

Inovace bakalářského studijního oboru Aplikovaná chemie

<http://aplchem.upol.cz>

CZ.1.07/2.2.00/15.0247

Tento projekt je spolufinancován
Evropským sociálním fondem a státním
rozpočtem České republiky.



evropský
sociální
fond v ČR



EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost



OKRESNÍ HOSPODÁŘSKÁ
KOMORA OLOMOUC

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Základy počítačové grafiky

Garant: Prof. RNDr. Michal Otyepka, Ph.D.

Vede seminář: Prof. RNDr. Michal Otyepka, Ph.D.

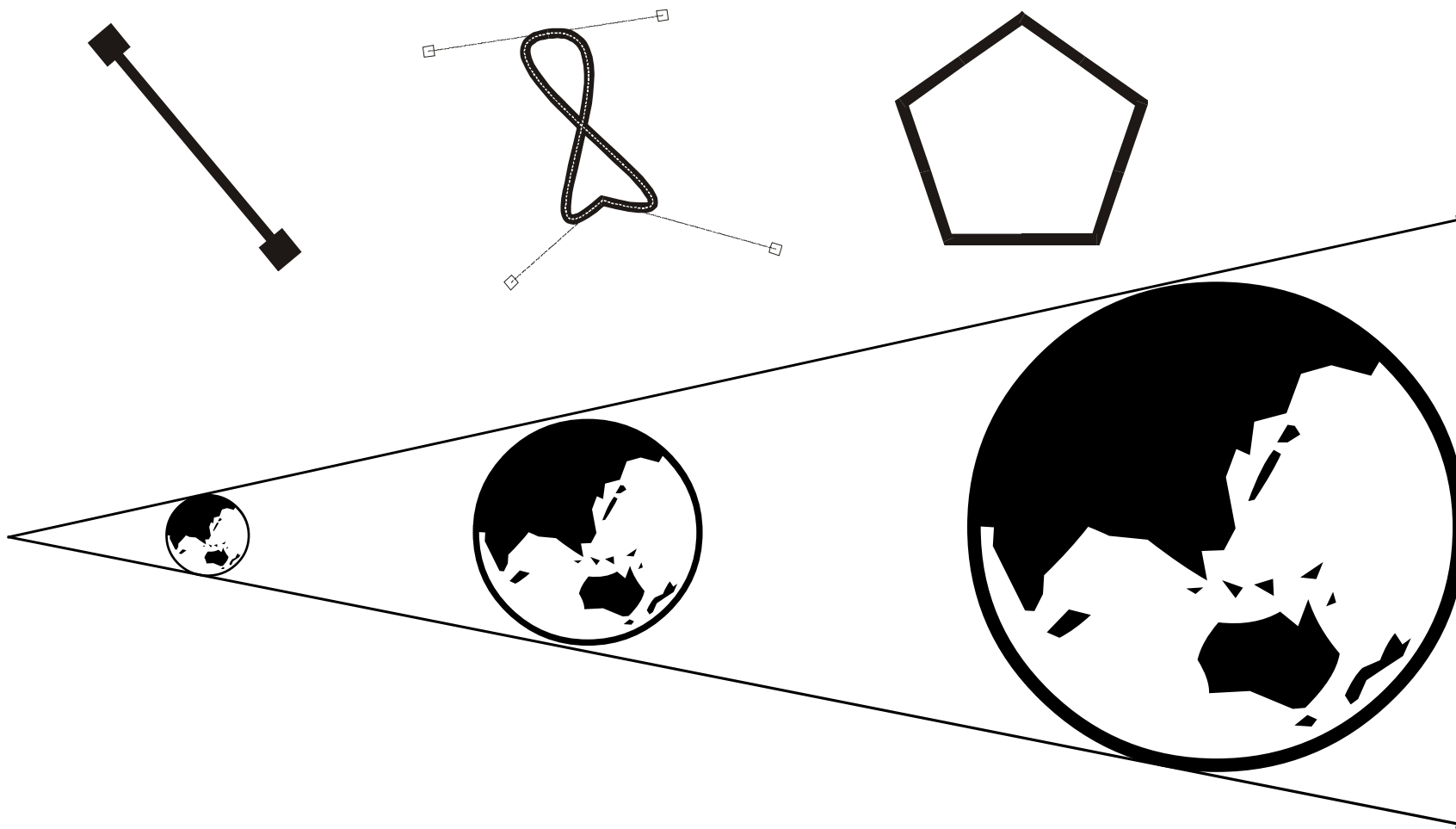
Cvičící: Mgr. Martin Pykal

Grafická data

- vektorová data
- bitmapová data

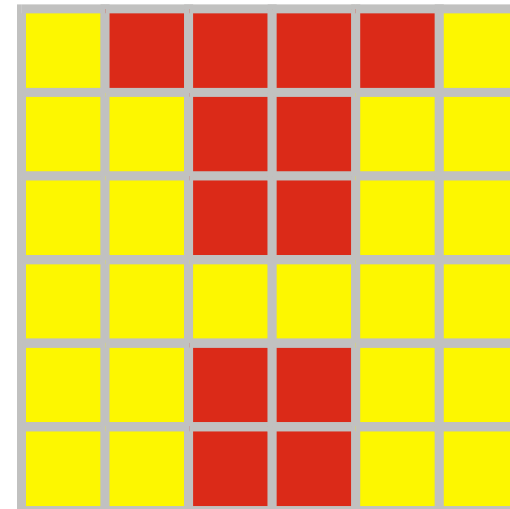
Vektorová data

- úsečky, křivky, mnohoúhelníky a uzly



Bitmapová data

- pixel – barva pixelu



- pixel je charakterizován barvou
- barvu kóduje x-bitů = *bitová hloubka* pixelu
 - 1bit = 2^1 barvy, černá a bílá
 - 4bity = $2^4 = 16$ barev
 - 24bitů = 16 777 216 barev

- fyzický pixel – bod na výstupním zařízení (monitor)
- logický pixel – matematický bod, reprezentuje pozici
- logický pixel je mapován na fyzický pixel

Barva pixelu

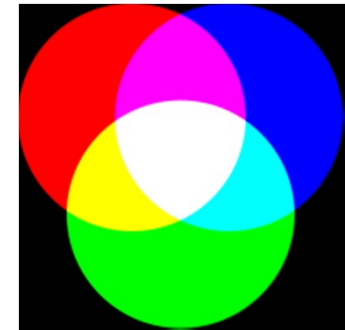
- lidské oko je schopno rozlišit cca 2^{24} barev
- zařízení schopné zobrazovat 2^{24} barev se označuje jako *TrueColor*

Lidské oko a barvy

- konečný počet barevných receptorů (380-770 nm), rozliší zároveň 10 000 barev
- nejcitlivější je oko na zelené světlo, červené a modré
- snáze odlišíme dvě sousední barvy nežli dvě vzdálené
- vnímání barev je značně individuální

Kódování barev

- barva je definována kombinací tří hodnot – základních barev, barevných kanálů
- aditivní systémy
 - přidání barev do černé (monitor)
 - RGB
- subtraktivní systémy
 - odečítání (překrývání) bílé (tisk)
 - CMY



RGB systém

- Red-Green-Blue
 - aditivní systém
 - pixel je reprezentován trojicí barev (r,g,b)
 - pro 24bitovou hloubku přísluší každému kanálu 8bitů (0-255 odstínů)
 - (0,0,0) = černá
 - (255,255,255) = bílá
 - (r = g = b) = stupně šedi

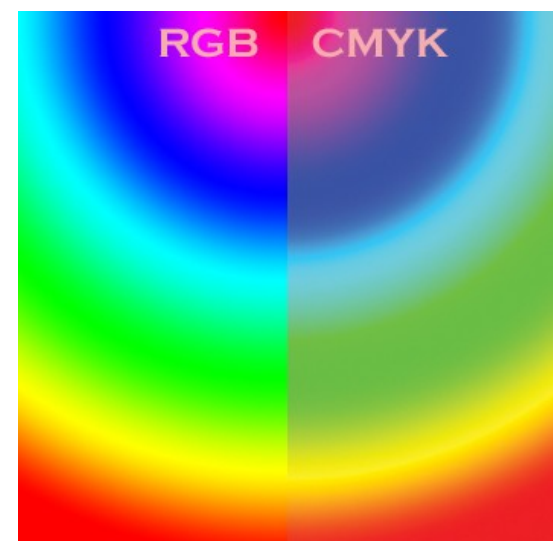
CMY systém

- Cyan-Magenta-Yellow (azur-purpur-žlutý)
 - subtraktivní systém pro tisk
 - azurová absorbuje červenou, purpurová zelenou, žlutá modrou
 - problém s černou řeší systém CMYK (black=černá) – čtyřbarevný tisk se zvláštním kanálem pro černou
 - CMYK nejčastěji používá procentové zastoupení pro komponenty (0-100)



RGB vs. CMY

	RGB	CMY
červená	255,0,0	0,255,255
žlutá	255,255,0	0,0,255
zelená	0,255,0	255,0,255
azurová	0,255,255	255,0,0
modrá	0,0,255	255,255,0
purpurová	255,0,0	0,255,0
černá	0,0,0	255,255,255
bílá	255,255,255	0,0,0



HSV systém

- Hue-Saturation-Value (barva-sytost-jas)
 - systém přidávání bílé (snižování sytosti) a černé (snižování jasů)
 - systém podobný při olejomalbě
 - nádech vzniká přidáním bílé
 - stín přidáním černé
 - tón přidáním šedé = bílé a černé zároveň

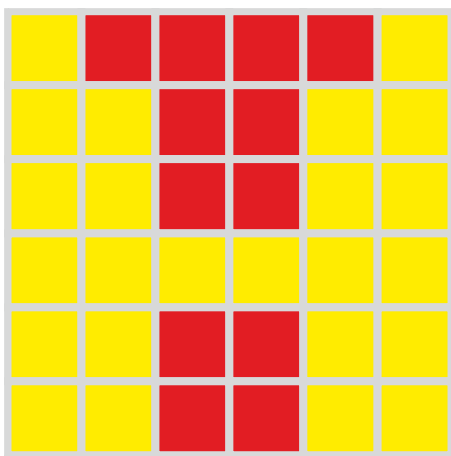
Překrytí či průhlednost

- překrytí obrazu přes pozadí lze definovat pomocí – *overlay bitu*
- složitější systém definuje průhlednost přes – *alfa kanál*
 - R,G,B,A = 4x8 bitů
 - 8bitů pro průhlednost
 - 0 = pixel je zcela průhledný
 - 255 = pixel je zcela neprůhledný

Paleta

- paleta – mapa barev, jednorozměrné pole hodnot barev, na barvy se odkazuje indexem v poli
- bitmapa používající paletu používá tzv. pseudobarevné ukládání

Bitmapové soubory



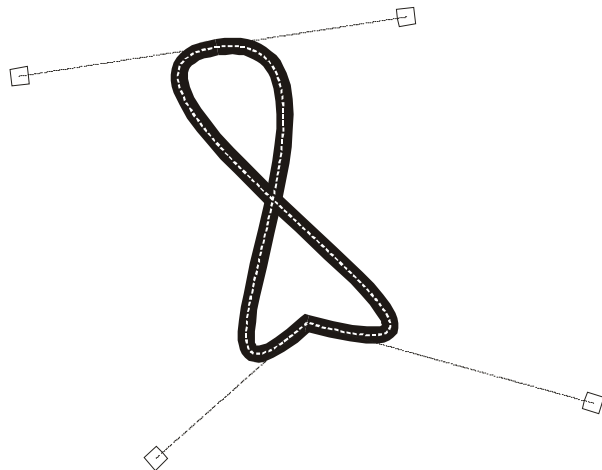
Organizace bitmap

- Hlavička
 - identifikátor souboru, verze, popis předlohy, typ komprese
- Paleta
- Bitmapová data
- Pata

Klady a zápory bitmap

- snadná datová manipulace – zápis a čtení do paměti
- snadnější zobrazení na bodových výstupních zařízeních
- mohou být velmi rozsáhlé
- zmenšování či zvětšování rastrů přináší téměř neřešitelné problémy

Vektorové soubory



Vektorový soubor

- vektor je úsečka definovaná bodem a směrem (nebo dvěma body)
- „vektory“ mohou být i složitější
- vektorové formáty jsou starší nežli bitmapové
- řada dat je „vektorové“ podstaty – výkresy, schémata, mapy, digramy ap.

Klady a zápory vektorů

- přirozený formát pro řadu aplikací – CAD
- škálování dat není problém
- snadná manipulace s objekty
- snadný převod na bitmapová data
- nevhodné pro složité předlohy – fotografie
- nejlépe je zobrazují vektorová zařízení (plotry)
- načtení vektorových dat bývá velmi pomalé, neboť procesor musí informace přeložit a vykreslit

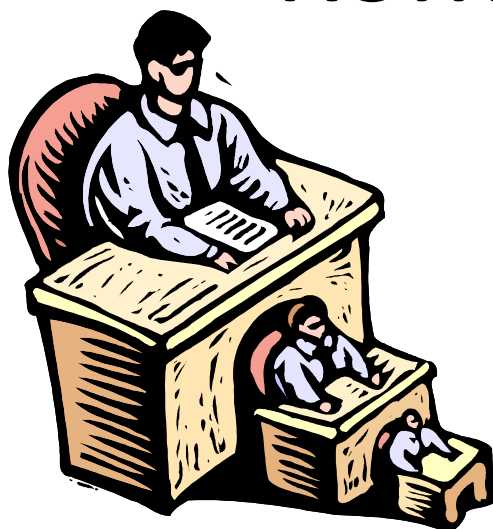
Metasoubory

- hybridní soubor – obsahuje bitmapová i vektorová data

Konverze souborů

- nezbytnost konverze
- bitmapa – bitmapa
 - nebývá vážným problémem
- vektor – vektor
 - nedá se snadno zobecnit, může být snadná až téměř neproveditelná
- vektor – bitmapa
 - relativně snadno proveditelná, záleží na rozlišení vznikající bitmapy
- bitmapa – vektor
 - velmi komplikovaná - vektorizace

Komprese dat



Komprese

- zredukování fyzické velikosti souboru
- komprese – „balí“ surová data
- dekomprese – provádí rekonstrukci dat
- kompresní poměr – poměr velikosti surových/komprimovaných dat
- neztrátová/ztrátová komprese – ztrátové algoritmy redukují informační obsah

Komprimační algoritmy

- RLE (proudové kódování)
 - AAAAABBBACCCCCCCC = 16
 - 5A3B1A7C = 8, poměr 2:1
 - nevýhoda ABC = 1A1B1C, poměr 1:2 ☺
- LZW (Lempel-Ziv-Welch)
 - slovníkový algoritmus
 - ABCDEFABCEFAABCDEF
 - ABC=1,EF=2,D=3,F=4, 13212142

Komprimační algoritmy

- JPEG komprese – ztrátová komprese
 - Joint Photographic Experts Group
 - během komprese zahazuje nepotřebná data
 - jádrem komprimace je diskrétní kosinová transformace a podvzorkování (jakési průměrování pixelů)

Grafické formáty



- Graphics Interchange Format
- LZW komprese
- možnost více předloh v souboru
- omezen na max. 8bitů = 256barev a velikost předlohy 42Kb x 64Kb
- původní verze 87a novější 89a
- prokládaný vs. neprokládaný

GIF89a . . .

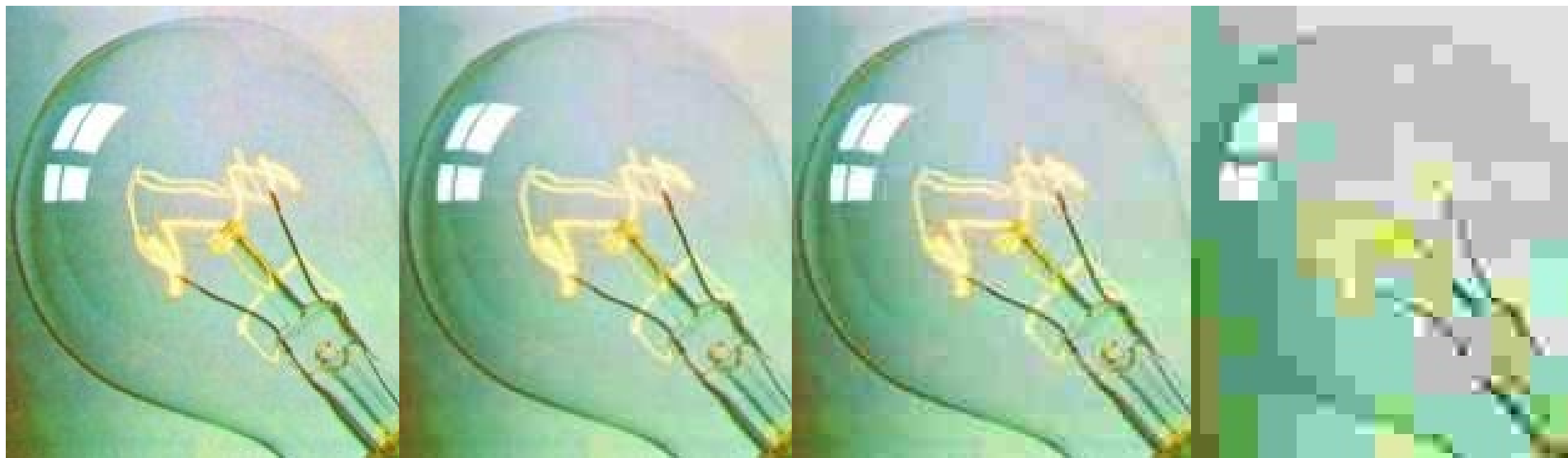
JPEG

- max. 24bitová hloubka
- max. předloha 64k x 64k pixelů
- ztrátová komprese dat, JPEG je kompresní algoritmus, formát je JFIF ale JPEG (JPG) se vžil

· Ř · ř **JFIF** –

FF D8 FF E0 00 10 **4A 46 49 46 00** 01 01 01 00 96

JPEG



6 706

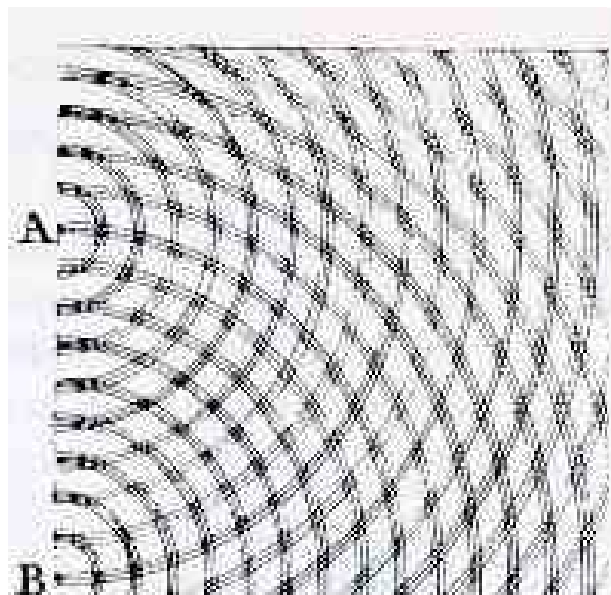
3 549
50

2 494
75

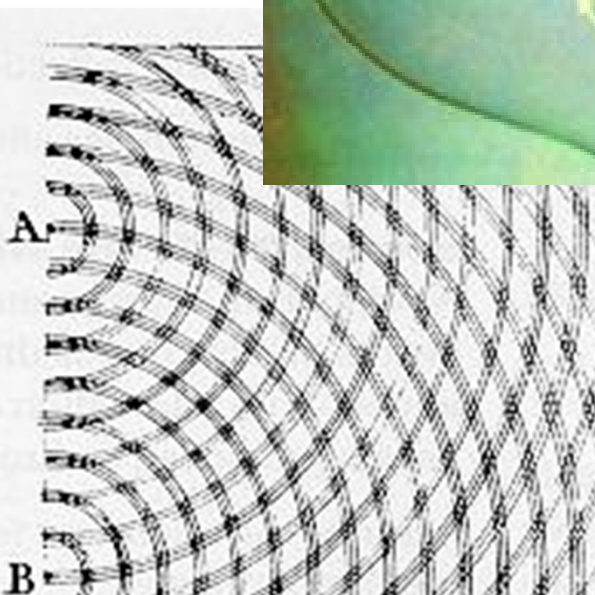
850
100

JPEG vs. GIF

JPEG



GIF



PNG [ping]

- TrueColor 48bit hloubka
- šedá s 16bit hloubkou
- úplný alfa-kanál
- detekce porušení souboru
- rychlé načtení náhledu – výhody pro web
- asymetrická komprese
- není patentově chráněn

BMP / OS2

- 2, 4, 8, 24bitů
- RLE komprese či nic
- 64k x 64k pixelů
- existují podobné formáty pro Windows a OS/2
- *velmi používaný formát, špatná komprese*

- PC Paintbrush File Format
- 2, 4, 8 a 24bitová hloubka
- předloha max. 64kB x 64kB pixelů
- RLE komprese nebo žádná
- *velmi používaný soubor, špatný kompresní algoritmus*

- Targa Image File
- 8, 16, 24, 32bitů
- nekomprimován, RLE
- *dosti používaný pro hlubokopixelové předlohy, špatné kompresní schéma*

- Tag Image File Format
- 1-24bitů
- různé druhy komprese
- max. velikost předlohy 2^{31}
- *velmi univerzální formát*

- metasoubor
- max. 24bitová hloubka
- *navržen pro výměnu souborů mezi aplikacemi pod systémem Windows*

- Rich Text Format
- metasoubor
- 256 barev
- zejména pro kódování textu a grafiky

```
{\rtf1\ansi
```


Encapsulated PostScript

- EPS – PDL (Page Description Lang.)
- metasoubor
- postscriptová hlavička

```
%!PS-Adobe-3.0 EPSF-3.0
%%BoundingBox: 56.50271 74.23002 787.07169 565.47241
%%Creator: CorelDRAW 8
%%Title: C:\docs\chemo\nelin_2.eps
%%CreationDate: Sun Jan 12 19:58:18 2003
%%For: a
%%DocumentProcessColors: Cyan Magenta Yellow Black
%%DocumentSuppliedResources: (atend)
%%EndComments
```

- POV-Ray
- vektorový formát
- *jazyk pro popis scény, který je renderován speciální aplikací POV-Ray*

L Základy počítačové typografie

Počítačová typografie

- **Jak má tiskovina vypadat**
 - **dobře čitelná**
 - **snadná orientace v textu**
 - **estetické působení**
- **Klasické umělecké řemeslo**
 - **J. Gutenberg (1444-48)**
- **Snadná dostupnost**

Tiskařské jednotky

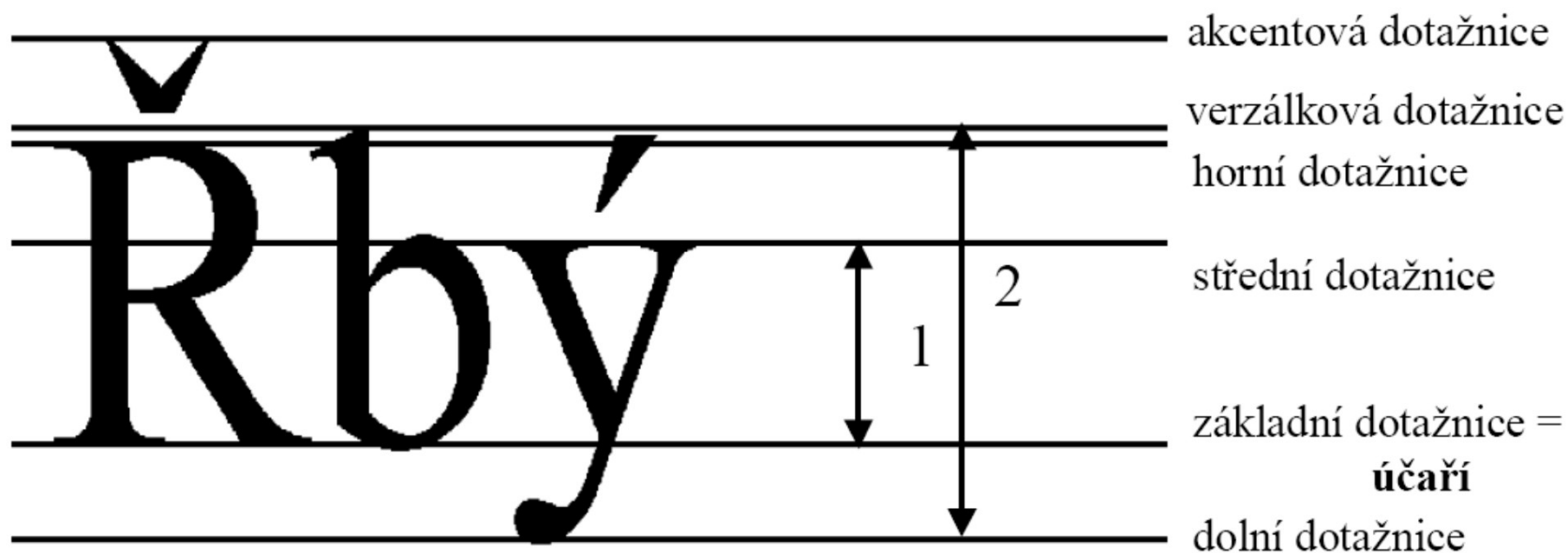
- pt. - point (tiskařská tečka), 0.353 mm
- pc – pica = 12 point

Adobe

- 72 pt. = 6 pc. = 1 palec.
 - ve skutečnosti 72,27 pt. = 1 inch

Písmo

- malá (minusky), velká (verzálky)
- diakritická znaménka (akcenty)



Klasifikace písem

- Patková (serifová)
 - Times, Antiqua, Courier
- Bezpatková (grotesková)
 - Arial
- Kaligrafická, volné písmo
 - *Monotype*, Typo Upright, daad
- Dekorativní
 - Goudy

Použití písem

- patkové
 - pomáhají oku sledovat řádek – souvislé texty, články, knihy
- bezpatkové
 - strohé, přehledné i za zhoršených světelných podmínek, průmyslové účely, technická dokumentace atp.
- nemíchat
 - pokud tím něco nesledujeme

Velikost písma

- proporcionální vs. neproportionální
 - toto je stejný text (nestejná šířka - m i)
 - toto je stejný text (všechny znaky stejně široké, m i i)
 - slitky – fi
- dětská kniha 12-14 pt.
- učebnice 11-12 pt.
- beletrie pro dospělé 10 pt.
- noviny časopisy 8-9 pt.
- plakáty (postery) – čitelnost ze 2 metrů!!!!!!

Čitelnost

- přečtete tento text a přitom 8 pt.
- přečtete tento text a teď už opravdu 12 pt.
- stačilo by vám 16 pt.
- raději použiji opět 32 pt.
- a co tak 72 pt.

Řezy písma

- normální řez
- polotučný řez – bold
- **tučný řez – heavy**
- **extratučný řez – black, extra bold**
- *kurzíva – italics*

Použití písem

- typ, řez, velikost
 - nepřehánět
 - max. 3 typy (většinou stačí jeden)
 - max. 3 řezy a 3 velikosti
- zvýraznění
 - vyhýbat se podtržení, *zvýrazňovat řezem*
 - text si prohlédnout i jako celek

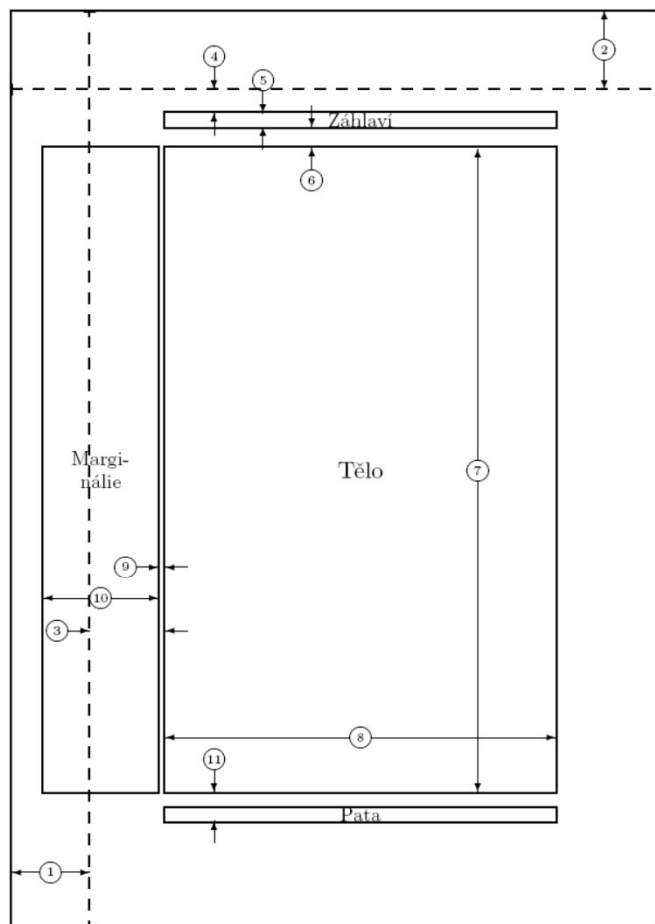
Font

- vektorová reprezentace písma
- ověřit přenositelnost písma (fontu)
- pro tiskové účely používat TrueType fonty
- ověřit možnosti české diakritiky
- i font je autorsky chráněn!

- formáty A0 (další půlením), A1, A2, A3, A4 (21 x 29.7 cm), A5
- jsou i jiné B5, Letter, obálky etc.

záhlaví, zápatí, vnitřní a vnější okraj ... OBR

Stránka



- | | |
|--------------------------|------------------------------------|
| 1 jeden palec + \offset | 2 jeden palec + \voffset |
| 3 \evensidemargin = 70pt | 4 \topmargin = 22pt |
| 5 \headheight = 13pt | 6 \headsep = 19pt |
| 7 \textheight = 595pt | 8 \textwidth = 360pt |
| 9 \marginparsep = 7pt | 10 \marginparwidth = 106pt |
| 11 \footskip = 27pt | \marginparpush = 5pt (nevyobrazen) |
| \offset = 0pt | \voffset = 0pt |
| \paperwidth = 597pt | \paperheight = 845pt |

Odstavec

- první řádek (odsazení, nemusí následuje-li za nadpisem)
- poslední (východový) řádek – delší než odstavcová zarážka, kratší než plný řádek
- vlastnosti
 - okraje, odsazení prvního řádku, mezery před a za, řádkování, zarovnání

Zalamování řádků

- automatické (na konci řádku nedělat Enter!),
dělení slov, nucené zalomení řádku (Shift+Enter)
- zarovnání
 - střed – plakáty
 - na levý okraj (úzké odstavce), poezie
 - na pravý okraj
 - do bloku (na praporek) – pro souvislý text, ideální je kombinace s dělením slov (WORD to dobře neumí)

Kdy nezalomit řádek

- s, z, v, k – WORD to umí kontrolovat
- jména - J. V. Sládek
- někdy např. číslo + jednotka
- buď tvrdá mezera (CTRL+SHIFT+SPC, WORD)
nebo zalomit ručně (SHIFT+Enter)

Řádkování

- běžný text – jednoduché řádkování (vzdálenost dvou řádků cca 2 pt.)
- korektury, překlady etc. – dvojité řádkování
- normostrana (podle ní se obvykle i platí)

Normostrana

- Vyhl. Č. 77/1993 Sb. § 24 ods. 2
 - 1800 úhozů (znaků včetně mezer)
 - 30 řádků x 60 úhozů

Jak psát I.

- interpunkční znaménka
 - bla, bla a bla. Bla bla
 - **NE:** bla , bla a bla . Bla bla
- ne za nadpisem
- atp. (stačí jedna tečka **NE** atp..)
- vyhýbat se psaní více mezer, používat tabulátor (pomohou i tabulky)

Jak psát II.

- české uvozovky – bla „bla bla“
- závorky – (bla bla), **NE** (bla)
- spojovník – česko-anglický
- pomlčka – (je delší) odděluje větné celky, nahrazuje až
- výpustek - ... (ne tři tečky)
- matematická znaménka (+, −, =)
 - $3 - 3 = 0$ (s mezerami)
 - záměna mínus – za spojovník -
 - MS Equation pomůže

Jak psát III.

- v textu čísla slovy
 - ne letopočty, čas, datum, změřené hodnoty
 - Koupil jsem dva rohlíky.
 - pH vzorku činí 5,5
- desetiná čárka 0,02
 - angloamerická sazba tečkou 0.02, čárka odděluje tisíce
- datum
 - 21. 10. 2004

Časté chyby

- USA, **NE:** U.S.A.
- zkratky: apod., atd., např.
- viz, **NE:** viz. (rozkazovací zp.)

Matematická sazba

- proměnná – kurzívou: x , y , $f(x)$
- běžné funkce normálním ř.: $\ln$, $\sin$ i $\lim$
 $\sin^2 x + \cos^2 x = 1$
- vektory a matice tučně: **x** , **B**
- MS Equation
- TeX

Ukázky sazby matematiky

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{k=1}^n \frac{1}{k^2} = \frac{\pi^2}{6}, \quad \lim_{n \rightarrow 0} \frac{\sin x}{x} = 1.$$

$$\frac{\sqrt{x}}{\sqrt{x^2 + y^2}} \quad \frac{\sqrt{x^2 + y^2}}{\sqrt{y}} \quad \sqrt[n]{2} \quad \sqrt[n]{2}$$

$$\sum_{j \in \mathbf{n}} b_{ij} \hat{y}_j = \sum_{j \in \mathbf{n}} b_{ij}^{(\lambda)} \hat{y}_j + (b_{ii} - \lambda_i) \hat{y}_i \hat{y}$$

$$f(x) = \cos x \quad (1)$$

$$f'(x) = -\sin x \quad (2)$$

$$\det \mathbf{B} = \sum_{l=0}^n \sum_{I_l \subseteq \mathbf{n}} \prod_{i \in I_l} (b_{ii} - \lambda_i) \det \mathbf{B}^{(\lambda)}(I_l | I_l)$$

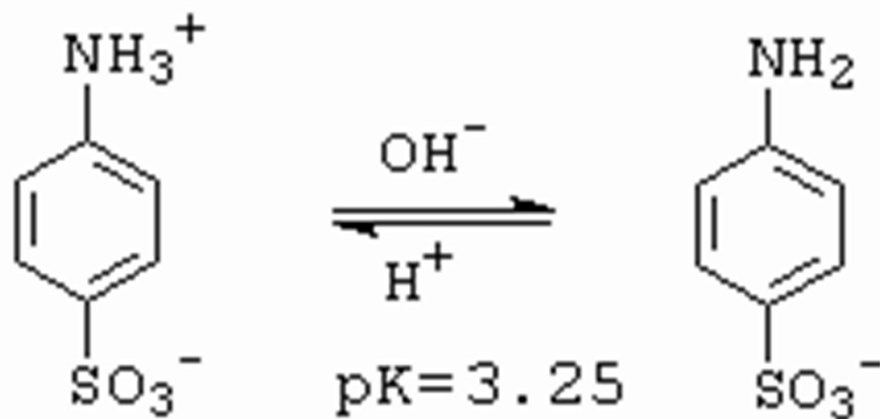
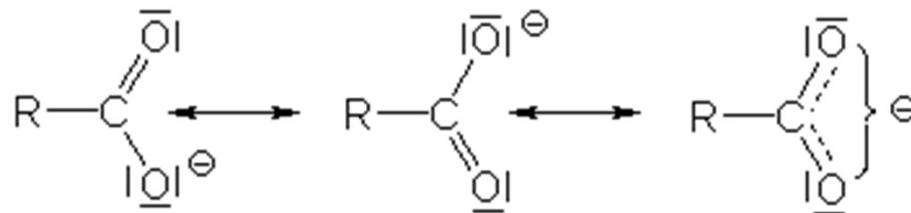
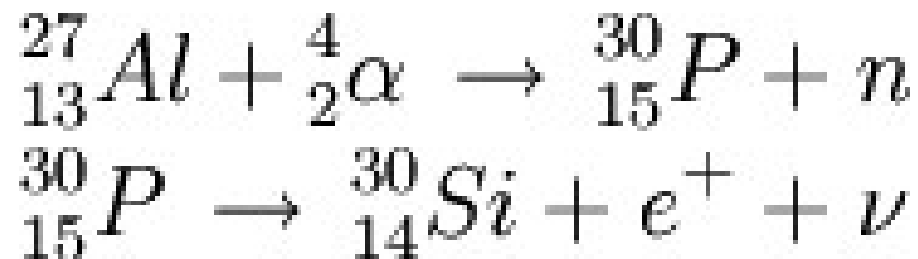
$$\int_0^x f(y) \, dy = \sin x \quad (3)$$

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} \int_0^{\frac{\pi}{2}} \iint_D g(x, y) \, dx \, dy$$

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \dots \quad (6)$$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots \\ a_{21} & a_{22} & \dots \\ \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Chemické reakce



Čím na to

- textové editory
 - psaní, elementární práce s textem, nepočítá se s tiskem (vi, notepad atp.)
- textové procesory
 - psaní + formátování
- DTP systémy
 - PageMaker, TeX a jeho odvozeniny

Přenositelnost

- .doc – VELKÉ problémy, na jiném PC může vypadat jinak, způsobuje šílenství (docx – zlepšení)
- PDF – profesionální programy umožňují export, nebo pomocí virtuální tiskárny – Distiller, snadné čtení a tisk Reader je všude a je zdarma
- PS – postscript (PS2, EPS)
 - horší čtení GhostScript + GhostView
 - možnost přímého tisku
 - aplikace fy Adobe
- RTF – dobrá přenositelnost
 - s obrázky se dokument stává brutálně velký

Kde se poučit

- www.typo.cz
- Stručná učebnice spisovatelství, J. Zvoníček
(pdf běhá po síti)
- knihy o Typografii

Obrázky, grafy, tabulky

- Obrázek, graf, tabulka
 - prezentace informací ve snadno uchopitelné formě
 - obrázek, graf, tabulka mají popisek
 - spolu s popiskem nese úplnou informaci („self-explanatory“)
 - není třeba duplicit (tabulka a graf)

jasné popisky

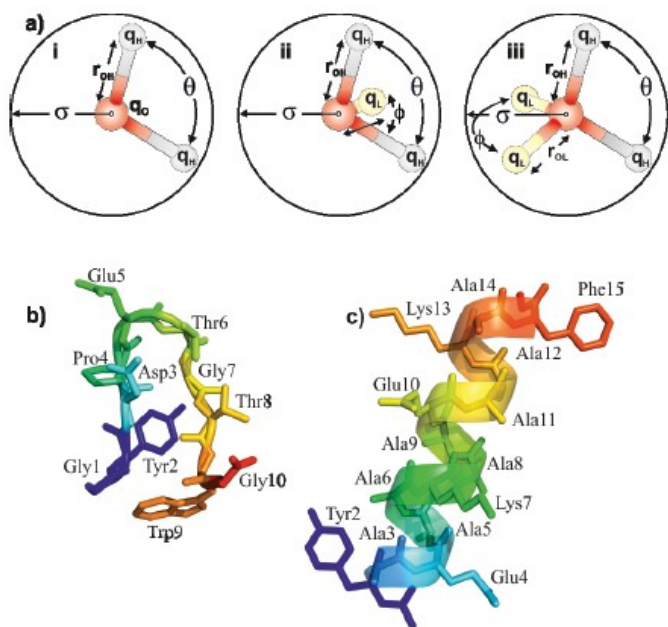


Figure 1. (a) Three-dimensional representations of three-site TIP3P and SPC/E (left), four-site TIP4P (middle), and five-site TIP5P (right) water models. The labels correspond to the parameters listed in Table 1. (b) Chignolin and (c) EK-peptide structures in stick representations.

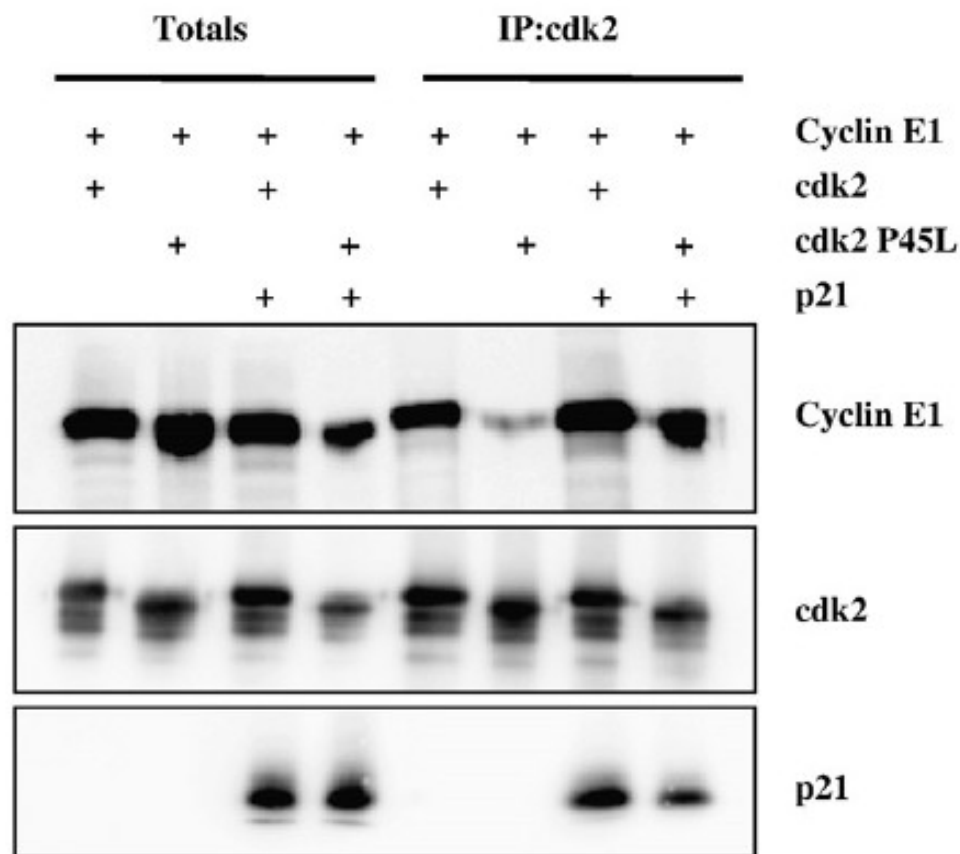


Fig. 6. CIP/KIP inhibitors can stabilise the P45L cdk/cyclin E1 complex. Sf9 cells were co-infected with recombinant baculovirus encoding cyclin E1, wild type cdk2 or P45L cdk2 in the absence and presence of p21-encoding virus. Cell lysates were immunoprecipitated through cdk2 and immunoprecipitations were immunoblotted as indicated.

Obrázek

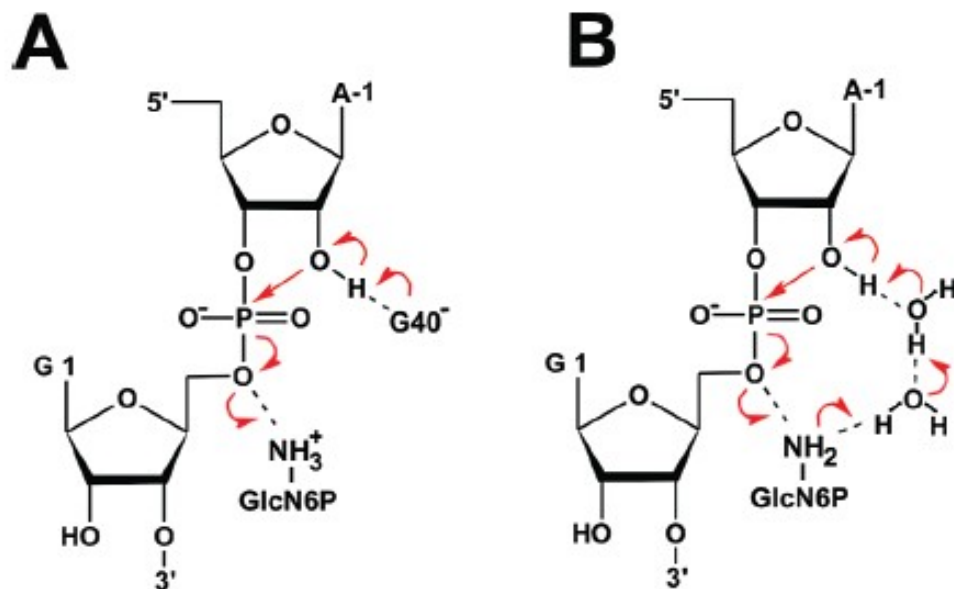


Figure 3. Proposed mechanisms for *glmS* riboswitch self-cleavage. (A) The conserved G40 is deprotonated and acts as the general base and GlcN6P acts as the general acid. (B) Glucosamine-6-phosphate acts both as the general base, accepting a proton from the A-1(O2') nucleophile via two tightly bound waters, and as the general acid, transferring this proton to the leaving G1(O5') oxygen. Red arrows denote electron flow during the reaction.

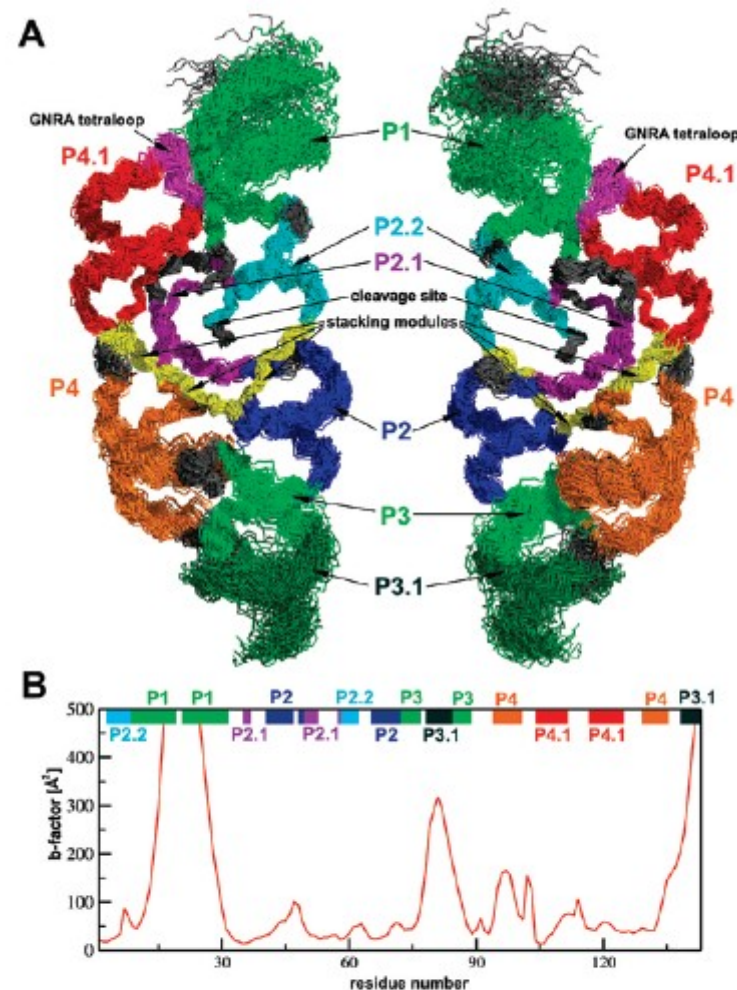


Figure 4. (A) The superimposed snapshots of G40/GlcN⁺6P₂⁻ simulation taken at each nanosecond demonstrate flexibility of P1, P3, P3.1 and P4 stems and rigidity of the pseudoknot core. (B) The thermal B-factors of the backbone atoms of each residue calculated from MD

Stereo - obrázek

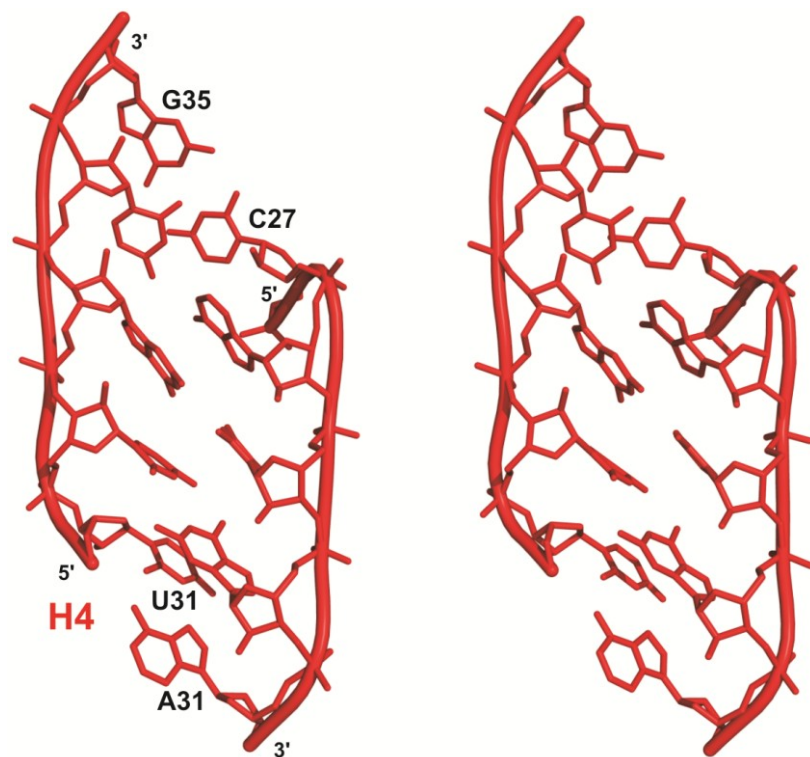


Figure S6: Stereo view of the 'ladder-like' structure of H4 A-RNA duplex taken from OMe/G8/A38H⁺ simulation.

- Dvě kopie 3D objektu
 - vzdálené o 6-7 cm
 - pootočené o 3-4°

Graf

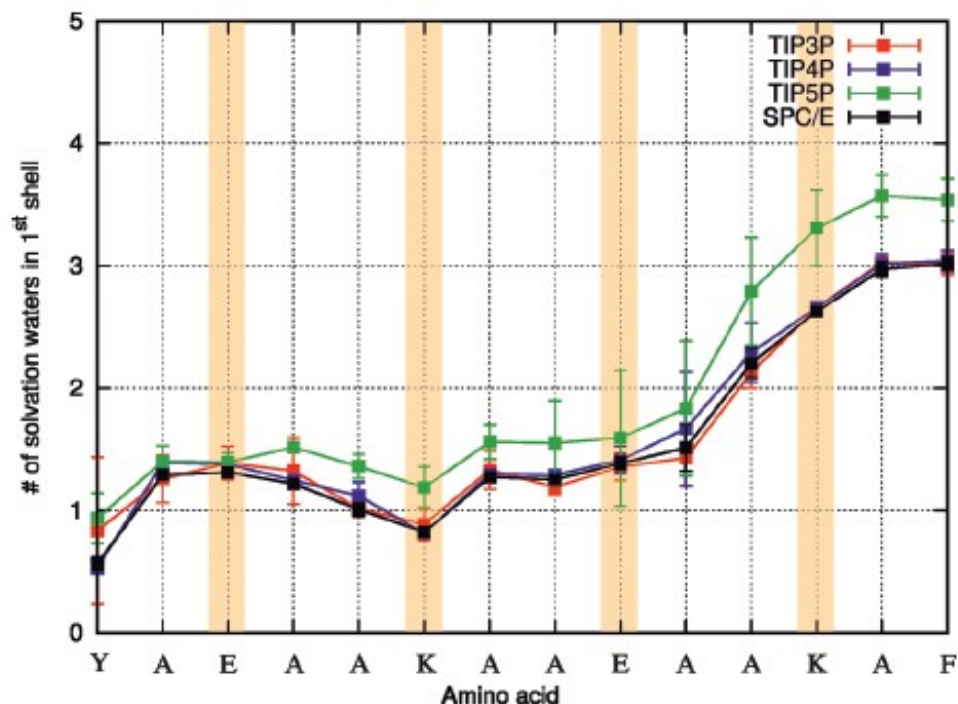


Figure 3. Average numbers of water molecules within the first hydration shell (<3.4 Å) of backbone carbonyl oxygen atoms calculated from ff03 simulations of EK-peptide.

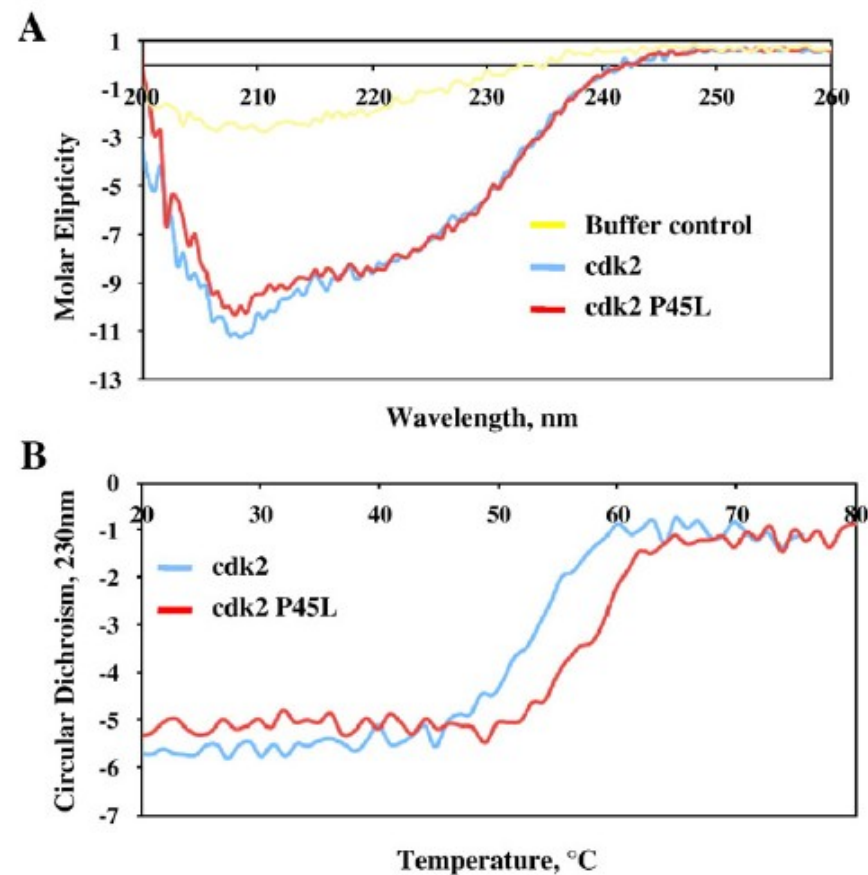


Fig. 3. P45L cdk2 is more stable than its wild type counterpart. A CD spectra of cdk2 (blue) and P45L cdk2 (red) at 20 °C from 200 to 260 nm. The yellow line delineates the buffer control. B Denaturation curves for cdk2 (blue) and P45L cdk2 (red) at 230 nm from 20 to 80 °C. For all CD data, representative plots are shown from three independent repeats.

Graf

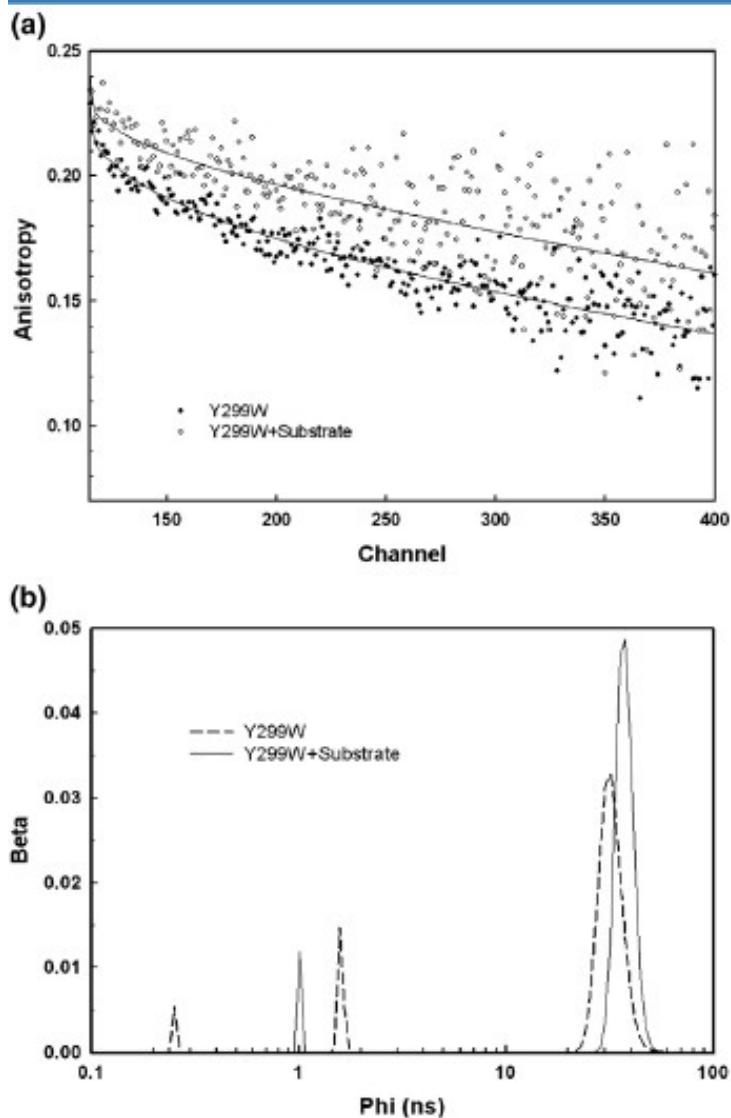


Fig. 3. Fluorescence anisotropy decays of the α -MPP*-Y299W mutant form in TN buffer, pH 8.6, containing 10% glycerol. (a) Anisotropy decays in the absence (●) and in the presence (○) of substrate. Continuous lines are the best fits. The time scale is 36.5 ps/channel. (b) Analysis of the fluorescence anisotropy decay data. Distributions of correlation times corresponding to the best fits from Fig. 3a in the absence (broken line) and in the presence (continuous line) of substrate.

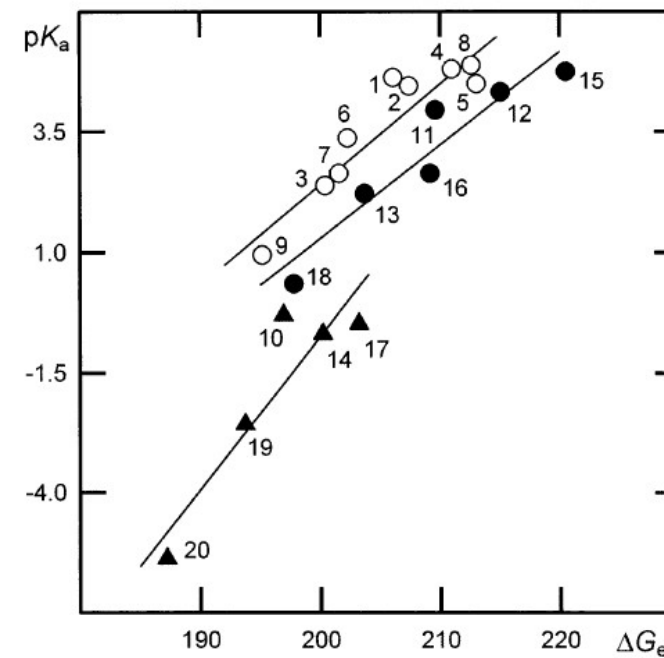


Figure 2. Dependence of pK_a values on the values of the Gibbs energy of the dissociation equilibrium (ΔG_{eq} in kcal mol⁻¹): ○, monosubstituted derivatives without a nitro group; ●, disubstituted derivatives without a nitro group; ▲, nitro derivatives.

Tabulka

Table 3. Anisotropy decay parameters of α -MPP* with reporter tryptophan residues in GRL

Sample	$\bar{\tau}$ (ns) ^a	$\bar{\beta}_1$	$\bar{\phi}_1$ (ns)	$\bar{\beta}_2$	$\bar{\phi}_2$ (ns)	$\bar{\beta}_3$	$\bar{\phi}_3$ (ns)
α -MPP* ^b	3.28	0.051	<0.3	—	—	0.179	23±5
α -MPP*+S	2.89	0.017	<0.3	—	—	0.213	28±5
α -MPP*-Y299W	3.74	0.019	<0.3	0.020	1.6±0.3	0.191	32±5
α -MPP*-Y299W+S	3.52	0.005	<0.3	0.012	1.0±0.3	0.213	38±5
α -MPP*-Y303W	4.04	0.008	<0.3	—	—	0.222	44±5
α -MPP*-Y303W+S	3.92	—	—	—	—	0.230	60 (−10, +∞)

+S, in the presence of pMDH substrate.

Uncertainties are estimated from multiple measurements ($n=3-5$).

Results were obtained in the presence of 10% glycerol.

^a Mean fluorescence lifetime (± 0.03 ns).

^b α -MPP* = α -subunit with the single Trp223 residue (see Expression vectors and protein products).

Tabulka

TABLE 3: Selected Properties of Anilines Computed by the B3LYP/6-311G(d,p) Method

X_2, X_6	r_{C-N}^a	δ^b	θ^b	ΔG_{eq}^c	E_{HOMO}^d	μ^e	μ_+^e
H, H	1.397	38.12	2.18	206.09	-0.207	1.713	7.123
H, CH ₃	1.400	38.82	2.46	207.40	-0.204	1.746	6.651
H, CF ₃	1.383	33.18	0.30	200.38	-0.223	2.747	7.500
H, OH	1.394	39.31	2.34	210.97	-0.196	1.369	5.363
H, CH ₃ O	1.393	38.85	2.46	213.07	-0.193	1.689	5.503
H, F	1.391	37.77	2.49	202.27	-0.213	1.715	6.337
H, Cl	1.385	34.62	2.32	201.54	-0.217	2.080	6.433
H, NH ₂	1.409	47.68	6.15	212.61	-0.194	1.387	5.047
H, CN	1.375	27.36	0.95	195.13	-0.228	4.208	6.651
H, NO ₂	1.355	6.42	0.75	196.89	-0.230	4.722	7.341
CH ₃ , CH ₃	1.401	37.80	1.68	209.60	-0.201	1.787	6.144
CH ₃ , CH ₃ O	1.397	40.27	2.87	215.07	-0.192	1.568	5.090
CH ₃ , Cl	1.388	35.83	1.87	203.68	-0.214	2.280	5.740
CH ₃ , NO ₂	1.356	0.32	0.83	200.16	-0.226	5.069	6.620
CH ₃ O, CH ₃ O	1.391	39.92	3.44	220.52	-0.184	1.022	4.164
CH ₃ O, Cl	1.382	35.20	2.78	209.17	-0.204	3.251	5.015
CH ₃ O, NO ₂	1.351	0.00	0.00	203.19	-0.216	6.273	6.393
Cl, Cl	1.374	30.25	2.20	197.77	-0.225	0.761	3.723
Cl, NO ₂	1.349	0.64	0.52	193.68	-0.239	3.080	3.356
NO ₂ , NO ₂	1.337	0.31	0.40	187.19	-0.258	1.810	0.828

^a r_{C-N} (in Å) is the distance between the aromatic carbon and the amino group nitrogen. ^b δ and θ (in deg) are angles describing the (non)planarity of the amino group (cf. Figure 1). ^c ΔG_{eq} (in kcal mol⁻¹) is the gas phase basicity calculated as the Gibbs energy change for the reaction of aniline with a proton on the amino group. ^d E_{HOMO} (in hartrees, 1 hartree = 27.2116 eV) is the energy of the highest-occupied

Table 7. Salt Bridge Probabilities (Distance up to 4.5 Å) Calculated from EK-Peptide Simulations with ff03^a

water model	Glu3...Lys6	Lys6...Glu9	Glu9...Lys12
TIP3P	0.36 ± 0.04 (0.35)	0.06 ± 0.02 (0.06)	0.31 ± 0.02 (0.33)
TIP4P	0.33 ± 0.07	0.03 ± 0.01	0.36 ± 0.04
TIP5P	0.49 ± 0.20	0.08 ± 0.10	0.51 ± 0.15
SPC/E	0.33 ± 0.07 (0.29)	0.06 ± 0.06 (0.06)	0.36 ± 0.07 (0.29)

^a The mean probabilities and corresponding standard deviations were calculated from multiple simulations having helicity above 70%. The estimates in parentheses relate to 1 μ s simulations.

Reference, odkazy

- na obrázky a tabulky se v textu odkazuje
 - Např. ... (Tab. 1), (Obr. 1),
 - EN: (Fig. 1)
- ve Wordu pomohou křížové odkazy

interacting dipoles are oriented favorably) or smaller than one (if they are unfavorably oriented). Thus, the whole curve in Fig. 2 can be shifted either upwards or downwards.

Now we can compare the calculated distance-dependent AMBER/DFT-SAPT ratio with the expected MM/QM ratio described above. Fig. 3 shows results for uracil dimers, methanol dimer and methylammonium...methanol complexes (see ESI† for more results). Let us start with the B3LYP/vac charges (see Fig. 3), which are supposed to provide the best representation of the molecular electron density in vacuum of all charge sets considered. Fig. 3 shows both the absolute values of the electrostatic interaction energy (left) and the

Table 1 summarizes the calculated electronic properties of the studied materials, i.e., their bandgaps (E_g) and maximal direct gaps (E_{gmax}). CH, CF, and CCl are direct bandgap materials, while CBr is an indirect bandgap material. The bottom of the conduction band and the top of the valence band are located at the Γ point in the first Brillouin zone for CH, CF, and CCl (see **Figure 4**); in these species, the top of the valence band is doubly degenerate. CH and CF have similar band structures

Citace, literatura

- zdroje je třeba řádně citovat
- problém s plagiátorstvím, pravidlo pěti slov „tak tento text jsem opsal z knihy¹“
- obrázky, tabulky, prezentace ... vše podléhá autorskému právu
- např. ... obr. 3 převzat z literatury.¹
- styl referencí se může lišit podle časopisu



■ Graphene

In addition, graphite fluoride is a well-known covalent derivative of graphite with interesting electrochemical and electronic properties and potential applications in hydrogen storage.^[2] Depending on the preparative conditions employed, graphite fluoride with different fluorine-to-carbon atomic ratios can be obtained, the most representative example being the stoichiometric carbon monofluoride. This gray solid lacks the aromatic character of graphite, instead adopting a puckered cyclohexane-ring structure, with each carbon bearing a fluorine alternately above and then below the ring.^[3] Analogously to graphite oxide, which serves as a source of graphene oxide monolayers,^[4] graphite fluoride can be used as a precursor for another, less intensively studied graphene derivative: fluorinated graphene. While graphite fluoride has been examined as a starting material for making

- [1] a) K. S. Novoselov, D. Jiang, F. Schedin, T. J. Booth, V. V. Khotkevich, S. V. Morozov, A. K. Geim, *Proc. Natl. Acad. Sci. USA* **2005**, *102*, 10451; b) H. S. S. R. Matte, A. Gomathi, A. K. Manna, D. J. Late, R. Datta, S. K. Pati, C. N. R. Rao, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2010**, *49*, 4059.
- [2] a) J. C. Charlier, X. Gonze, J. P. Michenaud, *Phys. Rev. B* **1993**, *47*, 16162; b) H. Touhara, F. Okino, *Carbon* **2000**, *38*, 241; c) H. S. Cheng, X. W. Sha, L. Chen, A. C. Cooper, M. L. Foo, G. C. Lau, W. H. Bailey, G. P. Pez, *J. Am. Chem. Soc.* **2009**, *131*, 17732.
- [3] N. Watanabe, S. Koyama, H. Imoto, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **1980**, *53*, 2731.
- [4] S. Park, R. S. Ruoff, *Nat. Nanotechnol.* **2009**, *4*, 217.
- [5] a) K. A. Worsley, P. Ramesh, S. K. Mandal, S. Niyogi, M. E. Itkis, R. C. Haddon, *Chem. Phys. Lett.* **2007**, *445*, 51; b) J. H. Lee, D. W. Shin, V. G. Makotchenko, A. S. Nazarov, V. E. Fedorov, Y. H. Kim, J. Y. Choi, J. M. Kim, J. B. Yoo, *Adv. Mater.* **2009**, *21*, 4383.
- [6] S.-H. Cheng, K. Zou, F. Okino, H. R. Gutierrez, A. Gupta, N. Shen, P. C. Eklund, J. O. Sofo, J. Zhu, *Phys. Rev. B* **2010**, *81*, 205435.
- [7] a) Y. Hernandez, V. Nicolosi, M. Lotya, F. M. Blighe, Z. Y. Sun, S. De, I. T. McGovern, B. Holland, M. Byrne, Y. K. Gun'ko, J. J. Boland, P. Niraj, G. Duesberg, S. Krishnamurthy, R. Goodhue, J. Hutchison, V. Scardaci, A. C. Ferrari, J. N. Coleman, *Nat. Nanotechnol.* **2008**, *3*, 563; b) A. B. Bourlinos, V. Georgakilas, R. Zboril, T. A. Steriotis, A. K. Stubos, *Small* **2009**, *5*, 1841; c) J. N. Coleman, *Adv. Funct. Mater.* **2009**, *19*, 3680; d) U. Khan, A. O'Neill, M. Lotya, S. De, J. N. Coleman, *Small* **2010**, *6*, 864.

PROTEINS

STRUCTURE ■ FUNCTION ■ BIOINFORMATICS

INTRODUCTION

Haloalkane dehalogenases (EC 3.8.1.5) are bacterial α/β -hydrolases^{1,2} which catalyze the cleavage of the carbon-halogen bond in haloorganic compounds by a hydrolytic mechanism.^{3–5} These enzymes have been exploited for clean-up of groundwater contaminated by halogenated compounds,⁶ removal of the side-products from chemical synthesis,⁷ biosensors detecting halogenated contaminants in the environment.⁸ Unfortunately, two key factors limit their practical application: first, these enzymes can convert only few substrate molecules per second and their substrate range is not broad.^{4,9,10} A large effort is hence made to increase their enzymatic activity and specificity.^{4,11} In this context, the structure–function relationships and particularly knowledge of the catalytic mechanism are important to address mutations in order to improve enzyme activity and substrate range.

REFERENCES

1. Nardini M, Dijkstra BW. α/β Hydrolase fold enzymes: the family keeps growing. *Curr Opin Struct Biol* 1999;9:732–737.
2. Holmquist M. Alpha beta hydrolase fold enzymes structures, functions and mechanisms. *Curr Protein Pept Sci* 2000;1:209–235.
3. Janssen DB, Pries F, VanderPloeg JR. Genetics and biochemistry of dehalogenating enzymes. *Annu Rev Microbiol* 1994;48:163–191.
4. Janssen DB. Evolving haloalkane dehalogenases. *Curr Opin Chem Biol* 2004;8:150–159.
5. de Jong RM, Dijkstra BW. Structure and mechanism of bacterial dehalogenases: different ways to cleave a carbon-halogen bond. *Curr Opin Struct Biol* 2003;13:722–730.

Introduction

Molecular dynamic (MD) simulations of biomacromolecules are based on empirical force fields, which relate potential energy and molecular structure. Several in-depth overviews of current trends in the field of empirical potentials have been published.^{1–5} Among all of the available empirical potentials, the AMBER,^{6,7} GROMOS,⁸ CHARMM,⁹ OPLS¹⁰ families of force fields have performed well on biomacromolecules. However, in this study we deal only with the AMBER family of force fields, which have been thoroughly tested on a variety of biomolecular systems. The AMBER family of force fields performs well for a range of

References

- (1) Mackerell, A. D. *J. Comput. Chem.* **2004**, *25*, 1584.
- (2) Ponder, J. W.; Case, D. A. *Adv. Protein Chem.* **2003**, *66*, 27.
- (3) van der Kamp, M. W.; Shaw, K. E.; Woods, C. J.; Mulholland, A. J. *J. R. Soc. Interface* **2008**, *5* (3), S173.
- (4) van Gunsteren, W. F.; Bakowies, D.; Baron, R.; Chandrasekhar, I.; Christen, M.; Daura, X.; Gee, P.; Geerke, T.

Citační norma

- ČSN ISO 690 - Bibliografické citace. Obsah, forma a struktura
- ČSN ISO 690-2 Bibliografické citace. Část 2: Elektronické dokumenty nebo jejich části

- Software pro správu citací nabízí řadu neocenitelných výhod
 - EndNote (ThomsonReuters)
 - Refman
 - Mendeley
 - **BibTeX**
 - OBD
 - ...

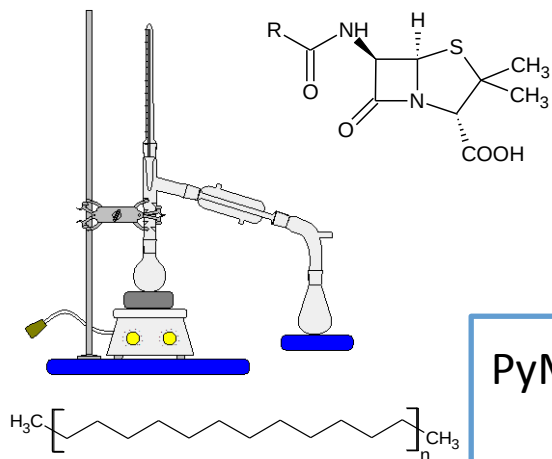
Chemický software

- Řada freeware programů* pro kreslení chemických struktur, vzorců, schémat
 - ChemSketch (<http://www.acdlabs.com/resources/freeware/chemsketch>)
 - kreslení chemických struktur, schémat, aparatur.
 - PyMOL (<http://pymol.org>)
 - VMD (<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd>)
 - vizualizace a práce s makromolekulami.

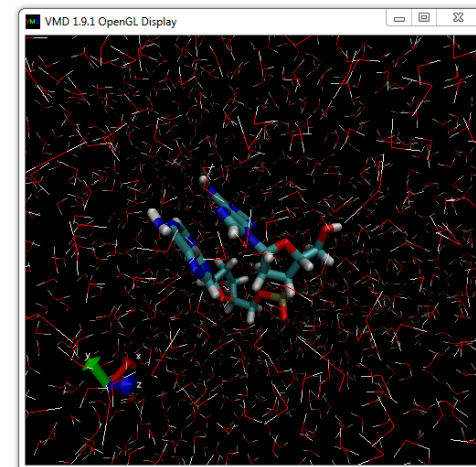
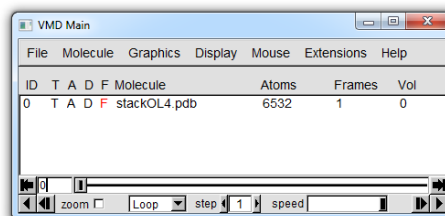
* Po krátké registraci na stránce.

Chemický software – příklady

ChemSketch



VMD



PyMOL

