



Session II, Tuesday, June 23

L4

SYSTÉM PRO SPRÁVU VZORKŮ POMOCÍ INTERNETU: CESTA OD JEDNODUCHÉ TABULKY K MONSTRU

M. Dušek¹, K. Poruba²

¹Fyzikální ústav AVČR, v.v.i., Na Slovance 2, 182 21 Praha, Česká Republika

²Kamil Poruba, Hrachovec 140, Valašské Meziříčí

dusek@fzu.cz

Tato práce prezentuje internetové rozhraní, které unifikuje a zjednodušuje práci s výsledky měření. Obracíme se především na laboratoře zabývající se charakterizací materiálů a konkrétně vycházíme ze zkušeností dlouholetého provozu laboratoře RTG difrakce na monokrystalech ve Fyzikálním ústavu.

V laboratoři, která měří velké množství vzorků od různých uživatelů, po čase neodvratně vyvstane otázka, jakým způsobem si zaznamenávat informace o vzorcích. Například kdy byl který vzorek změřen, jestli nemá být přeměřen, jaké zajímavosti (dvojčatění, modulace, fázové přechody) byly pozorovány, jestli data vzorku byla nakonec použita pro přípravu publikace. Pokud je měřených vzorků opravdu hodně (Obr. 1), může být požadavek typu “doplňte, prosím, podrobnosti o upřesňování 2-bromo-3-phenylpropenal-thiosemicarbazonu” noční můrou, protože v době přípravy publikace nemusíme již ani vědět, kdy se látka měřila, pod jakou zkratkou byla nazvána a mnohdy ani kdo ji vlastně poslal.

Prvním krokem k řešení je vytvoření tabulky, kam si vzorky můžeme zapisovat. Jakmile však taková tabulka přesáhne tisíc řádek, dostavuje se pocit, že ani tabulka není zrovna nejprehlednější řešení a že by bylo vhodné pro každého uživatele zřídit zvláštní tabulku. Počet uživatelů a jejich tabulek utěšeně narůstá a nastává potřeba vyhledávat informace mezi tabulkami. Převedení jednotlivých tabulek jako stránek do Excelu vyřeší řadu problémů, ale přepisování informací z Excelu do mailu pro uspokojení neodbytných tazatelů začíná být také velmi pracné a možná, říkáme si, by se to mělo všechno dát na internet, aby si uživatelé mohli potřebné informace hledat sami. Jelikož ne každý uživatel snese, aby ostatní viděli, co měří a jak to vyšlo, jednotlivé uživatelské tabulky na internetu musí

dostat oddělená přístupová práva. Tato práva musí někdo přidělovat a uvažovaný internetový systém začíná získávat hierarchickou strukturu. Při přemýšlení nad typy uživatelů a jejich právy, nad tím, jak by se měl systém chovat a co by všechno do něho mělo jít ukládat, dospějeme záhy k smutnému zjištění, že abychom si sami napsali takový program, museli bychom změnit profesi, ale pak už bychom ho nepotřebovali. Z tabulky se stává monstrum - vyhlašujeme pátrání po IT specialistech!

S internetovými systémy pro správu čehokoli máme v České republice odstrašující zkušenosti. Pracovníci Akademie věd mají své Verso, program nabízející nejkomplexnější a nejsofistikovanější cestu, jak při objednání papírových kapesníků využít beze zbytku svoji pracovní dobu; ministra Drábka jeho systém smetl; registr vozidel je nyní pro jistotu tesán do kamenných tabulek; lékaři milují svůj stále rušený nikdy nezrušený IZIP. Vývojáři těchto systémů se zásadně nezajímají o názory uživatelů, protože dlouholeté zkušenosti založené na ignorování všech faktů jsou nejlepší zárukou, že systém nebude fungovat tak, jak má, a že kontinuální pokusy o jeho zprovoznění přinesou firmě léta plodné spolupráce s obětí. Abychom se těchto problémů vyvarovali, vznikl popisovaný systém ve spolupráci experimentátora (MD) a studenta (KP), přičemž MD věděl již na začátku skoro přesně, co chce, zatímco KP, vycepaný středoškolským studiem, byl ochoten trpělivě ladit systém za provozu a naslouchat stále se někam posunujícím požadavkům. Systém jsme začali prakticky používat okamžitě po vzniku „tabulek s přístupovými právy“ a průběžně jej připomínkovali jak členové laboratoře, tak někteří trpěliví externí uživatelé. Vývoj zabral skoro celý rok a bude ještě nějaký čas pokračovat,



Obrázek 1. Výchozí situace vhodná k úvahám o zavedení systému pro správu vzorků.

Last messages

Show entries Search:

Date	From	To	Message	Sample name	Answered	FULL
2015-05-30 21:58:11	BEIbali	-	Dear Michal, please give me your solution from ...	b730_SrNIV	✘	FULL
2015-05-29 00:02:50	MDusek	-	The sample was a twin but overlaps are small an ...	b730_SrNIV	✘	FULL
2015-05-28 16:38:08	BEIbali	-	Hi Michal, could you please send me such measu ...	b730_SrNIV	✘	FULL
2015-05-29 12:30:19	MDusek	-	Hi Brahim, I have discovered the sample, I am ...	b704_Li	✔	FULL
2015-05-24 12:22:19	MDusek	-	Hi Brahim, I cannot find the sample. Could you ...	b704_Li	✔	FULL
2015-05-22 20:14:17	Admin	-	Hi Brahim, Not yet but I will make it during ...	b704_Li	✔	FULL
2015-05-22 11:38:15	BEIbali	-	Hi Michal, I am curious to know if you measure ...	b704_Li	✔	FULL
2015-05-09 18:02:22	BEIbali	-	Hi Michal, please do b704 as priority when you ...	b704_Li	✔	FULL
2015-05-28 23:36:15	MDusek	-	Hi Brahim, Yes, indeed, if the structure is ne ...	b709_CF3	✔	FULL
2015-05-28 21:54:47	BEIbali	-	Hi Michal, if the structure is new, it must be ...	b709_CF3	✔	FULL

Showing 1 to 10 of 100 entries Previous **1** 2 3 4 5 ... 10 Next

Obrázek 2. Část stránky "News" po přihlášení do systému.

díky použitému postupu ale celou dobu víme, že vzniká přesně to, co jsme potřebovali.

Základem systému je hierarchie uživatelů. Na vrcholu stromu stojí Admin, který je první po Bohu a smí skoro všechno. Následuje typ uživatele „Responsible“, tj. osoba odpovědná za měření a počítání vzorků, které jí přiřadil Admin. Responsible má plná práva ke svěřeným vzorkům, může tedy měnit libovolné údaje, vkládat a rušit výsledky, ale nesmí vzorky smazat. Nejlimitovanější práva má ten, bez kterého by to nefungovalo, tedy typ uživatele „Owner“, což je osoba vlastníci vzorky. Owner vkládá do systému své vzorky a pak už jen čeká na jejich změření a stěžuje si na pomalost procesu a nedokonalost výsledků na speciálním stěžovacím zařízení. Systém je otevřený, takže

Responsible může mít své vlastní vzorky, čímž pak pracuje podle ptydepe výzkumných center v uživatelském režimu. Každá změna, která se udála se vzorky, se zapisuje do systému a přichází těm, kterých se týká, ve formě e-mail digestu.

Po připojení do systému se ukáží nejnovější zprávy o vzorcích (Obr. 2) a tabulka vzorků náležející danému uživateli (Obr. 3). V tabulce je možné vyhledávat, vzorky různě řadit, vybírat z nich skupiny a aplikovat na ně skupinové operace. Odkaz FULL ukáže pro každý vzorek plnou informaci o vzorku (Obr. 4). Každý vzorek má status, který definuje stav prací na vzorku, políčko na chemické schéma nebo složení, informační okénko na základní informace, políčka na krystalografické údaje,

Samples assigned to "MDusek"

Show entries Search:

ID	Last change	Sample name	Status	Owner	ATT	HIST	FULL
470	2015-05-27 12:30:12	Cobtc3HA	finished - only data required	LSmolko	ATT (1)	HIST	FULL
469	2015-05-27 12:13:36	Cobtc2HA	waiting	LSmolko	ATT (2)	HIST	FULL
468	2015-05-27 12:12:07	Cobtc1HA	finished - only data required	LSmolko	ATT (1)	HIST	FULL
451	2015-05-20 17:40:32	b739_LBN	waiting	BEIbali	ATT (0)	HIST	FULL
337	2015-05-11 11:11:32	b216_EB75	discarded - known	BEIbali	ATT (1)	HIST	FULL
336	2015-05-26 18:52:33	b738_NiGa.2.	finished - only data required	BEIbali	ATT (2)	HIST	FULL
335	2015-05-26 18:47:29	b737_BaCr3	finished - only data required	BEIbali	ATT (2)	HIST	FULL
334	2015-05-11 11:11:32	b736_KHo	finished	BEIbali	ATT (2)	HIST	FULL
333	2015-05-26 18:41:46	b735_CsH	finished - only data required	BEIbali	ATT (2)	HIST	FULL
332	2015-05-20 11:53:12	b734_CoGa	measured	BEIbali	ATT (0)	HIST	FULL

Showing 1 to 10 of 154 entries Previous **1** 2 3 4 5 ... 16 Next

Please note that Shift + sorting button makes sorting by secondary criterion

Obrázek 3. Seznam vzorků přiřazený uživateli MDusek.



Prev | Next

Sample Page for "Cobtc3HA" [ID: 470]

Owner: LSmolko Creation date: 2015-05-25 Urgent

Responsible: MDusek Last change: 2015-05-27 12:30:12 Status: finished - only data required

[Invite a guest](#) [Chemical scheme](#) [DELETE](#) [Sample photo](#) [DELETE](#)

Composition / Formula: $\text{Co}(\text{btc})_2$, $\text{btc}=4,7\text{-difenyl-2,9-dimetyl-1,10-}$ [Browse...](#) [Browse...](#)

Notes:

Wavelength: 1.54184 Temperature: 120.00(10) Sample type: Single crystal

Peaks along a' [DELETE](#) Peaks along b' [DELETE](#) Peaks along c' [DELETE](#) Experimental frame(s) [DELETE](#)

Unit cell: 8.01047(14) 23.7056(3) 12.7186(2) 90.0 98.6236(17) 90.0 Volume: 2387.86(6)

Modulation vector(s): -- Symmetry: --

R(obs): -- GOF: -- Flack: -- Twin volume fractions: --

Keywords (select from the list or type in English with ";" as a delimiter): -- Please select --

[Structure plot](#) [DELETE](#) [Browse...](#)

CIF: [Link](#) Results: [Link](#) Launch [PUBCIF](#) Launch [Jmol](#) [Attachments \(1\)](#) [History](#)

[Update](#)

Communication box

Write your message...

B I

Obrázek 4. Plná informace o vzorku.

kteří se zaplňují automaticky, pokud je k dispozici CIF. Systém umožňuje vložit také fotografii vzorku, experimentální obrázek z CCD detektoru, apod. Následuje okénko na diskuzi s majitelem vzorku, takže tento se například může zeptat, kdy již bude vzorek konečně změřen, aniž by bylo nutno zjišťovat, o jaký vzorek se jedná. Ke každému vzorku lze také zavést předdefinovaná nebo vlastní klíčová slova, pokud se nám zdá, že vzorek má nějakou zajímavou vlastnost využitelnou například pro přednášky. Typické klíčové slovo je „twin“.

Odkaz Attachments ukazuje na seznam příloh, kde mohou být výsledky, obrázky a další potřebné soubory. Přílohy mohou být pro majitele vzorku neviditelné, takže členové laboratoře mohou navzájem výsledky konzultovat

bez nebezpečí, že majitel si výsledek stáhne a předčasně opublikuje. Pro vzájemnou konzultaci vzorků slouží tlačítko „Invite a guest“, kterým můžeme údaje o vzorku zpřístupnit jinému uživateli.

Právě vyvíjenou funkci popisovaného systému je možnost přiřadit jeden nebo více vzorků ke vznikající publikaci. Rukopisy publikací budou pod profilem uživatele na samostatné stránce, ale s vazbou na vzorky, takže bychom již neměli upadat do rozpaků, kterých dat se externě napsaný rukopis vlastně týká. Jakmile bude rukopis publikován, dostanou s ním svázané vzorky status „published“, takže bude možné snadno sledovat úspěšnost vzorků.

Legitimní námitkou proti prezentovanému systému může být pracnost vkládání údajů. Částečně je vyřešena tím, že program automaticky interpretuje CIF výsledku a políčka s krystalografickou informací o vzorku jsou tak zaplněna bez intervence uživatele. Dalším řešením směrem k urychlení práce se systémem je makrojazyk, který umožňuje některé operace automatizovat a spojit přímo s provozem přístroje. Například je možné, aby se po ukončení měření automaticky změnil status vzorku na „measured“ a aby se do tabulek zapsaly nalezené mřížkové parametry.

V současné době je pod novým systémem okolo 2000 vzorků. S takovým počtem začíná již být zajímavý problém vyhledávání. V současnosti můžeme vzorky vyhledávat z tabulky vzorků (Obr. 3), a to podle textových řetězců viditelných v tabulce anebo podle textových řetězců přítomných v plné informaci o vzorku. Ve vývoji je vyhledávání podle základní buňky a řazení vzorků podle jejich podobnosti.

Systém je založen na potřebách strukturální analýzy monokrystalů. V dalším vývoji bychom rádi svázali obsah tabulek a chování systému s informací o typu vzorku. Zvolíme-li jako typ vzorku prášek (místo monokrystalu), měly by se přinejmenším změnit formáty na vkládané obrázky, protože nejzajímavější grafickou informací bude práškový profil. Změna se bude týkat také faktorů shody. V dalším kroku bychom chtěli zařadit elektronovou difrakci, která má také speciální požadavky.

Spolupráce MD a KP měla komerční základ – spolupráce mezi Fyzikálním ústavem (MD) a týmem Dreaw (KP, <http://www.dreaw.cz/>). Vzniklý systém může být instalován zdarma, ale jeho úpravy jsou zpoplatněné.

L5

ATOMIC RESOLUTION CRYSTAL STRUCTURE OF ASPARTIC PROTEASE – PEPSTAIN COMPLEX

Jiří Brynda

Ústav organické chemie a biochemie, Akademie věd České republiky, Flemingovo nám.2, Praha 6

Opportunistic pathogens of the genus *Candida* cause infections representing a major threat to long-term survival of immunocompromised patients. Virulence of the *Candida* pathogens is enhanced by production of extracellular proteolytic enzymes and secreted aspartic proteases (Saps) are therefore studied as potential virulence factors and possible targets for therapeutic drug design. *Candida parapsilosis* is less invasive than *C. albicans*, however, it is one of the leading causative agents of yeast infections. Here we report three-dimensional crystal structure of Sapp2p from *C. parapsilosis* in complex with pepstatin A at atomic resolution 0.825 Å. The structure of Sapp2p was determined from protein isolated from its natural source

and represents the structure on highest resolution of all aspartic proteases. Overall fold and topology of Sapp2p is very similar to the archetypic fold of monomeric aspartic protease family and known structures of Sap isoenzymes from *C. albicans* and Sapt1p from *C. tropicalis*.

Thanks to atomic resolution it was possible to assign protonation of functionally important side-chains. Positions of many hydrogen atoms was clearly visible from difference electron density map and the network of stabilizing hydrogen bonds became well guessable. New parallelized version SHELXL program allows us to use least squares sparse matrix protocol to calculate ESDs of all refined parameters.

L6

SERVICES OFFERED BY X-RAY DIFFRACTION AND BIO-SAXS CORE FACILITY OF CEITEC BRNO

Michal Babiak

*CEITEC - Central European Institute of Technology, Brno, Czech Republic
Department of Chemistry, Faculty of Science, Masaryk University, Brno, Czech Republic*

Since the installation of instrumentation (in the first half of 2013) by Rigaku, more than 900 samples of “small molecule” samples and about 2000 samples of proteins were mounted on goniometers of diffractometers.

The universal diffraction system and protein diffraction system of the X-ray Diffraction and Bio-SAXS Core Facility are based on rotating anode generators with multilayer optics, partial axis goniometers, CCD detectors and liquid nitrogen based low temperature systems. The protein diffraction system is also equipped with ACTOR system for measurement automation.

- Both diffraction system allow customers to request these types of services:
- Test of a diffraction quality of protein crystals, derivatives, cryoprotectants etc. prior data collection

- Collection of diffraction data with crystals of biological macromolecules
- Data collection and solving of the crystal structures with non-biological single crystals
- Collection of high angle diffraction data with non-biological single crystals
- Collection of diffraction data with small and/or weakly diffracting non-biological single crystals
- Minor material supplies (e.g. accessories, liquid nitrogen)

The presentation will focus on technical parameters of diffraction equipment, details about listed services and their availability, positive and negative experience earned during almost two years of operation and also on presentation of some result examples.

L7

BIOLOGICAL SMALL ANGLE SCATTERING AT CEITEC-MU

Tomáš Klumpler

Full paper on page 127.