

Session III, Thursday, November 26

L13

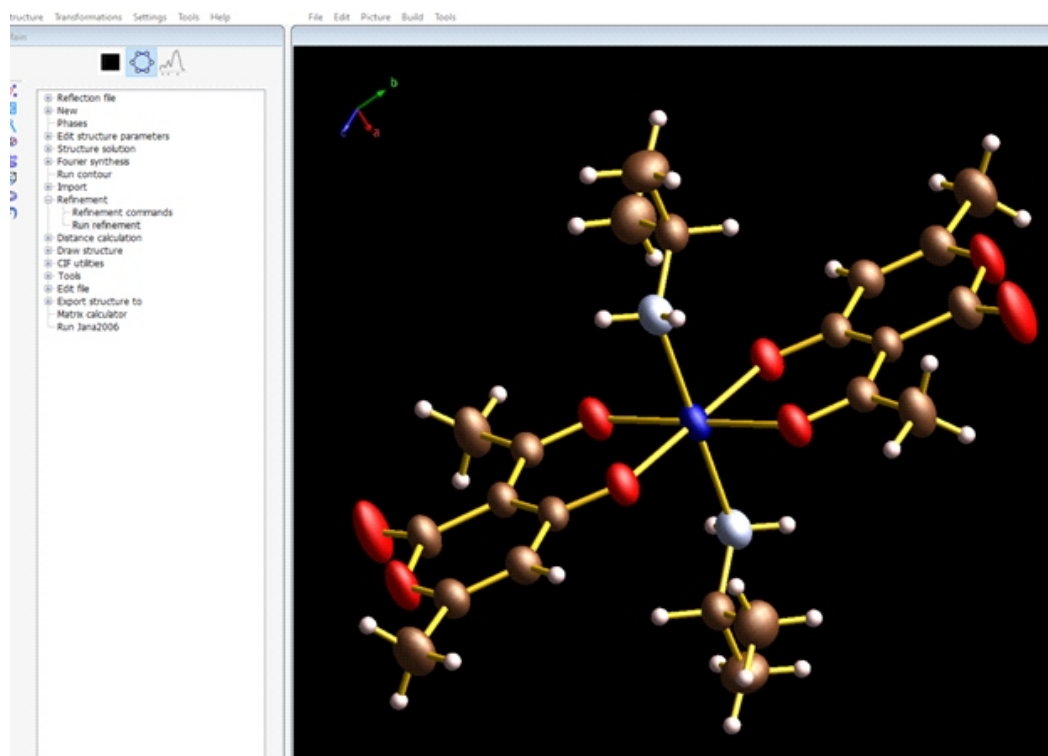
JANA2020, A NEW VERSION OF THE CRYSTALLOGRAPHIC COMPUTING SYSTEM**M. Dušek, V. Petříček***Institute of Physics of the Czech Academy of Sciences, Na Slovance 2, 182 21 Praha 8, Czech Republic
dusek@fzu.cz*

Program Jana [1] si během svého více než třicetiletého vývoje vydobyl světové renomé jako krystalografický systém pro řešení komplikovaných struktur. Zpočátku byl úzce zaměřen na problematiku modulovaných struktur řešených z monokrystalových dat, později propojil řešení standardních a modulovaných struktur v jednom systému, od roku 2006 bylo možné program použít i na prášková data [2] a od roku 2010 se intenzivně rozvíjely moduly pro řešení magnetických struktur [3]. Program Jana je propojen s programy Superflip [4] pro řešení fázového problému v libovolné dimenzi, s programem Dyngo [5] pro upřesňování struktur z elektronové difrakce za využití dynamické teorie, s programem MCE [6] pro vizualizaci elektronové hustoty, s internetovým nástrojem ISO-DISTORT [7] pro analýzu reprezentací a s několika dalšími programy. Ačkoli program Jana nikdy nedosáhl rozšíření srovnatelného s programem SHELX, v některých oblastech je dominantním nástrojem a roční počet citací stabilně dosahuje několika set.

S narůstající komplexností programu vyvstal problém, jak jej uživatelsky zjednodušit. Cílem našeho snažení bylo

vytvořit program, kde jednoduché úlohy půjde vyřešit zcela intuitivně, zatímco pro složité krystalografické úlohy, kde se předpokládají nadstandartní znalosti uživatele, budou intuitivní alespoň základní společné postupy. Pro tento cíl bylo nutné vytvořit kreslicí program, který jednak v reálném čase ukazuje změny struktury během upřesňování, ale současně umožní i editaci strukturálních parametrů jednotlivých atomů nebo jejich skupin. Za tímto účelem bylo zcela přepsáno grafické rozhraní programu Jana2006, aby bylo možné využít knihovny OpenGL, čímž vzniknul nový program Jana2020, jehož beta verzi zde představujeme.

Program Jana2020 obsahuje všechny dosavadní možnosti programu Jana2006, ale má zcela jiné ovládání. Uživatel má k dispozici rozvinovací lištu s jednotlivými nástroji a dále přepínač (Obr. 1), kterým si volí, co by měl program vizualizovat. Momentálně lze volit buď obrázek struktury, nebo práškový profil, a v obou případech lze pozorovat probíhající změny v důsledku upřesňování anebo editace strukturálních nebo profilových parametrů. V dalších verzích bude nabídka vizualizace rozšiřována,



Obrázek 1. Část okna programu Jana2020. Pomocí vyznačené velké ikony vlevo nahoře je jako cíl vizualizace nastavený obrázek struktury. V rozvinovacích nástrojích vlevo je vybrané upřesňování struktury. Po spuštění upřesňování struktury (Run refinement) bude obrázek aktualizován po každém upřesňovacím cyklu.



například o mapu elektronové hustoty. Prostřednictvím obrázku struktury lze editovat strukturální parametry atomů, spojovat atomy do pevných těles a přidávat další polohy těchto těles. Ve vývoji je propojení obrázku s mapou elektronové struktury a mnoho dalších možností, které se nabízejí díky existenci kreslicího nástroje.

Program Jana2020 bude začátkem prosince 2020 k dispozici na stránkách <http://jana.fzu.cz>

1. V. Petříček, M. Dušek, L. Palatinus, *Z. Kristallog. – Cryst. Mater.*, **229**, (2014), 345.
2. M. Dušek, V. Petříček, M. Wunschel, *J. Appl. Crystallogr.*, **34**, (2001), 398.
3. V. Petříček, J. Fuksa, M. Dušek, *Acta Cryst.*, **A66**, (2010), 649.

4. L. Palatinus, G. Chapuis, *J. Appl. Crystallogr.*, **40**, (2007), 786.
5. L. Palatinus, V. Petříček, C.A. Correa, *Acta Cryst.*, **A71**, (2015), 235.
6. J. Rohlíček, M. Hušák, *J. Appl. Crystallogr.*, **40**, (2007), 600.
7. B.J. Campbell, H.T. Stokes, D.E. Tanner, D.M. Hatch, *J. Appl. Crystallogr.*, **39**, (2006), 607.

Tento příspěvek byl financován projektem LO1603 v rámci Národního programu udržitelnosti Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky.

L14

Examples of applications of program CRYSTALCMP for comparison of packing of molecular crystals

UKÁZKY POUŽITÍ PROGRAMU CRYSTALCMP PRO POROVNÁVÁNÍ PAKOVÁNÍ MOLEKULÁRNÍCH KRYSTALŮ

J. Rohlíček

Oddělení strukturální analýzy, Fyzikální ústav AV ČR, v.v.i. Na Slovance 1999/2
182 21 Praha 8
rohlicek@fzu.cz

Pravděpodobně každý krystalograf se dostal jednou do situace, kdy potřeboval porovnat dvě nebo více krystalových struktur organických nebo organokovových látek a hledal způsob a nástroj, jak to provést, aniž by nad tím zbytečně strávil čas navíc. Všechn ten čas uplynulý před monitorem, kdy se krystalografové pomocí ručního otáčení modelů krystalových struktur snažili mezi nimi najít podobnost, je němým svědkem toho, že nějaký nástroj pro tento účel je vhodné si osvojit.

V minulosti bylo publikováno několik metod pro porovnávání krystalových struktur [1-7]. Mezi uživatelsky přívětivé nástroje bych zařadil funkci Crystal Packing Similarity v programu Mercury [7], a programy COMPSTRU [8], xPac [9] a CrystalCMP [10]. Nástroj Crystal Packing Similarity je zpřístupněn uživateli jen v placené verzi programu Mercury. Program COMPSTRU je vytvořen jako online nástroj na stránkách Bilbao Crystallographic Server a programy xPac a CrystalCMP lze volně stáhnout.

Nástroje Crystal Packing Similarity, xPac a CrystalCMP používají podobný přístup pro porovnání pakování molekul v krystalových strukturách. Programy vyberou u každé porovnávané struktury reprezentativní molekulární klastř, kde je možné zvolit např. jen jeden typ molekuly (obvykle té největší ve struktuře). Následně provedou porovnání na základě rozdílů pozic molekul v obou klastřech. Jednotlivé implementace se liší ve způsobu porovnávání obou klastřů a v rychlosti porovnání. Metoda porovnání použitá programem COMPSTRU se od zbylých třech metod výrazně liší. Její přístup bych nazval jako více krystalografický. Program najde nejlepší transformaci základních buněk porovnávaných struktur a pak provede porovnání pozic atomů v základní buňce.

Uvedené nástroje určené pro porovnávání krystalových struktur se mezi sebou liší použitou metodou, uživatelským rozhraním a dostupností. Je tedy jen na uživateli, který z nich si nakonec vybere.

Jak už bylo zmíněno, metoda programu CrystalCMP je založena na porovnávání reprezentativního molekulárního klastř, do kterého je možné zahrnout jeden typ molekuly, obvykle té největší. Během porovnávání dojde k překrytí vygenerovaných molekulárních klastřů jednotlivých krystalových struktur a podobnost je spočítána jako odchylka středů překrývajících se molekul a úhlů natočení molekul od sebe. Výsledná podobnost (v tomto případě spíše rozdílnost) je dána vztahem:

$$P_{S_{a,b}} = D_c + wA_d$$

kde D_c je průměrná vzdálenost (v Å) středů překrývajících se molekul a A_d reprezentuje odchylku natočení překrývajících se molekul v prostoru. Hodnota w je volena uživatelem a reprezentuje váhu mezi D_c a A_d .

Větší váha je ve výchozím nastavení programu kladena na rozdíl natočení molekul v prostoru. Je to z toho důvodu, že stejné pakování není ani tak podmíněno stejnou pozicí molekul v prostoru, jako spíše jejich stejným natočením. Pomocí takto definované funkce $P_{S_{a,b}}$ je umožněno porovnávání molekulárních struktur, které byly změřeny za různých teplot. Objemová změna struktury má totiž na změnu $P_{S_{a,b}}$ funkce malý vliv. Lze tedy porovnávat pakování molekul ve strukturách, jejichž expanze je způsobena např. přítomností molekul solventů či koformerů různých velikostí, jako je tomu např. v tzv. solvatomorfních řadách.

Výsledkem porovnání programem CrystalCMP je podobnostní matice a z ní vypočtený dendrogram, který seskupuje jednotlivé látky podle podobnosti v číselné podobě. Samotné porovnání krystalových struktur je provedeno buď automaticky, nebo za interakce uživatele. Porovnání dvou krystalových struktur je v průměru provedeno během 0.5 s, což umožňuje během několika minut porovnat desítky krystalových struktur mezi sebou.

Program je napsán v jazyce C/C++, využívá knihovny OpenBabel pro generování SMILES definic a pro grafické rozhraní používá wxWidgets a OpenGL. Program je volně ke stažení na

adrese <http://sourceforge.net/projects/crystalcmp/>, kde lze také nalézt jeho zdrojový kód.

Tento příspěvek byl financován projektem LO1603 v rámci Národního programu udržitelnosti Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky,

- de Gelder, R.; Wehrens, R.; Hageman, J.A. A generalized expression for the similarity of spectra: application to powder diffraction pattern classification. *J. Comput. Chem.* **2001**, *22*, 273–289, doi:10.1002/1096-987X(200102)22:3<273::AID-JCC1001>3.0.CO;2-0.
- Hundt, R.; Schön, J.C.; Jansen, M. CMPZ – an algorithm for the efficient comparison of periodic structures. *J. Appl. Crystallogr.* **2006**, *39*, 6–16, doi:10.1107/S0021889805032450.
- Karfunkel, H.R.; Rohde, B.; Leusen, F.J.J.; Gdanitz, R.J.; Rihs, G. Continuous similarity measure between nonoverlapping X-ray powder diagrams of different crystal modifications. *J. Comput. Chem.* **1993**, *14*, 1125–1135, doi:10.1002/jcc.540141002.
- Valle, M.; Oganov, A.R. Crystal fingerprint space – a novel paradigm for studying crystal-structure sets. *Acta Crystallogr. A* **2010**, *66*, 507–517, doi:10.1107/S0108767310026395.
- Van Eijck, B.P.; Kroon, J. Fast clustering of equivalent structures in crystal structure prediction. *J. Comput. Chem.* **1997**, *18*, 1036–1042, doi:10.1002/(SICI)1096-987X(199706)18:8<1036::AID-JC C7>3.0.CO;2-U.
- Willighagen, E.L.; Wehrens, R.; Verwer, P.; de Gelder, R.; Buydens, L.M.C. Method for the computational comparison of crystal structures. *Acta Crystallogr. B* **2005**, *61*, 29–36, doi:10.1107/S0108768104028344.
- Chisholm, J.A.; Motherwell, S. COMPACT : a program for identifying crystal structure similarity using distances. *J. Appl. Crystallogr.* **2005**, *38*, 228–231, doi:10.1107/S0021889804027074.
- de la Flor, G.; Orobengoa, D.; Tasci, E.; Perez-Mato, J.M.; Aroyo, M.I. Comparison of structures applying the tools available at the Bilbao Crystallographic Server. *J. Appl. Crystallogr.* **2016**, *49*, 653–664, doi:10.1107/S1600576716002569.
- Gelbrich, T.; Threlfall, T.L.; Hursthouse, M.B. XPac dissimilarity parameters as quantitative descriptors of isostructurality: the case of fourteen 4,5'-substituted benzenesulfonamido-2-pyridines obtained by substituent interchange involving CF₃/I/Br/Cl/F/Me/H. *CrystEngComm* **2012**, *14*, 5454, doi:10.1039/c2ce25508a.
- Rohlicek, J.; Skorepova, E.; Babor, M.; Cejka, J. CrystalCMP: an easy-to-use tool for fast comparison of molecular packing. *J. Appl. Crystallogr.* **2016**, *49*, 2172–2183, doi:10.1107/S1600576716016058.
- O'Boyle, N.M.; Banck, M.; James, C.A.; Morley, C.; Vandermeersch, T.; Hutchison, G.R. Open Babel: An open chemical toolbox. *J. Cheminformatics* **2011**, *3*, 33, doi:10.1186/1758-2946-3-33.



Session IV, Thursday, November 26

L15

TEACHING CRYSTALLOGRAPHY ONLINE WITH MS TEAMS – COMMENTS, EXAMPLES

Radomír Kužel

Faculty of Mathematics and Physics, Charles University, Ke Karlovu 5, 121 16 Praha 2

A few months of this crazy year brought high concentration on online teaching in basically all levels of education. Of course, the least problematic is such teaching in universities where many things can be transferred to online form without significant losses and in certain cases even with some benefits. So, the only part that cannot be done online is practical work, in particular the work that should teach students some skills. Otherwise, there are no limits for interactive communication during the online teaching. However, it may be easier for the teachers rather than for students. It can be more difficult and/or unpleasant to sit at the computer several hours a day.

Universities are supporting different platforms for online teaching e.g. [1]. While for organizing of meetings I prefer to use Zoom [2, 3], for teaching I have decided to prepare everything in MS Teams [4] in the form developed by the Charles University [5] where it is easy to create a team for subject and assign there students from the list of students of the University and/or invited guests by e-mail or code.

In addition to common meetings, as e.g. in Zoom etc., there is a common space

Our faculty requires that all the presentations be recorded, and the records are available, in addition to presentations (ppt, pdf), to all relevant students till the end of semester. Both are saved in folder Files of MS Teams. This folder can also contain some other shared files e.g. of Office like Excel or Word files.

Probably the most useful part is Notebook that can contain different folders owned by teacher only, shared for all and owned by each individual student. In the shared folder anybody can write formatted text, draw, insert pictures, tables directly in Teams or in One Note application with a few more advanced features.

Students cannot see folders and pages of other students while the teacher can see everything. So, the teacher can easily click on the corresponding page of any student and see up-to-date information where the student is during his/her task. Teacher can also write directly to their document. Usually, it is working quite quickly if the Internet is not too slow. In Figure 1, there is a screen copy from the online course where the students (left column) got different symmetrical patterns (right), should draw elementary cell and corresponding symmetry elements, and determined the plane group from the list. In order, to make their life easier,

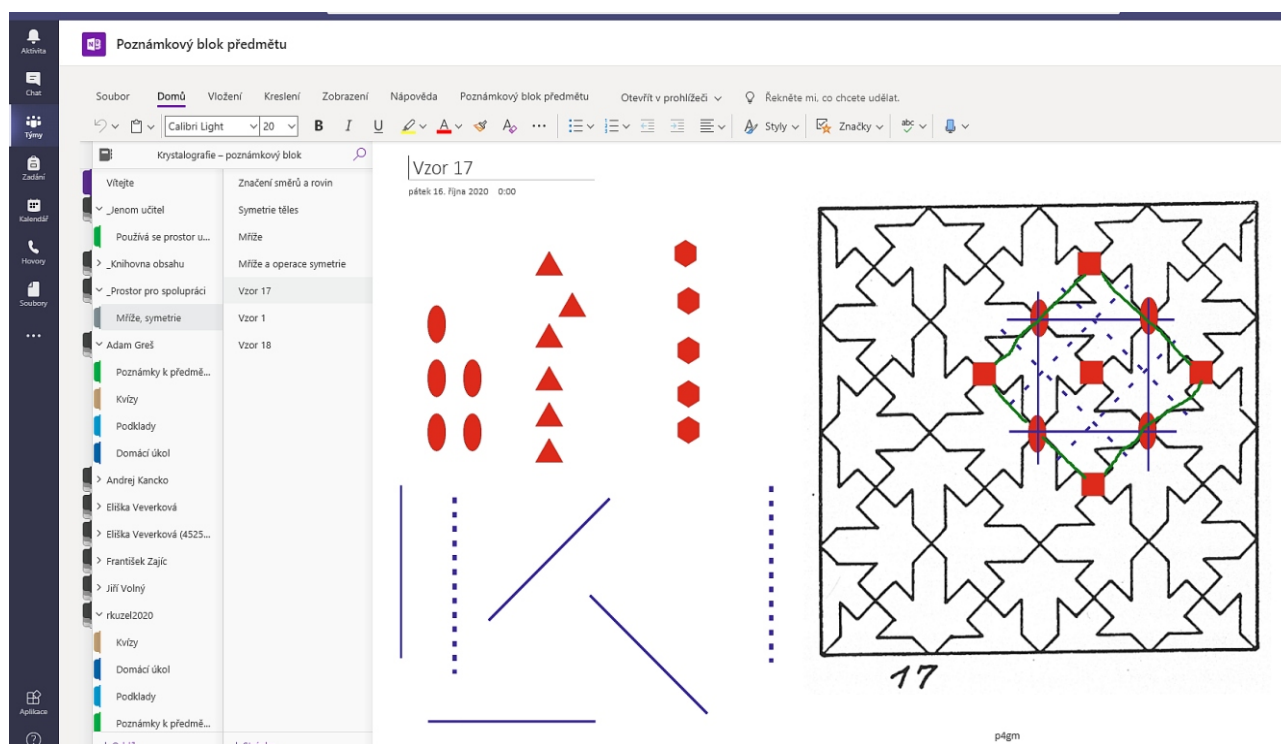


Figure 1. Copy of MS Teams screen during the task of determination of plane groups for different symmetrical patterns.

they could use a portfolio of all symbols and it was then sufficient to move specific symbols to relevant positions. A similar way was used for space groups (complete diagrams of general positions with symmetry elements or vice versa complete diagrams of symmetry elements with general positions, determination or estimation of the space group)

A little more complicated was preparation of *online practical course*. This is the basic problem of powder diffraction – determination of lattice parameter of unknown cubic phase and then also phase analysis of mixture of 3-6 phases. Since, the task consists mainly in evaluation, it was decided to adopt this also to online form. This practical part always begins with a short excursion in X-ray laboratory showing them a few instruments, description of powder diffractometer, preparation of different samples, specimen alignment and automatic measurement in symmetrical scan. So, everything was recorded to video and what was only missing for students was their own specimen preparation. This is followed by demonstration of fast evaluation

of powder pattern and generation of a file with peak parameters. Students used this output (each with different parameters) to index peaks according to procedure described on web link and determined the lattice parameter considering the instrumental aberrations. The first part is closed by looking into the Powder Diffraction File in order to find the phase. However, usually it is not found because the lattice parameter deviates from the database value from some reason. This reason is discussed.

In the second part, the pattern was evaluated in different software, the list of peaks was generated (2θ , d , I) and the students obtained scanned education edition of Hanawalt index and made the search. Finally, for homework, the students should download 30-days trial of program Match and use it for the phase analysis of the mixture. Each of the students received different dataset.

Finally, I think that such tools can be well used for teaching even if, hopefully, we will come back to more or less normal time.

Session V, Friday, November 27

L16

BASHELIXIR HAS NEW FEATURES AND NEW GUI

P. Kolenko^{1,2}, J. Stránský², M. Malý^{1,2}, T. Koval², J. Dohnálek²

¹Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering, Czech Technical University in Prague, Břehová 7, 115 19 Prague 1, Czech Republic

²Institute of Biotechnology of the Czech Academy of Sciences, Biocev, Průmyslová 595, 252 50 Vestec, Czech Republic
petr.kolenko@fffi.cvut.cz

Many computational tools to perform experimental phasing have been developed. Most of them are concentrated in the *CCP4* [1] and *PHENIX* [2] program packages. Recently, the command-line tool *baSHELIXir* [3] has been published to provide fast and efficient phasing protocols linked to the application of the *SHELX C/D/E* [4,5] program package. The program independently enables searches for the correct space group, screening of the solvent content parameter and high- and low-resolution diffraction limits. In *baSHELIXir*, *SHELXE* processes are parallelized to reduce the computational time and provide a thorough analysis of the computational results based on provided data.

Several cases have been selected to demonstrate the full applicability and capacity of *baSHELIXir*. They cover single-wavelength anomalous dispersion, multiple-wavelength anomalous dispersion with two to five datasets collected at different wavelengths, single isomorphous replacement with anomalous scattering and radiation-damage-induced phasing protocols.

baSHELIXir is a powerful tool for a thorough analysis of experimental phasing information contained in crystallographic data. It is simple to use from the command line.

Moreover, a graphical user interface has been developed for easier launching of the analysis.

1. M. D. Winn, C. C. Ballard, K. D. Cowtan, E. J. Dodson, P. Emsley, P. R. Evans, R. M. Keegan, E. B. Krissinel, A. G. W. Leslie, A. McCoy, S. J. McNicholas, G. N. Murshudov, N. S. Pannu, E. A. Potterton, H. R. Powell, R. J. Read, A. Vagin, K. S. Wilson, *Acta Cryst. D*, **67**, (2011), 235-242.
2. D. Liebschner, P. V. Afonine, M. L. Baker, G. Bunkóczi, V. B. Chen, T. I. Croll, B. Hintze, L.-W. Hung, S. Jain, A. J. McCoy, N. W. Moriarty, R. D. Oeffner, B. K. Poon, M. G. Prisant, R. J. Read, J. S. Richardson, D. C. Richardson, M. D. Sammito, O. V. Sobolev, D. H. Stockwell, T. C. Terwilliger, A. G. Urzhumtsev, L. L. Videau, C. J. Williams, P. D. Adams, *Acta Cryst. D*, **75**, (2019), 861-877.
3. P. Kolenko, *Chemické listy*, **113**, (2019), 610-614.
4. G. M. Sheldrick, *Acta Cryst. D*, **66**, (2010), 479-485.
5. I. Usón, G. M. Sheldrick, *Acta Cryst. D*, **74**, (2018), 106-116.

This publication was supported by the MEYS CR (projects CAAS – CZ.02.1.01/0.0/0.0/16_019/0000778, BIOCEV – CZ.1.05/1.1.00/02.0109, and ELIBIO – CZ.02.1.01/0.0/0.0/15_003/0000447) from the ERDF fund and by the GA CTU in Prague (SGS19/189/OHK4/3T/14).