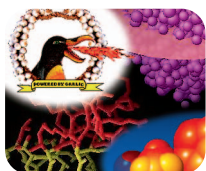


Visualisasi Molekul dengan garlic



garlic, free molecular visualization program, protein structure, DNA structure, PDB, molecular rendering, biological macromolecule, unix, linux, free software download, open source software, Damir Zucic.

Harus diakui bahwa sekolah-sekolah di Indonesia kebanyakan menggantungkan dirinya kepada program-program yang *proprietary*. Bahkan terkadang sampai kalangan beberapa universitas pun berpendapat bahwa *software* proprietary adalah solusi yang terbaik untuk komputasi, mengingat tren pasar dan ketersediaan dukungan dari vendor. Sebagai pendukung *free software*, langkah baiknya apabila kita mampu menerobos ke setiap pelosok ilmu pendidikan dan meningkatkan produktivitas dengan menggunakan *free software* tersebut. Tulisan kali ini akan menerobos ke bidang ilmu yang mempelajari molekuler dan memperkenalkan garlic untuk meningkatkan daya kreasinya.

Ya, Anda dapat menggunakan garlic untuk memvisualisasikan molekul, struktur protein, struktur DNA, makromolekul biologi dan hal sejenis lainnya dalam suatu antarmuka yang mudah. Jauh lebih mudah apabila Anda menggunakan program pengolah citra ataupun pengolah vektor untuk membuatnya secara manual. Dan jauh

lebih lebih stabil daripada program molekuler lainnya, menurut sang pembuat, **DR. Damir Zucic**. Segala visualisasi yang Anda buat akan membuat Anda terus, terus, terus, dan terus ingin mencipta, dengan bantuan garlic. Mari...

garlic dan cara penggunaannya

garlic lahir pada akhir bulan September 1998, ketika sang penciptanya memerlukan visualisator yang baik untuk gambar molekul. Bosan mencoba-coba dengan RasMol, akhirnya sang jenius ini mempelajari pemrograman X dan mempersembahkan garlic sebagai proyek pertamanya yang serius. Nama garlic dapat diartikan sebagai sebuah inti yang dilengkapi dengan berbagai pelengkap di luarnya, kurang lebih sama seperti bawang putih. garlic juga dapat diartikan sebagai singkatan dari **GNU, Analysis and Rendering, Linux, serta C** (bahasa C).

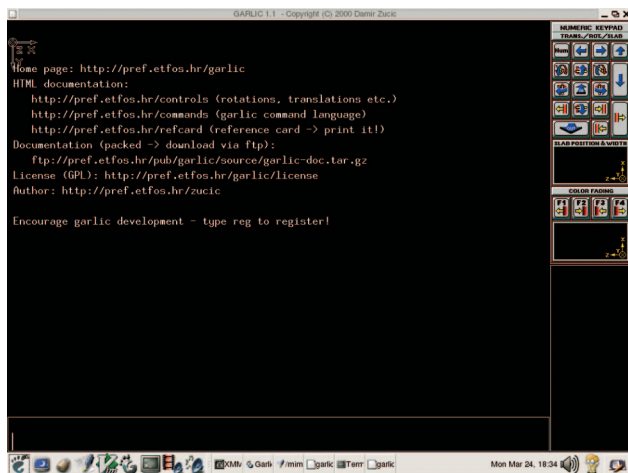
Anda bisa mendapatkan garlic di situsnya, <http://pref.etfos.hr/sources/garlic/>. Anda bisa membaca petunjuk

langkah demi langkah untuk melakukan kompilasi yang telah ditulis dengan sangat baik. Apabila menggunakan Debian, Anda dapat memberikan perintah `apt-get install garlic garlic-doc`. garlic telah dimasukkan sebagai paket standar dari distro Debian GNU/Linux.

Asumsikan garlic telah terinstalasi, Anda

bisa menjalankannya dengan perintah *garlic*. Dan sebuah window pun akan dihadirkan kepada Anda. Sebuah antarmuka yang menyebarkan apabila kita belum menyelam ke dalamnya, dan harus diakui sebagai antarmuka yang luar biasa seiring dengan penggunaan. (Hampir) semua dari kontrol program garlic dapat dilakukan dengan menggunakan keyboard. Hampir semua perintah dapat diberikan dalam bentuk pendek tiga karakter. Berikut ini kita akan melihat perintah-perintah dalam garlic.

ADD ADD	Melakukan ekspansi pada seleksi yang sedang aktif.
ANG ANGLE	Mendefinisikan derajat.
ATO ATOMS	Mengubah gaya penggambaran untuk atom.
BAC BACKBONE	Menggambarkan tulang belakang (backbone).
BACKG BACKGROUND	Mengubah warna latar belakang window utama.
BG BACKGROUND	Sama seperti BACKG.
BON BONDS	Mengubah gaya penggambaran rangka.
CAT CATCH	Mengaktifkan suatu struktur.
CEN CENTER	Mengubah sistem koordinat internal.
COL COLOR	Mengatur warna.
COM COMPARE	Membandingkan dua sekuens.
DIS DISCARD	Mengabaikan perubahan pada struktur.
DOC DOCK	Menyiapkan dua struktur untuk <i>docking</i> .
EXE EXECUTE	Menjalankan script garlic.
EXI EXIT	Keluar dari sesi garlic.
EXP EXPAND	Sama seperti ADD.
FAD FADING	Mengubah parameter color fading.
FG FOREGROUND	Mengubah warna window utama.
FON FONT	Mengubah font.
FOREG FOREGROUND	Sama seperti FG.



Gambar 1. Antarmuka garlic

HID HIDE	Menyembunyikan atom yang telah dipilih.
HYB HYBONDS	Membuat tulang-tulang hidrogen.
IGN IGNORE	Tidak melakukan apa-apa.
LAB LABELS	Menampilkan label.
LOA LOAD	Membuka file.
LOG LOG	menulis perintah ke dalam file log.
MON MONO	Berpindah ke modus mono.
MOV MOVE	Mendefinisikan object yang ingin dipindahkan.
NEI NEIGHBORHOOD	Menampilkan atau menyembunyikan object tetangga.
PAU PAUSE	Melakukan pause (untuk eksekusi script).
PLA PLANE	Manipulasi plane.
PLO PLOT	Melakukan plot untuk averaged hydrophob.
POS POSITION	Memindahkan struktur ke lokasi tertentu.
QUI QUIT	Sama seperti EXIT.
RAD RADIUS	Mendefinisikan ukuran jari-jari bola.
RAM RAMACHANDRAN	Menggambar plot Ramachandran.
REA READ	Sama seperti LOAD.
REG REGISTER	Melakukan registrasi garlic.
RES RESTRICT	Membatasi seleksi aktif.
ROT ROTATE	Melakukan rotasi atas struktur.
SAV SAVE	Menyimpan ke dalam file.
SCA SCALE	Memilih skala hydrophobicity.
SEL SELECT	Memilih atom.
SEQ SEQUENCE	

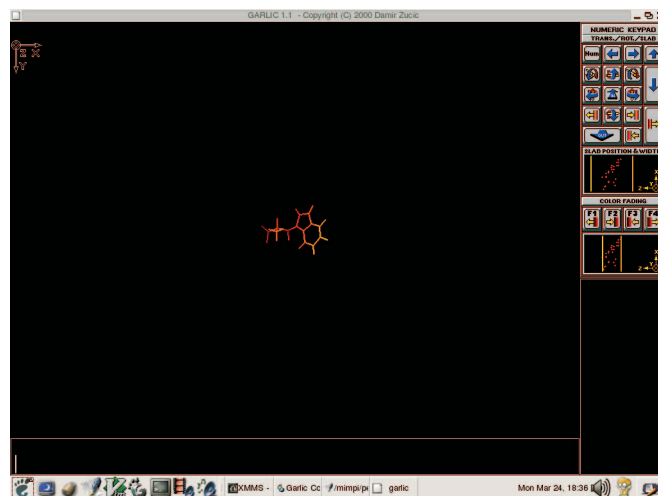
	Memanipulasi buffer.
SHO SHOW	Menampilkan atom terpilih.
SLA SLAB	Mengubah parameter slab.
SSB SSB	Mengubah gaya penggambaran untuk rangka disulfida.
STE STEREO	Mengubah ke modus stereo.
TAG TAG	Meng-assign tag untuk suatu struktur.
TAK TAKE	Sama seperti CATCH.
TBG TEXT_BACKGROUND	Mengubah warna teks latar.
TFG TEXT_FOREGROUND	Memeriksa warna teks.
TIT TITLE	Menambahkan judul ke window utama.
TRA TRANSLATE	Menerjemahkan struktur.
VEN VENN	Menggambar diagram Venn.
WHE WHEEL	Menggambar roda helikal.
WIN WINDOW	Mengatur lebar sliding pada window.

Setiap perintah tersebut dapat diketikan setiap saat. Selain perintah pada garlic, ada baiknya bagi kita untuk mengetahui tombol-tombol keyboard yang dapat digunakan untuk mempercepat navigasi. Anda juga bisa menggunakan mouse dan mengklik pada tombol yang tersedia. Untuk penggunaan keyboard, garlic menggunakan tombol fungsi (F1, F2...) dan keypad yang terletak di bagian kanan keyboard. Berikut ini adalah referensi singkat untuk navigasi menggunakan keyboard.

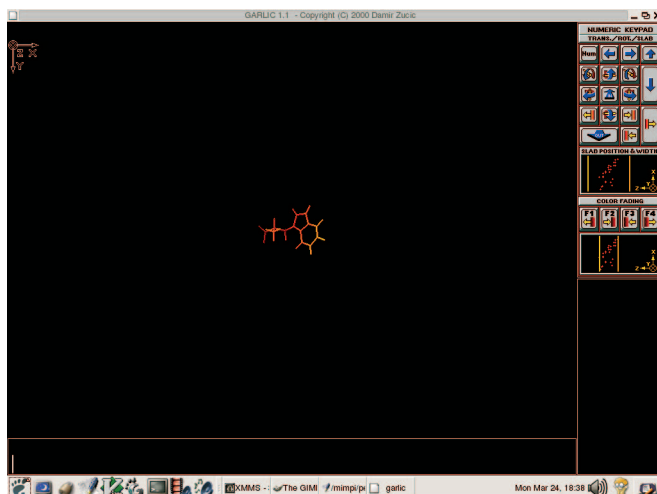
1	Memindahkan kembali permukaan slab pada sumbu sesuai arah positif.
2	Melakukan rotasi pada struktur searah jarum jam pada sumbu x.
3	Memindahkan kembali permukaan slab pada sumbu z sesuai arah: negatif.
4	Melakukan rotasi pada struktur searah jarum jam pada sumbu y.
5	Memindahkan struktur pada sumbu z sesuai arah positif.
6	Melakukan rotasi berlawanan arah jarum jam pada sumbu y.
7	Melakukan rotasi berlawanan arah jarum jam pada sumbu z.
8	Melakukan rotasi berlawanan arah jarum jam pada sumbu x.
9	Melakukan rotasi searah jarum jam pada sumbu z.
delete	Memindahkan permukaan slab yang dekat pada sumbu z sesuai arah positif.
enter	Memindahkan permukaan slab yang dekat pada sumbu z sesuai arah negatif.
/	Memindahkan struktur ke kiri.
*	Memindahkan struktur ke kanan
-	(minus) memindahkan struktur ke atas
+	(plus) memindahkan struktur ke bawah.
F1	Memindahkan permukaan warna belakang pada sumbu z sesuai arah positif.
F2	Memindahkan permukaan warna belakang pada sumbu z sesuai arah negatif.



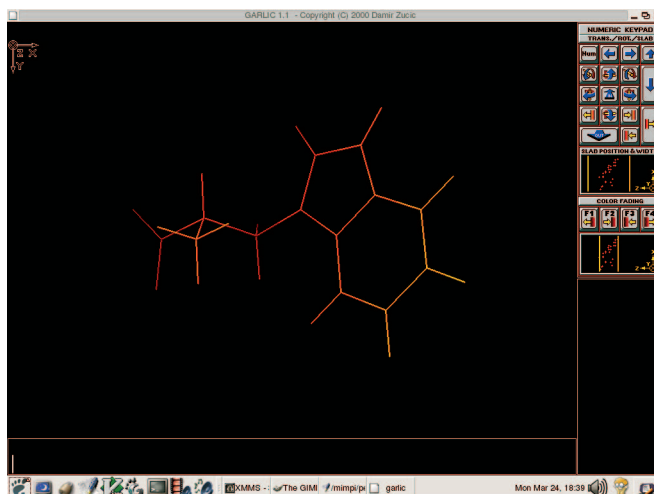
▲ Gambar 2. Membuka struktur dari file



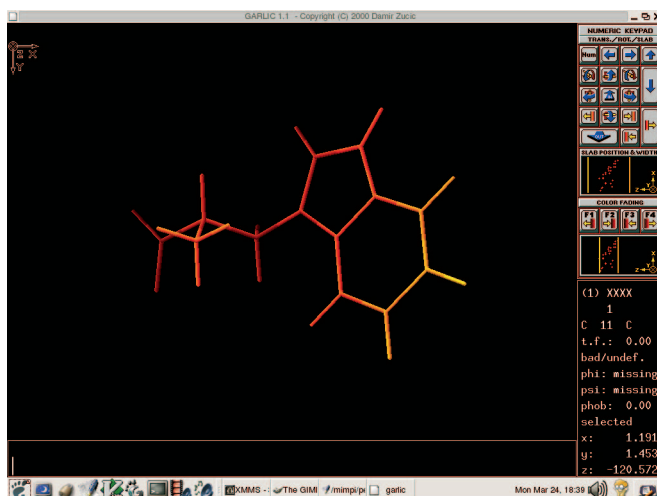
▲ Gambar 3. Merotasikan struktur



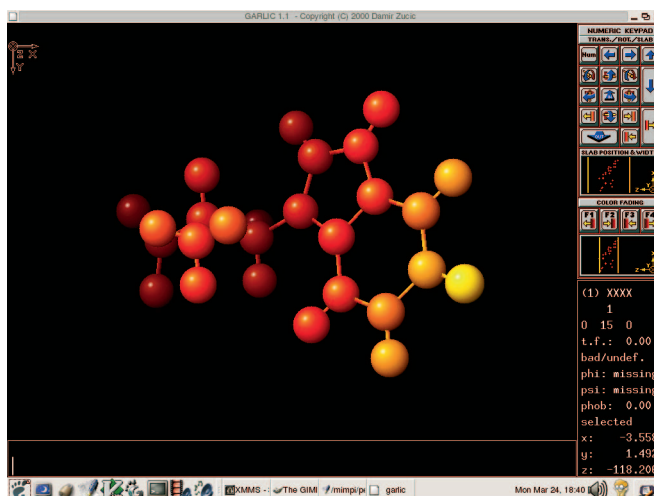
▲ Gambar 4. Memindahkan struktur



▲ Gambar 5. Mendekatkan struktur



▲ Gambar 6. Memodifikasi ukuran rangka



▲ Gambar 7. Mengubah gambar atom menjadi gambar bola

F3	Memindahkan permukaan warna depan pada sumbu z sesuai arah positif.
F4	Memindahkan permukaan warna depan pada sumbu z sesuai arah negatif.
Escape	Kembali keodus penggambaran utama.

Efek dari kontrol-kontrol tersebut masih dapat dimodifikasi ukurannya dengan tombol pengubah berikut ini:

shift	besar
alt_shift	besar sekali
control	kecil
shift_control	kecil sekali

Sehingga penekanan alt_shift / akan memindahkan struktur ke kiri dalam jarak yang sangat besar.

Mulai! Mulai! Mulai!

Berikut ini kita akan memodifikasi sebuah struktur asam amino tunggal yang disediakan dalam bentuk yang sangat sederhana menjadi bentuk visualisasi yang mencengangkan! Anda bisa melupakan mouse untuk sementara.

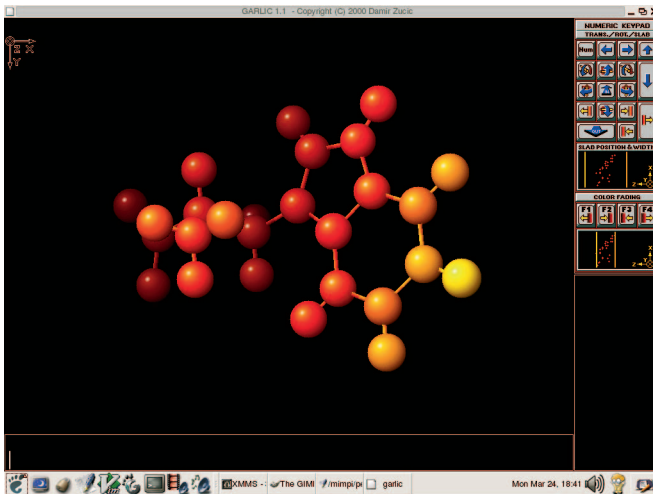
Setiap langkah akan melibatkan penggunaan tombol-tombol keyboard. Langkah-langkahnya adalah:

1. Jalankan garlic. Setelah dijalankan, garlic akan menampilkan sebuah window.
2. Kita perlu menggunakan sebuah struktur yang telah disediakan garlic. Untuk itu, kita perlu membuka sebuah file dengan nama trp.pdb. File tersebut umumnya terletak di /usr/share/doc/garlic/examples/. Cobalah mencari ke lokasi lain

apabila distro Anda meletakkannya di tempat yang berbeda. Perhatikan juga prefix kompilasi apabila Anda melakukan kompilasi sendiri. Berikan perintah:

```
loa /usr/share/doc/garlic/examples/
trp.pdb
```

- Sekarang, seharusnya area kerja garlic Anda telah menampilkan sebuah struktur asam amino. (lihat Gambar 2.)
3. Bermain-mainlah dengan tombol 4,6,2 dan 8 untuk melakukan rotasi. Anda juga dapat menggunakan perintah rot untuk merotasikan struktur. Contoh penggunaan perintah rot adalah: rot x 90 untuk merotasikan struktur sebesar 90 derajat pada sumbu x. Setelah

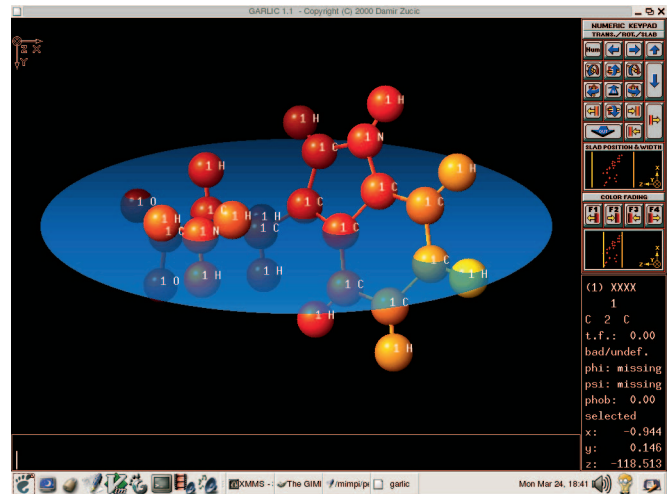


▲ Gambar 8. Memberikan kesan membara pada atom

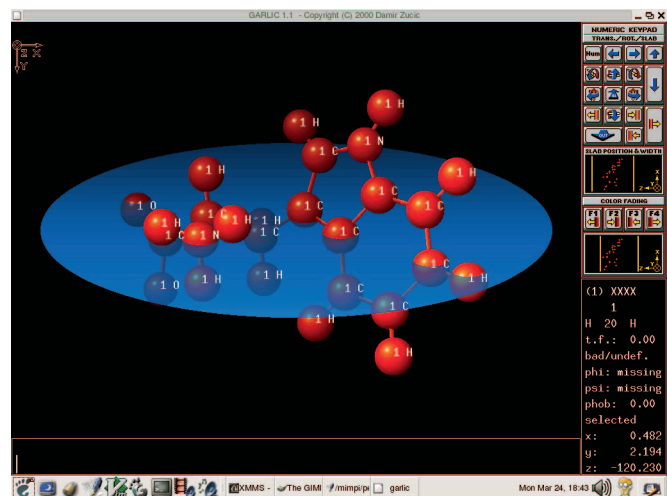
- mencoba, kembalikanlah struktur dalam pandangan awal. (lihat Gambar 3.)
4. Bermain-mainlah dengan tombol / , * , - dan + untuk melakukan perpindahan posisi struktur. Anda dapat pula menggunakan perintah pos untuk memindahkan struktur ke posisi yang spesifik. Contoh penggunaan pos adalah: pos 0 0 0 yang akan memindahkan struktur ke tengah-tengah layar. Setelah selesai mencoba, berikan perintah pos 0 0 0. (lihat Gambar 4.)
5. Berikan perintah pos 0 0 -120 untuk mendekatkan struktur ke mata kita. (lihat Gambar 5.)
6. Berikan perintah bon 0 untuk menggambar rangka dengan ukuran pixel 0. Karena digambar dengan ukuran pixel 0, maka rangka menjadi tidak kelihatan. Anda juga bisa mencoba ukuran rangka yang lain dengan memberikan nilai dari 0 sampai 5 untuk perintah bon. Setelah mencoba-coba, berikan perintah bon 4. (lihat Gambar 6.)
7. Berikan perintah ato bal untuk menggantikan gambar atom menjadi gambar bola. Untuk memperindah gambar atom, Anda mungkin menginginkan parameter ba2 untuk perintah ato. Selain bal dan ba2, Anda bisa juga mencoba big, bi2, spa, sp2. Setelah mencoba-coba, berikan perintah ato ba2. (lihat Gambar 7.)

8. Sekarang kita akan bermain-main dengan warna. Anda bisa mencoba untuk memberikan perintah col dengan nilai-nilai berikut sebagai parameternya: *red, green, blue, yellow, cyan, magenta, white, yellow-green, cyan-grezen, cyan-blue, magenta-blue, magenta-red, orange, hot, cold, cpk*. Setelah mencoba-coba, berikan perintah col hot. (lihat Gambar 8.)
9. Sebagai sentuhan akhir, berikan perintah plane dan label. Bagaimana pendapat Anda tentang struktur asam amino kita sekarang? Bagaimana perbandingan dengan gambar awal? (lihat Gambar 9.)
10. Kreasikan struktur asam amino Anda dengan menekan tombol F1, F2, F3, dan F4. Jadikanlah ini sebagai sentuhan personal Anda yang penuh kreativitas! (lihat Gambar 10.)

Berikut ini adalah petunjuk bagi Anda yang ingin bekerja dengan beberapa struktur sekaligus. Anda harus



▲ Gambar 9. Penambahan plane dan label



▲ Gambar 10. Sentuhan personal struktur asam amino

melakukan loa sebanyak jumlah struktur apabila semuanya disimpan di dalam file. Kemudian berikan perintah cat <n> untuk memilih struktur dimana n adalah nomor urut struktur dimulai dari 1. Setelah berhasil memilih suatu struktur, Anda bebas untuk memodifikasinya seperti langkah-langkah sebelumnya. Untuk keluar tanpa menyimpan Anda bisa menggunakan perintah dis all. Untuk menyimpan berikan perintah sav.

Bagaimana kesan Anda tentang program ini? Belajar kimia dan biologi menjadi lebih menyenangkan? Mari kita buktikan bahwa sekolah akan lebih menyenangkan apabila kita menggunakan sistem operasi GNU/Linux dan free software lainnya. Salam.👤
Noprianto (noprianto@infolinux.co.id)