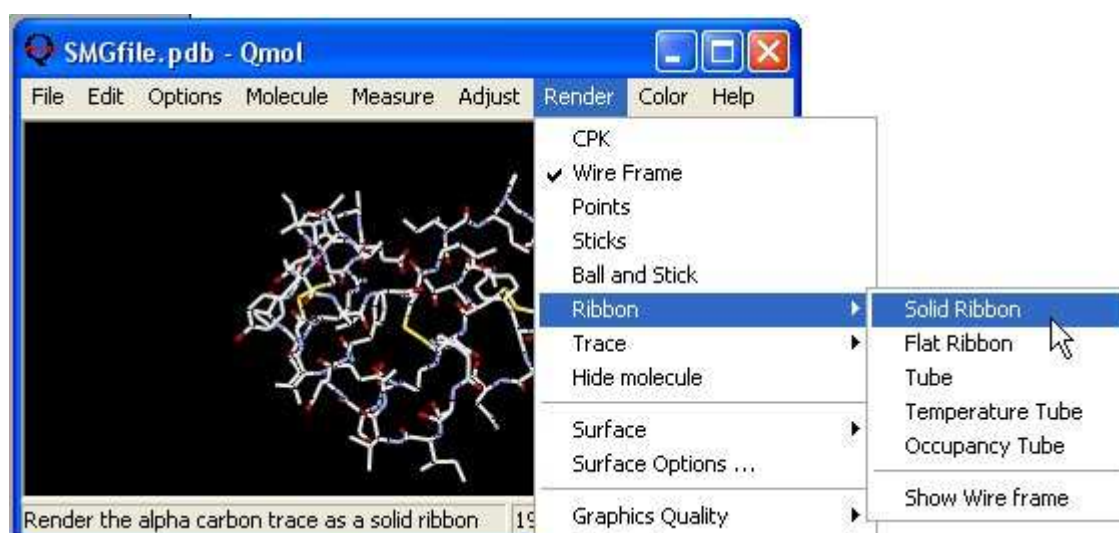
#### NOTA:

Se **MolScript** non è in grado di caricare la proteina, selezionare '*Forza caricamento proteina*' e cliccare nuovamente 'Definisci Orientazione'. La proteina verrà caricata da **Qmol**. Salvando il file con Qmol le coordinate della molecola verranno riscritte e verrà ridefinito il centro di massa per una corretta rotazione della molecola durante l'animazione.

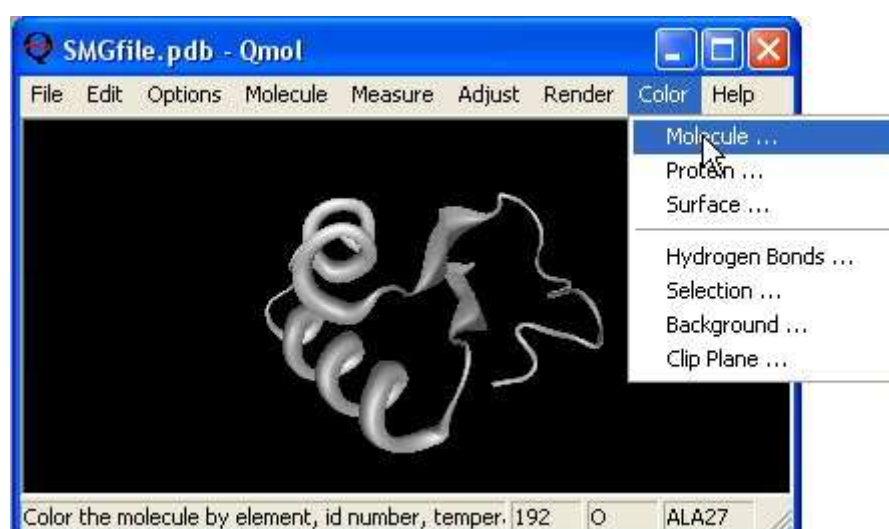


Se è stata selezionata l'opzione '*Forza caricamento proteina*' e si sta definendo orientazione e zoom della proteina con **Qmol**, può essere conveniente modificare la modalità di visualizzazione da "Wireframe" a "Ribbon". Selezionare "*Ribbon*" dal menù "*Render*" e cliccare "*Solid Ribbon*" o "*Flat Ribbon*".



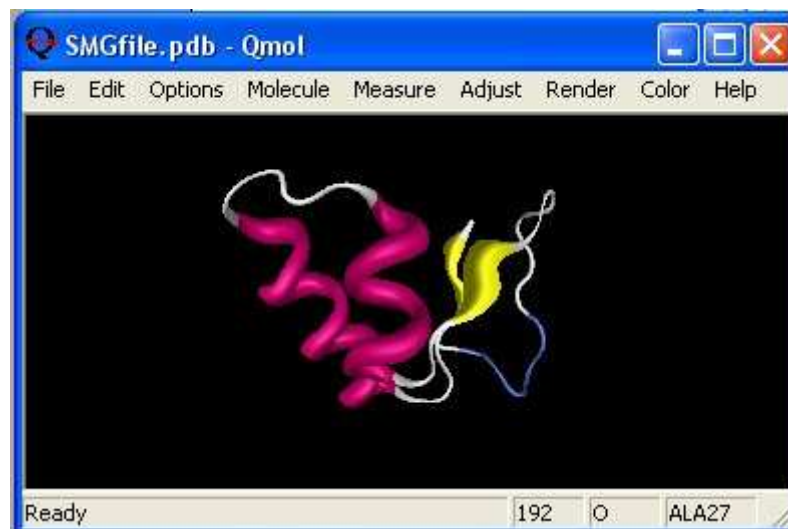
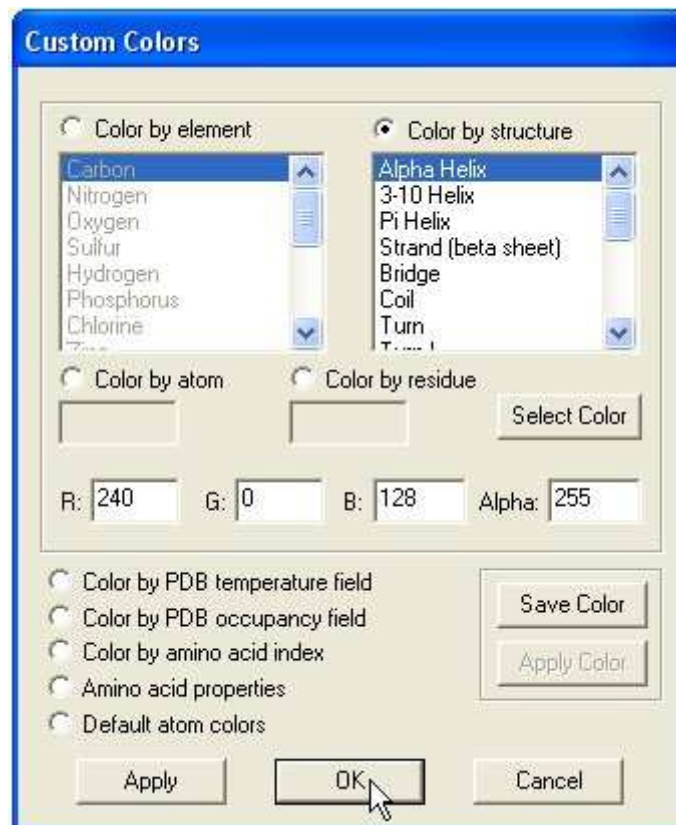


Per evidenziare le diverse strutture secondarie è possibile selezionare "Molecule..." dal menù "Color".

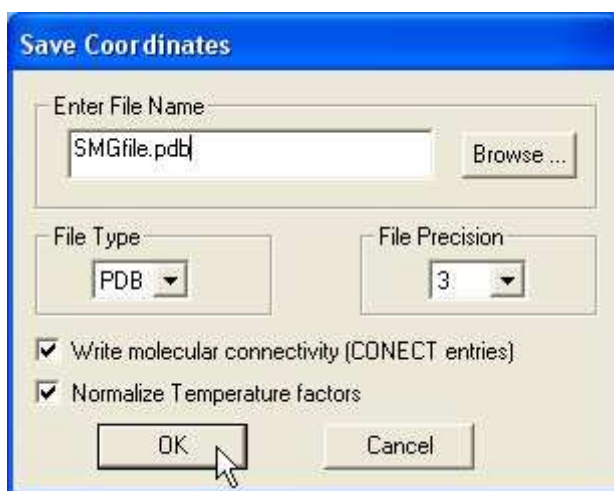


e quindi selezionare "Color by structure" e cliccare "OK"

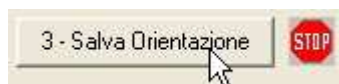




Una volta ottenuta l'orientazione desiderata, selezionare "Save Coord.." dal menu "File" e salvare il file come '**SMGfile.pdb**'

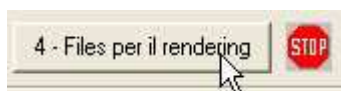


Ora è possibile chiudere **Qmol**.




### Salva Orientazione

Cliccare "*Salva Orientazione*" per salvare le scelte effettuate (Orientazione e zoom della molecola)



### Files per il Rendering

Cliccare "*Files per il rendering*" per generare i files che verranno processati da PovRay e Raster3D nella successiva sezione di "Raytracing".

Quando tutti i semafori verdi  della sezione "**Carica Molecola**" saranno accesi, sarà possibile passare alla sezione successiva. Clicca sul tab "RayTracing".

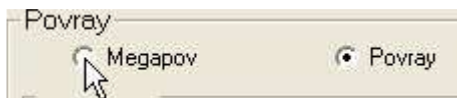


## Sezione 2 – RayTracing

In questa sezione è possibile modificare le dimensioni e le caratteristiche dell'immagine che verrà generata e, successivamente, effettuare il rendering.

### **A - Povray**

Di default l'immagine viene generata da **Povray**. Tuttavia se Povray non esegue correttamente il lavoro di rendering, è possibile riprovare, dopo aver selezionato **Megapov**, una versione non ufficiale di Povray, compatibile con le caratteristiche di Povray 3.5.



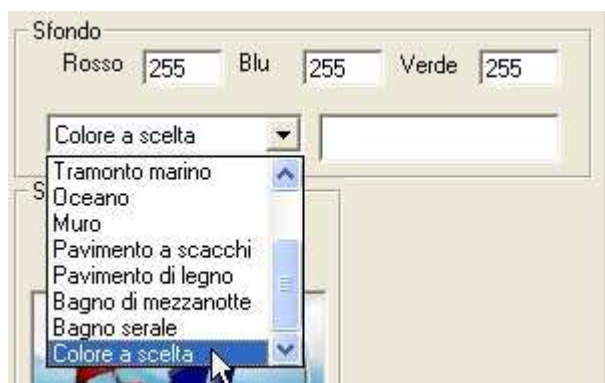
## Povray - Sfondo

Di default lo sfondo dell'immagine è nero. È tuttavia possibile modificare lo sfondo:

- Inserendo gli opportuni valori RGB (0-255)



- selezionando "Colore a scelta" dal menù



e selezionando il colore desiderato



- Selezionando uno sfondo predefinito tra quelli presenti



**Nota:** Questi settaggi hanno effetto anche sull'animazione di Povray

## Povray – Superficie della molecola

Selezionare dal menù il tipo di superficie per la molecola. Si tenga presente che superfici non standard (vetro, specchio etc) aumentano considerevolmente il tempo di rendering.



**Nota:** Questi settaggi hanno effetto anche sull'animazione di Povray

### Povray – Dimensione dell'immagine

Modificare le dimensioni dell'immagine inserendo i valori desiderati (in pixel). Si tenga presente che dimensioni maggiori dell'immagine aumentano il tempo di rendering.



**Nota:** Questi settaggi hanno effetto anche sull'animazione di Povray

### Povray – Creazione dell'immagine

Cliccare in successione i tre pulsanti di seguito visualizzati



Povray genera un'immagine TGA (SMGfile.tga) a 24 bit (16 milioni di colori). A questo punto è possibile visualizzare l'immagine generata cliccando il pulsante "Vedi". L'immagine verrà caricata da **Irfanview**



Sarà ora possibile usare **Irfanview** per salvare l'immagine in un altro formato. Selezionare "Save as" dal menù "File" e scegliere il formato grafico desiderato (GIF, JPEG, TIF etc).

Quindi chiudere **Irfanview**

## B – Raster3D

### Raster3D - Sfondo

Di default il colore di sfondo dell'immagine è nero. È possibile modificarlo:

- Inserendo gli opportuni valori RGB (0-255)



- cliccando il pulsante "Seleziona colore"



e scegliendo quindi il colore



**Nota:** Questi settaggi hanno effetto anche sull'animazione di Raster3D

### Raster3D – Colore e Superficie della molecola

Di default Raster3D usa lo schema CPK per le molecole non proteiche e visualizza con diversi colori la struttura secondaria delle molecole proteiche (rosso per le eliche; blu per i foglietti beta). È possibile cambiare il colore della superficie della molecola cliccando il pulsante "Custom"



e selezionando poi il colore desiderato



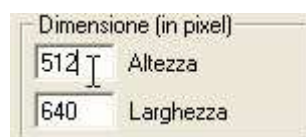
E' possibile ora modificare le caratteristiche di riflessione della superficie della molecola. Nel caso si selezioni "Trasparente", è anche possibile scegliere la percentuale di trasparenza.



**Nota:** Questi settaggi hanno effetto anche sull'animazione di Raster3D

### Raster3D – Dimensioni dell'immagine

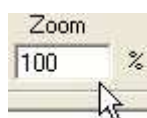
Modificare le dimensioni dell'immagine inserendo i valori desiderati (in pixel). Si tenga presente che dimensioni maggiori dell'immagine aumentano il tempo di rendering.



**Nota:** Questi settaggi hanno effetto anche sull'animazione di Raster3D

### Raster3D - Zoom

E' possibile modificare il livello di zoom



**Nota:** Questi settaggi hanno effetto anche sull'animazione di Raster3D


### Raster3D – Creazione dell'immagine

Cliccare in successione i tre pulsanti di seguito visualizzati



Raster3D genera un'immagine TIF (SMGfile.tif) a 24 bit (16 milioni di colori). A questo punto è possibile visualizzare l'immagine generata cliccando il pulsante "Vedi". L'immagine verrà caricata da **Irfanview**

Sarà ora possibile usare **Irfanview** per salvare l'immagine in un altro formato. Selezionare "Save as" dal menù "File" e scegliere il formato grafico desiderato (GIF, JPEG, TGA etc).

Quando tutti i semafori verdi  della sezione "**Raytracing**" saranno accesi, sarà possibile passare alla sezione successiva. Clicca sul tab "Animazione"



**Nota:** Se sono accesi solo i semafori verdi di Povray, sarà possibile creare solo l'animazione di Povray e non di Raster3D. E viceversa.

## Sezione 3 – Animazione

SweetMollyGrace permette di generare animazioni in 5 differenti formati: AVI, MPEG, MOV, GIF, FLIC.

Prima di creare le animazioni è consigliabile scegliere le opzioni di animazione.

### **Opzioni di animazione – Numero di frames e Framerate**

Il Numero di frames (fotogrammi) determina la dimensione finale del file. Più numerosi sono i fotogrammi di un'animazione e maggiore sarà la dimensione del file (in kBytes).

Il Framerate è la frequenza dei fotogrammi, cioè il numero di immagini per secondo (fps = frames per second). Dato un certo numero di frames, l'animazione risulterà più veloce e fluida con framerate elevati, mentre risulterà lenta con framerate bassi.

Un framerate inferiore a 12 fps produce animazioni "a scatti".

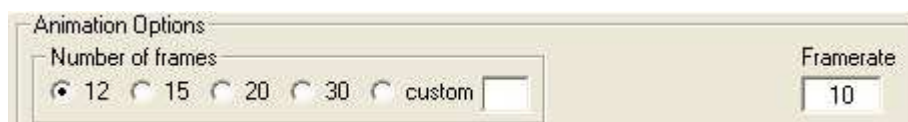
Il numero di frames assieme al framerate determina la lunghezza dell'animazione. La durata in secondi è uguale al numero di frames diviso per il framerate.

Molecole di dimensioni maggiori necessitano che il valore del rapporto frames/framerate sia più elevato (maggior durata in secondi) rispetto a quanto avviene per molecole piccole.

In prima approssimazione possono essere utilizzati i seguenti valori:

Molecole piccole → 15 frames / 12 fps = 1.25 second

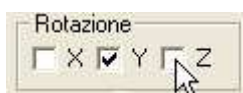
Molecole grandi → 30 frames / 15 fps = 2.0 seconds



Quando viene selezionato il numero di fotogrammi (frames), SweetMollyGrace calcola un appropriato valore di framerate. È tuttavia possibile modificare il valore proposto dal programma.

### **Opzioni di animazione – Rotazione attorno agli assi**

SweetMollyGrace permette di generare solo animazioni per rotazione. È possibile selezionare l'asse intorno al quale avverrà la rotazione. Sono tuttavia possibili rotazioni complesse selezionando più di un asse di rotazione.





## Opzioni di animazione – MPEG

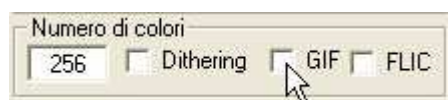
L'animazione MPEG può essere generata in due modi: convertendo direttamente singole immagini (frames) o convertendo l'animazione AVI già generata in MPEG.

- Se si seleziona 'Frames' è possibile utilizzare qualsiasi valore di framerate, ma la dimensione di ciascun frame non può essere superiore a 512x320 pixel.
- Se si seleziona 'AVI' è possibile utilizzare solo 10, 12, 15, 24, 25, 30 framerate, ma è possibile modificare il bitrate dell'animazione MPEG. Bitrate elevati generano file più grandi, ma aumentano la qualità dell'animazione



## Opzioni di animazione – Numero di colori per animazioni GIF e FLIC

Il numero di colori può essere modificato solo per le animazioni GIF e FLIC.. Di default il formato FLIC usa 16 milioni di colori (24 bit), mentre il formato GIF usa 256 colori (8 bit). È possibile diminuire il numero di colori in modo da rendere il file più leggero.



Se viene selezionata solo l'opzione "GIF" o solo l'opzione "FLIC" verrà diminuito solo il numero di colori della relativa animazione.

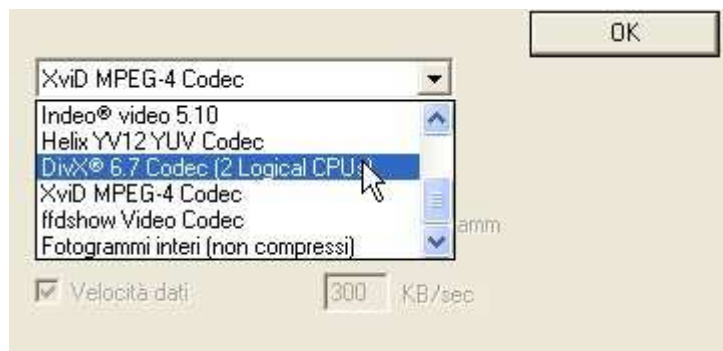
Selezionando l'opzione 'dithering' si ottiene una qualità migliore anche con un minor numero di colori, riuscendo così a diminuire sensibilmente le dimensioni finali dei file.

## POVRAY Animazione


Per generare l'animazione Povray cliccare in successione i sei pulsanti di seguito visualizzati



Quando viene cliccato il pulsante "AVI GIF FLIC" compare una finestra in cui selezionare il codec per la compressione AVI.



I codec presenti sono quelli installati nel proprio computer. Se non viene selezionato alcun codec viene generato un file AVI non compresso di grosse dimensioni.

Quando tutti i semafori verdi  della sezione **"Animazione Povray"** saranno accesi, sarà possibile visualizzare le animazioni generate da Povray. Se non è già selezionato, selezionare "Povray" e cliccare sul pulsante relativo al formato di animazione desiderato.



### RASMOL Animazione

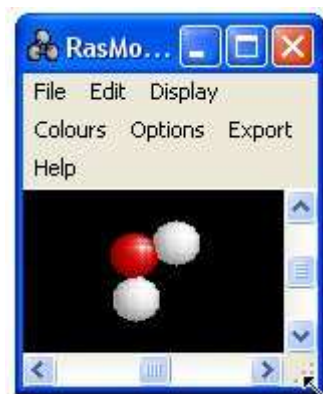
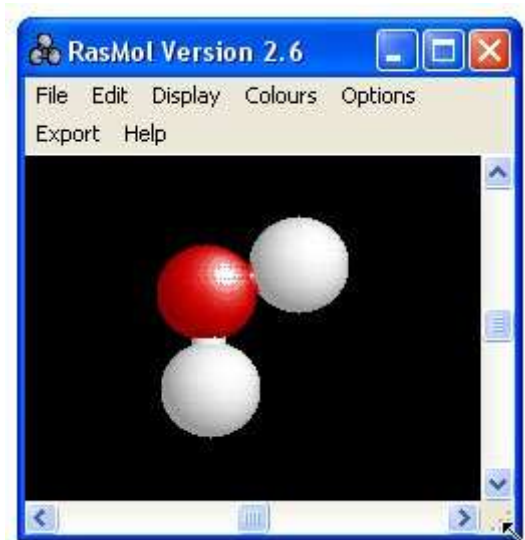
Per generare l'animazione Rasmol cliccare in successione i sei pulsanti di seguito visualizzati



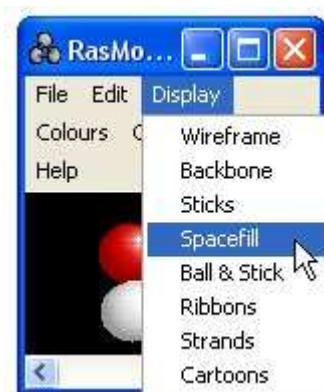
Quando viene cliccato il pulsante "Sfondo" sarà possibile selezionare il colore dello sfondo per l'animazione Rasmol.

Quando viene cliccato il pulsante "Rasmol", la molecola viene caricata da **Rasmol**. A questo punto è necessario:

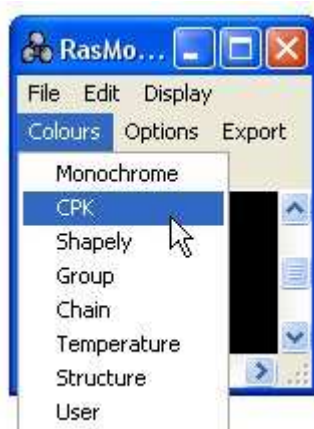
- Regolare le dimensioni dell'animazione ridimensionando la finestra di Rasmol.



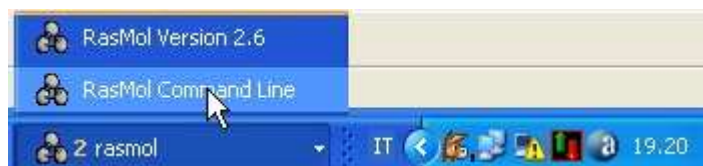
- Regolare lo zoom della molecola (shift-click\_sinistro).
- Modificare la modalità di visualizzazione selezionando le opzioni desiderate nel menù 'Display' di Rasmol.



- Modificare i colori selezionando le opzioni desiderate nel menù "Colours" di Rasmol.



- Aprire la "Finestra a linea di comando" di Rasmol (minimizzata nella Start bar di Windows)



ed immettere le seguenti stringhe di testo dopo il prompt **Rasmol>**:


**set write true**  
**script anim**

(Premere il tasto *Enter* dopo ciascuna stringa)



La molecola dovrebbe ruotare all'interno della finestra principale di rasmol e contemporaneamente dovrebbero venir generate le singole immagini (frames) per. Ora è possibile chiudere **Rasmol** e cliccare sui pulsanti successivi.

Quando viene cliccato il pulsante "AVI GIF FLIC" compare una finestra in cui selezionare il codec per la compressione AVI. I codec presenti sono quelli installati nel proprio computer. Se non viene selezionato alcun codec viene generato un file AVI non compresso di grosse dimensioni.

Quando tutti i semafori verdi  della sezione "**Animazione Rasmol**" saranno accesi, sarà possibile visualizzare le animazioni generate. Se non è già selezionato, selezionare "Rasmol" e cliccare sul pulsante relativo al formato di animazione desiderato.



## QMOL Animazione

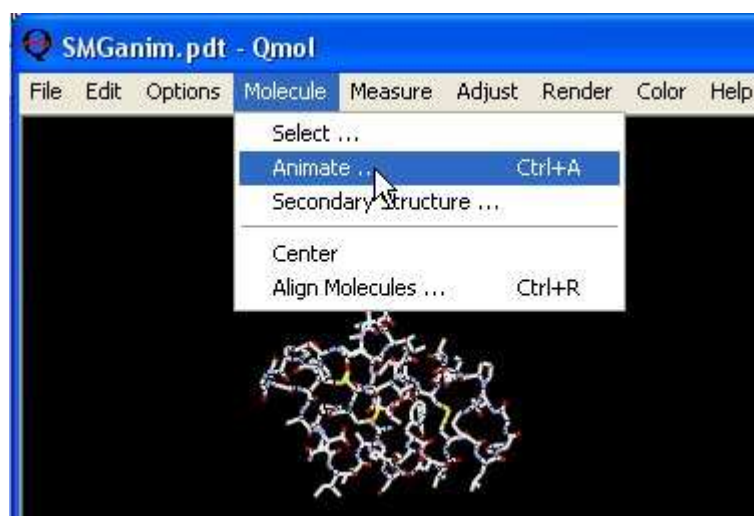
Per generare l'animazione Qmol cliccare in successione i sei pulsanti di seguito visualizzati



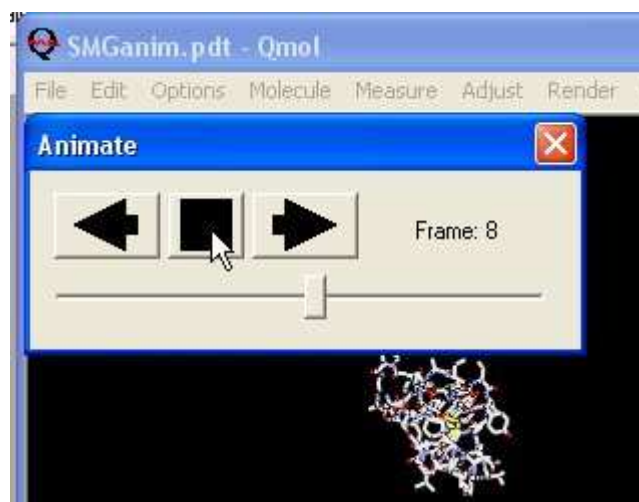
Quando viene cliccato il pulsante "PDB multiplo" SweetMollyGrace genera un file PDB multiplo (SMGanim.pdt). QMol è in grado di interpretare questo file come una traiettoria.

Quando viene cliccato il pulsante "Qmol", **Qmol** carica il file PDB multiplo.

- In **QMol**, selezionare "Animate.." dal menù "Molecule".



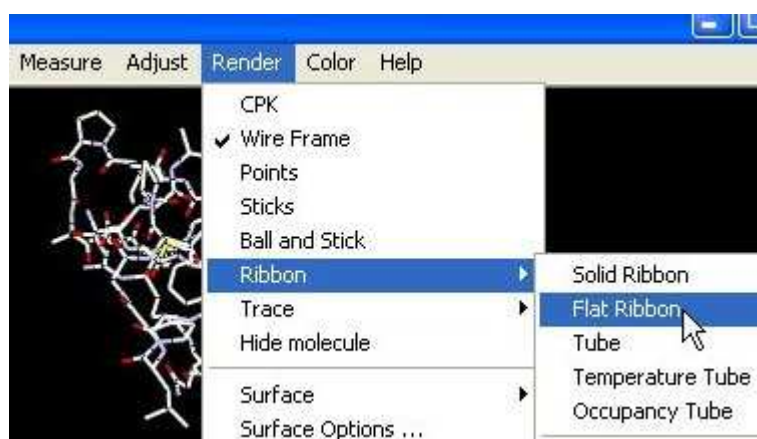
Cliccare il pulsante 'Stop' (■) nella finestra Animate

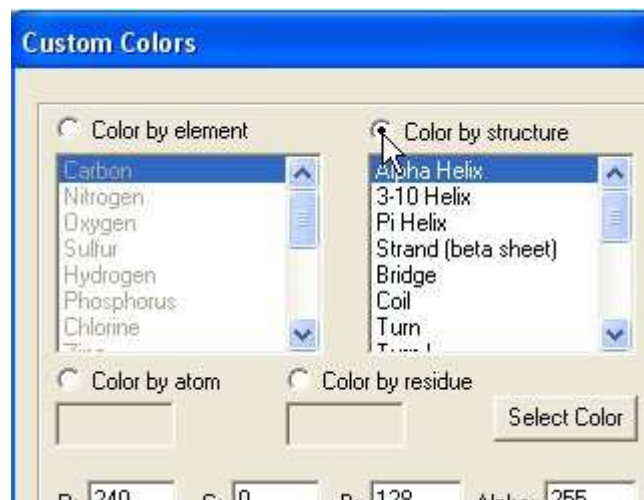
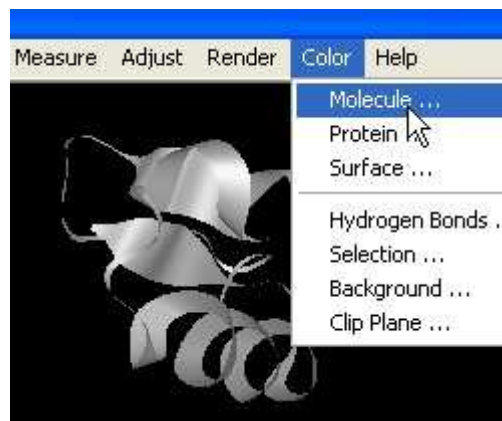


Dopo aver fermato l'animazione, chiudere la finestra Animate



- Modificare nel modo desiderato l'aspetto della molecola selezionando le relative opzioni nei menù 'Render' e 'Color' di Qmol.





- Modificare le dimensioni dell'animazione, ridimensionando la finestra di Qmol.

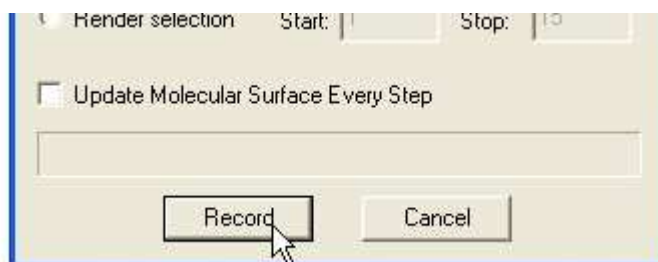
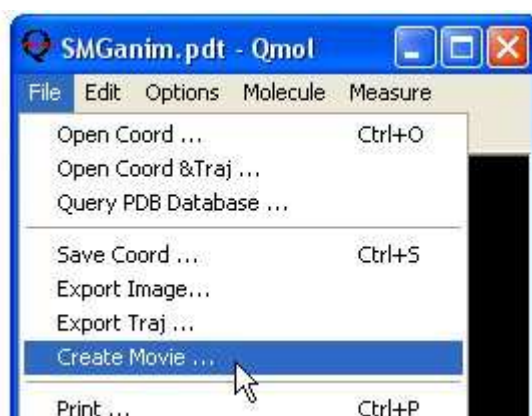


- Regolare il livello di zoom (click\_destro muovendo il mouse sopra la molecola).





- Selezionare 'Create Movie..' dal menù 'File' e salvare l'animazione come '**Qmol.avi**'.



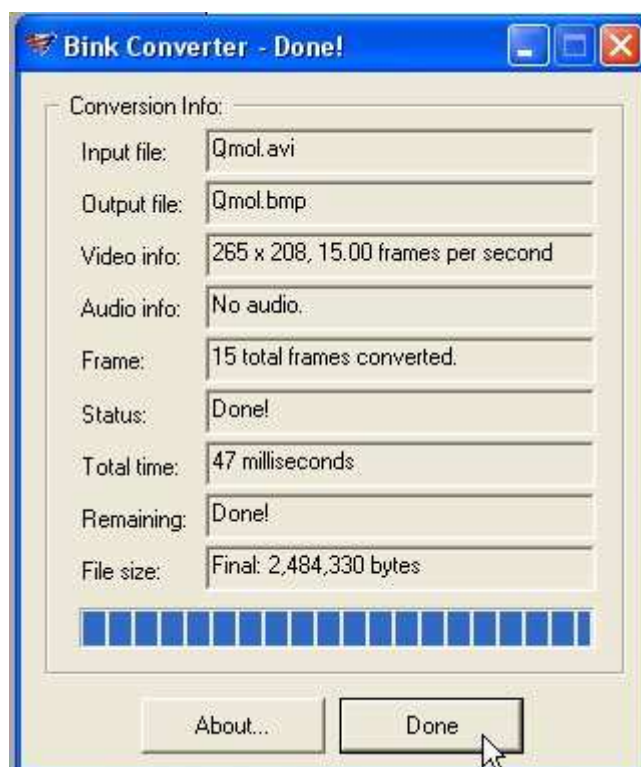
Cliccare il pulsante 'Record' per salvare il file AVI. Quindi selezionare un CODEC per la compressione AVI quando appare la finestra con la relativa richiesta.




Ora è possibile chiudere **Qmol** e completare il lavoro cliccando in successione sui rimanenti 4 pulsanti.



Quando viene cliccato il pulsante "*Estrai fotogr.*" in SweetMollyGrace, appare una finestra. Cliccare il pulsante "*Done*" per chiudere **Bink Converter** e procedere.



Quando viene cliccato il pulsante "AVI GIF FLIC" compare una finestra in cui selezionare il codec per la compressione AVI. I codec presenti sono quelli installati nel proprio computer. Se non viene selezionato alcun codec viene generato un file AVI non compresso di grosse dimensioni.

Quando tutti i semafori verdi  della sezione "**Animazione Qmol**" saranno accesi, sarà possibile visualizzare le animazioni generate. Se non è già selezionato, selezionare "Qmol" e cliccare sul pulsante relativo al formato di animazione desiderato.




**Nota:** anche **YAPView** è in grado di generare un'animazione in formato AVI dal file PDB multiplo 'SMGanim.pdt'

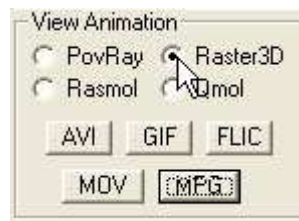
### Raster3D Animazione


Per generare l'animazione Raster3D cliccare in successione i cinque pulsanti di seguito visualizzati

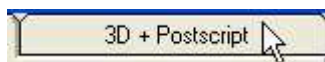


Quando viene cliccato il pulsante "AVI GIF FLIC" compare una finestra in cui selezionare il codec per la compressione AVI. I codec presenti sono quelli installati nel proprio computer. Se non viene selezionato alcun codec viene generato un file AVI non compresso di grosse dimensioni.

Quando tutti i semafori verdi  della sezione "**Animazione Raster3D**" saranno accesi, sarà possibile visualizzare le animazioni generate. Se non è già selezionato, selezionare "Raster3D" e cliccare sul pulsante relativo al formato di animazione desiderato.



**Nota:** è possibile passare alla sezione seguente anche se i semafori verdi della sezione "**Animazione**" sono spenti . Cliccare sul tab "3D + Postscript".



## Sezione 4 – 3D & Postscript

### **3D Files**

Se la Sezione 1 è stata completata, SweetMollyGrace ha già generato un file 3D (**SMGfile.wrl**) in formato VRLM (Virtual Reality Modeling Language).

Cliccando sul pulsante "Accutrans" o "3D Explorer" il VRLM file (**SMGfile.wrl**) verrà caricato.

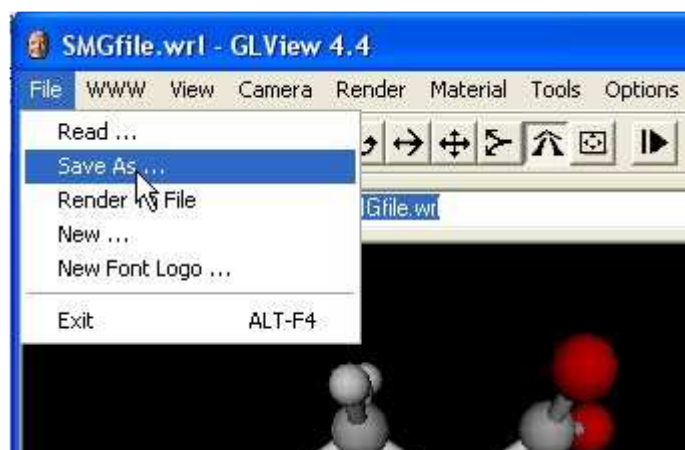
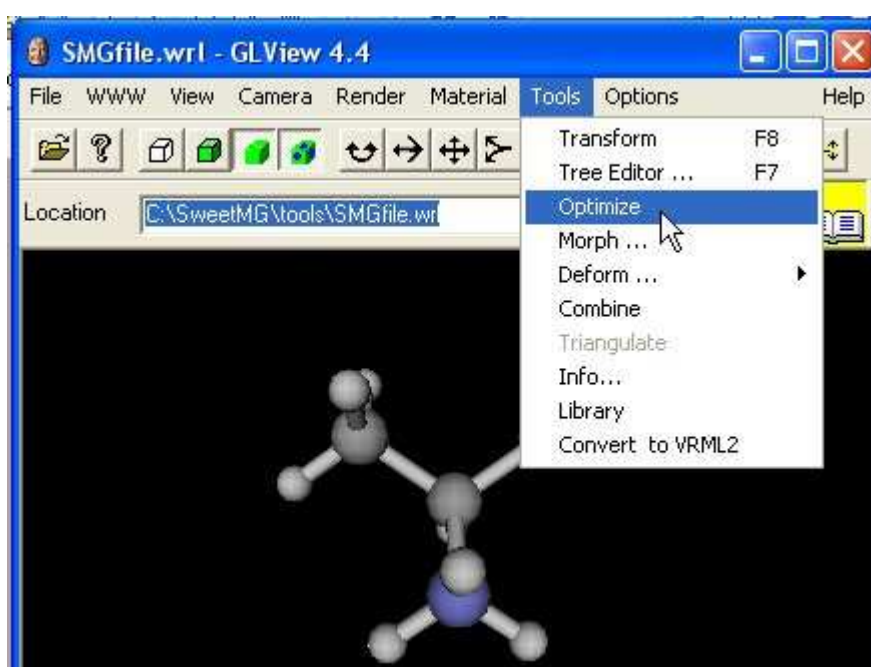
In **Accutrans** o **3D Explorer**, selezionare 'Save as' dal menù 'File' e salvare il file nel formato 3D desiderato (3DS, DXF, OBJ, LWO etc)

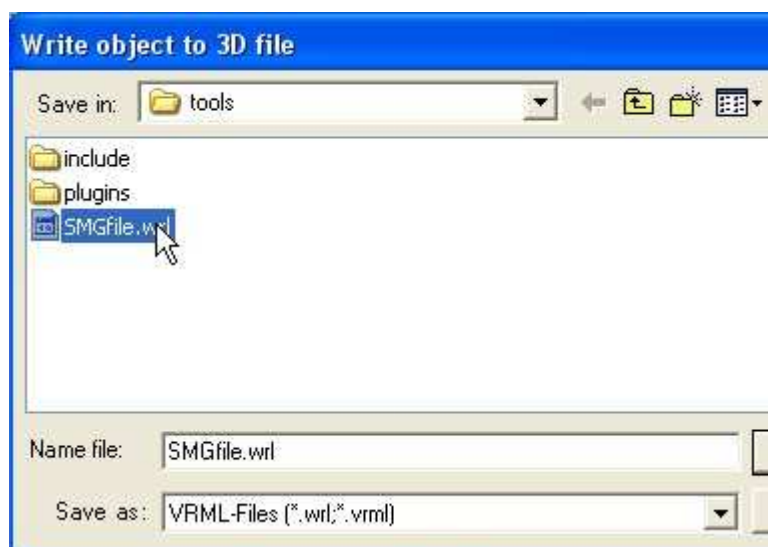
Se **Accutrans** o **3D Explorer** non sono in grado di caricare correttamente e/o convertire il file VRML, cliccare il pulsante 'Ottimizza VRML' in SweetMollyGrace.



Il file VRML verrà caricato da **GLView**.

In **GLView** selezionare 'Optimize' dal menù 'Tools' e salvare nuovamente il file come 'SMGfile.wrl'.



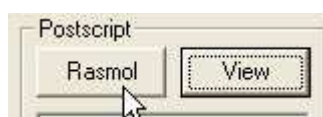


Ora si potrà chiudere **GLView** e ricaricare il file in **Accutrans** o **3D Explorer**.

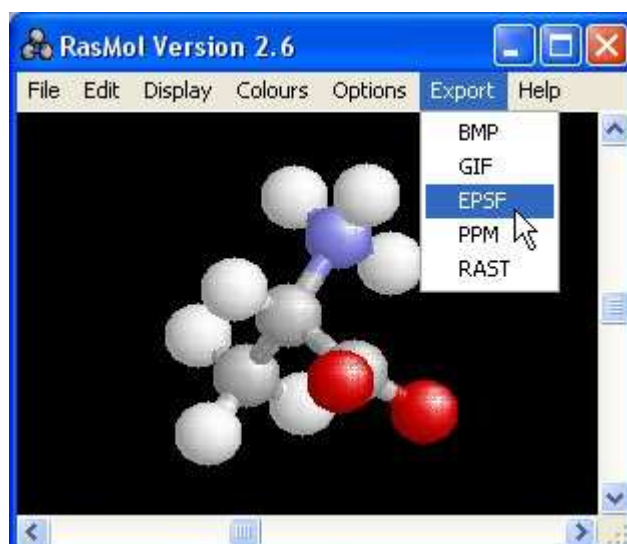
## Postscript Files

Se la Sezione 1 è stata completata, SweetMollyGrace ha già generato un file PS per le molecole proteiche (**SMGfile.ps**). Per le molecole proteiche il file PS è in grado di visualizzare solo la struttura secondaria in modalità Eliche o Cilindri.

Per generare un file PS per molecole non proteiche è necessario lanciare Rasmol, cliccando il pulsante "Rasmol".



In **Rasmol** regolare l'aspetto della molecola (zoom, rotazione, display, colour) ed esportare il file postscript '**SMGfile.ps**' selezionando 'EPSF' dal menù 'Export'.



Ora è possibile chiudere Rasmol e visualizzare il file PS.

