

INTRODUCERE ÎN BIOINFORMATICĂ
sau
BIOINFORMATICĂ APLICATĂ ÎN BIOLOGIA
STRUCTURALĂ

Seminar II

**Vizualizarea structurilor secundare
proteice in PyMol**

Programul PyMol

- Program **open-source** pentru **vizualizarea moleculelor**;
- Creat de Warren Lyford DeLano si lansat in 2000, preluat de Schrödinger, Inc. în 2010;
- Codul sursă este disponibil gratuit, însă programul de instalat este contra-cost;
- $\frac{1}{4}$ din imaginile cu structuri moleculare din literatură sunt realizate cu PyMol;
- **Schrödinger oferă o licență gratuită pentru profesori/studenți.**



Download PyMOL 2.0

Click on a platform icon to download the PyMOL installer
Version 2.0.7 - Updated January 19th 2018

Windows EXE Installer Windows ZIP Archive macOS DMG Disk Image Linux TAR.BZ2 Archive

Alte programe similare:

Chimera <http://www.cgl.ucsf.edu/chimera/>

Jmol - <http://jmol.sourceforge.net/>

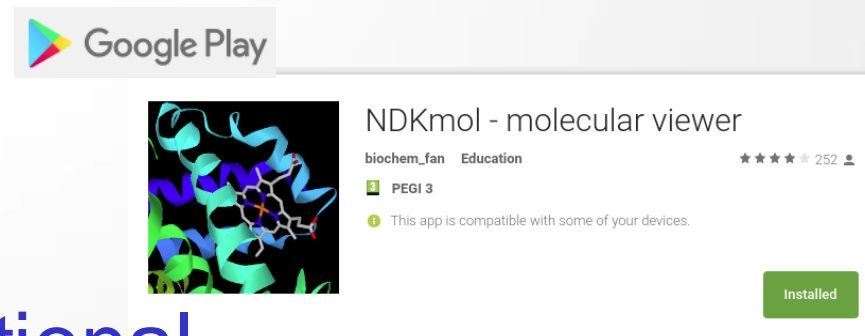
RasMol - <http://rasmol.org/>

MDL Chime - www.mdl.com

Garlic - <http://pref.etfos.hr/garlic/>

VMD -

<http://www.ks.uiuc.edu/Research/vmd/>



Google Play

NDKmol - molecular viewer

biochem_fan Education ★★★★★ 252

PEGI 3

This app is compatible with some of your devices.

Installed

<https://pymol.org/edu/?q=educational>

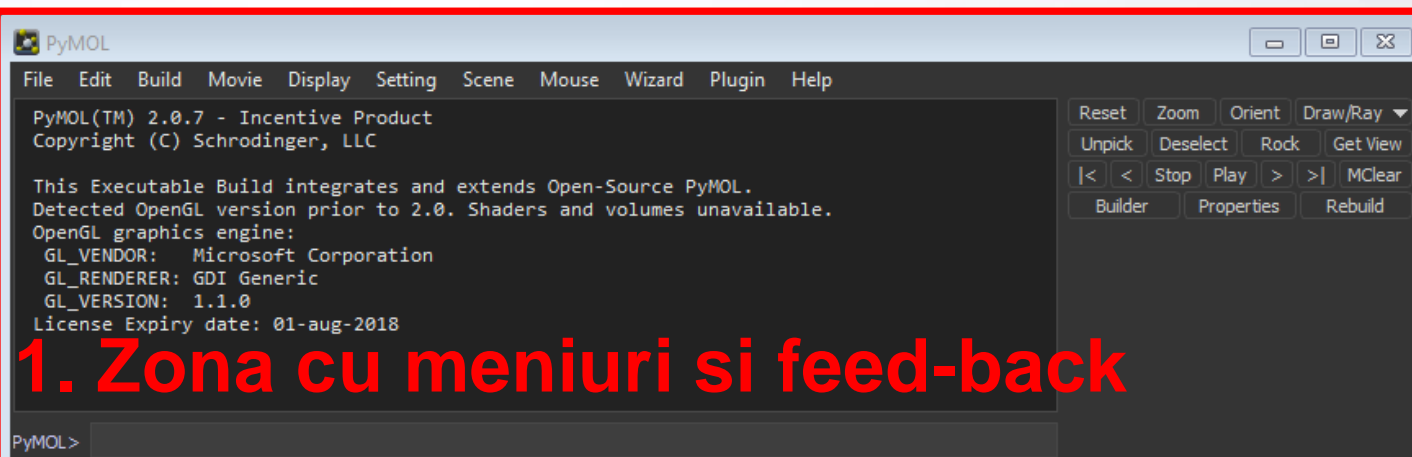
<http://pymol.sourceforge.net/newman/userman.pdf>

Lansarea si componentele programului PyMol

Lansează programul
de pe Desktop



PyMOL

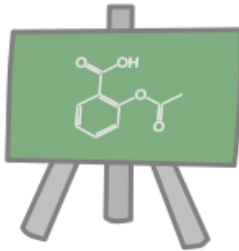
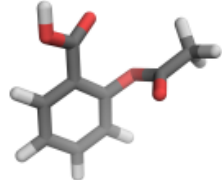


1. Zona cu meniuri si feed-back

For Educational Use Only

Edu PyMOL

<http://pymol.org/educational>
v2.x



Schrödinger offers Educational-use-only PyMOL builds available at no cost to teachers and high school and college students for classroom instruction, homework assignments, and to provide a means for creating high quality figures. It is not provided for the purposes of academic research or publication.

There is no technical support from Schrödinger for "Edu" PyMOL, please use the pymol-users mailing list if you need help.

Licenses for academic: <http://pymol.org/academic>
Licenses for industry: <http://pymol.org/industry>

PyMOL>

2. Zona de vizualizare

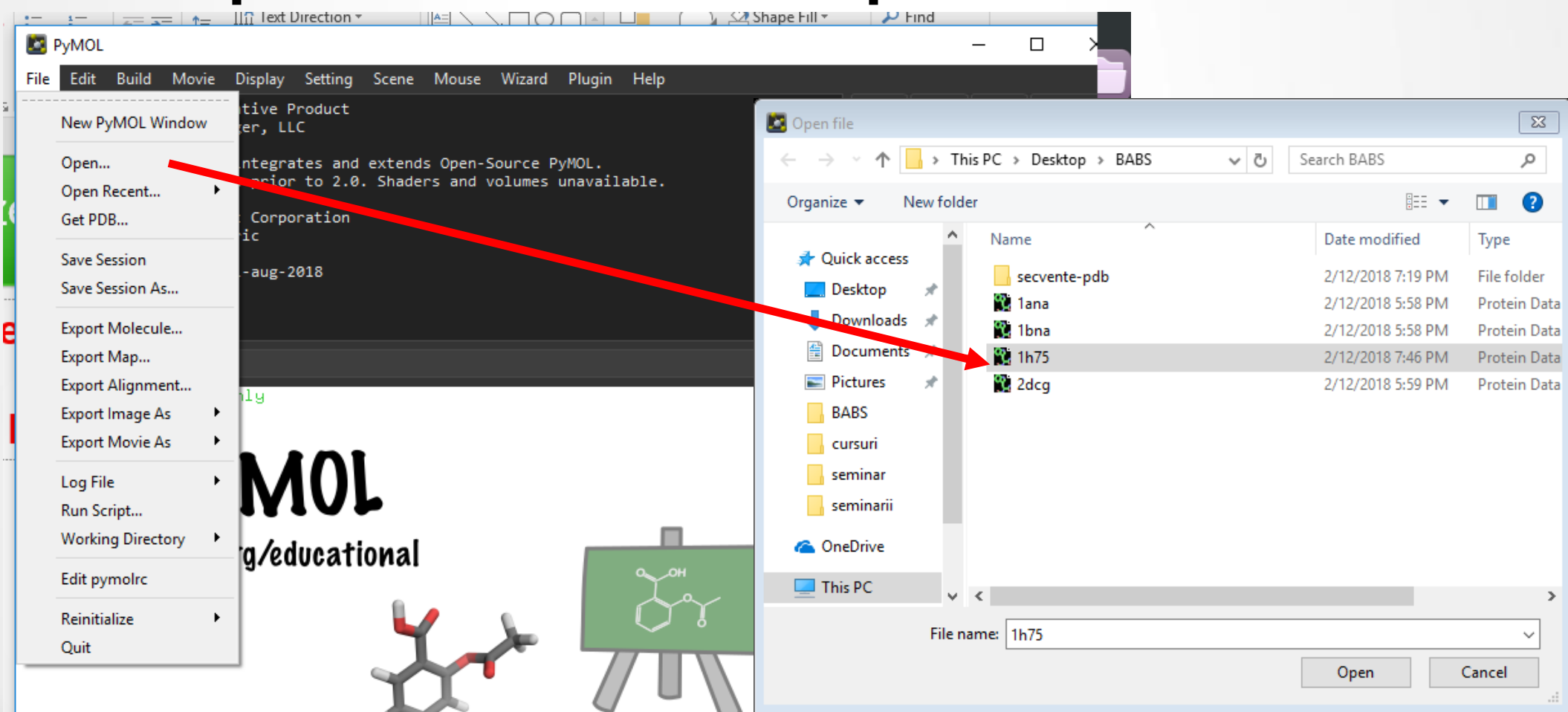
all A S H L C

3. Zona de control a vizualizarii

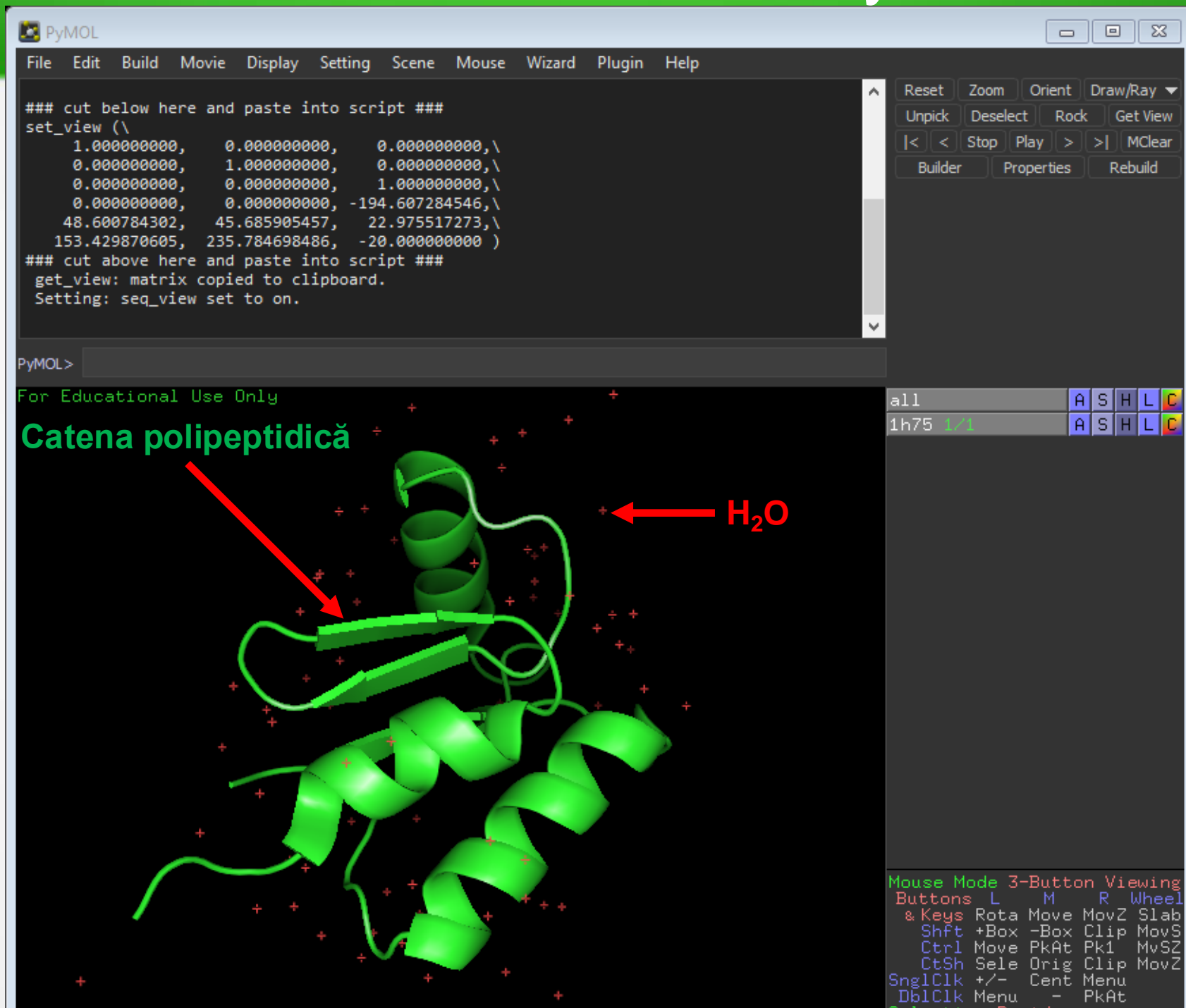
Mouse Mode 3-Button Viewing
Buttons L M R Wheel
& Keys Rota Move Mov/Slak
Shft +Box -Box Clip MovS
Ctrl Move PkAt Pk1 MvSz
CtSh Sele Orig Clip MvZ
SnglClk +/- Cent Menu
DblClk Menu - PkAt
Selecting Residues
State 1/ 1

Cum sa vizualizezi o moleculă în PyMol

1. Se zina cu meniuri se apasă File, apoi Open...
2. Se selectează calea către fișierul dorit:
Desktop/BABS -xxxxxx/1H75.pdb



Cum sa vizualizezi o moleculă în PyMol



The image shows a screenshot of the PyMOL software interface. The main window displays a 3D model of a protein structure, represented by a green ribbon, surrounded by numerous small red '+' symbols representing water molecules. A red arrow points to the protein structure, and another red arrow points to the water molecules, with the label H_2O next to it. The text "Catena polipeptidică" is written in green above the protein structure.

The interface includes a menu bar (File, Edit, Build, Movie, Display, Setting, Scene, Mouse, Wizard, Plugin, Help) and a command line window. The command line shows the following commands and output:

```
### cut below here and paste into script ###
set_view (\
  1.000000000, 0.000000000, 0.000000000,\
  0.000000000, 1.000000000, 0.000000000,\
  0.000000000, 0.000000000, 1.000000000,\
  0.000000000, 0.000000000, -194.607284546,\
  48.600784302, 45.685905457, 22.975517273,\
  153.429870605, 235.784698486, -20.000000000 )
### cut above here and paste into script ###
get_view: matrix copied to clipboard.
Setting: seq_view set to on.
```

The command line prompt is "PyMOL>". Below the command line, the text "For Educational Use Only" is displayed. The right side of the interface features a toolbar with buttons for "Reset", "Zoom", "Orient", "Draw/Ray", "Unpick", "Deselect", "Rock", "Get View", "Builder", "Properties", and "Rebuild". Below the toolbar, there is a table with columns for "all" and "1h75 1/1", and rows for "A", "S", "H", "L", and "C".

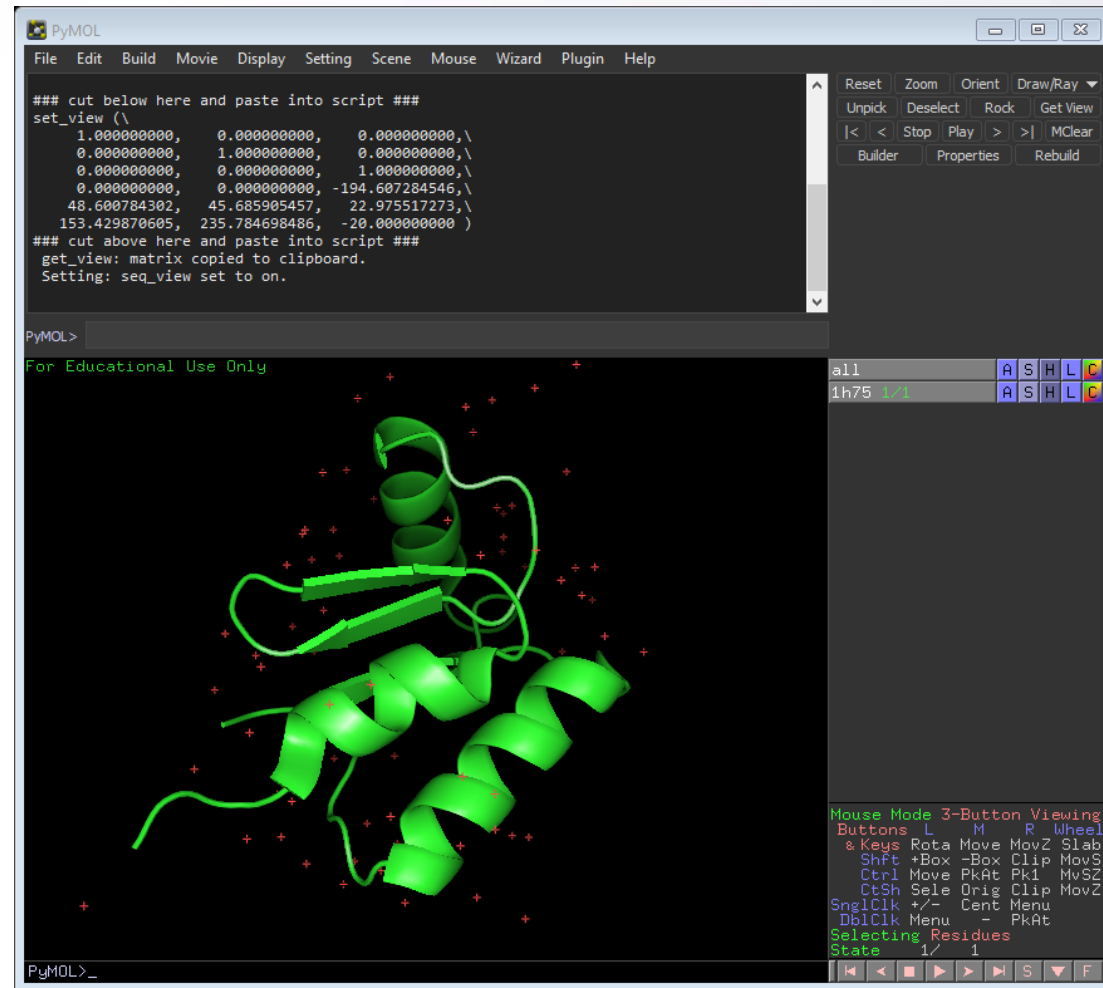
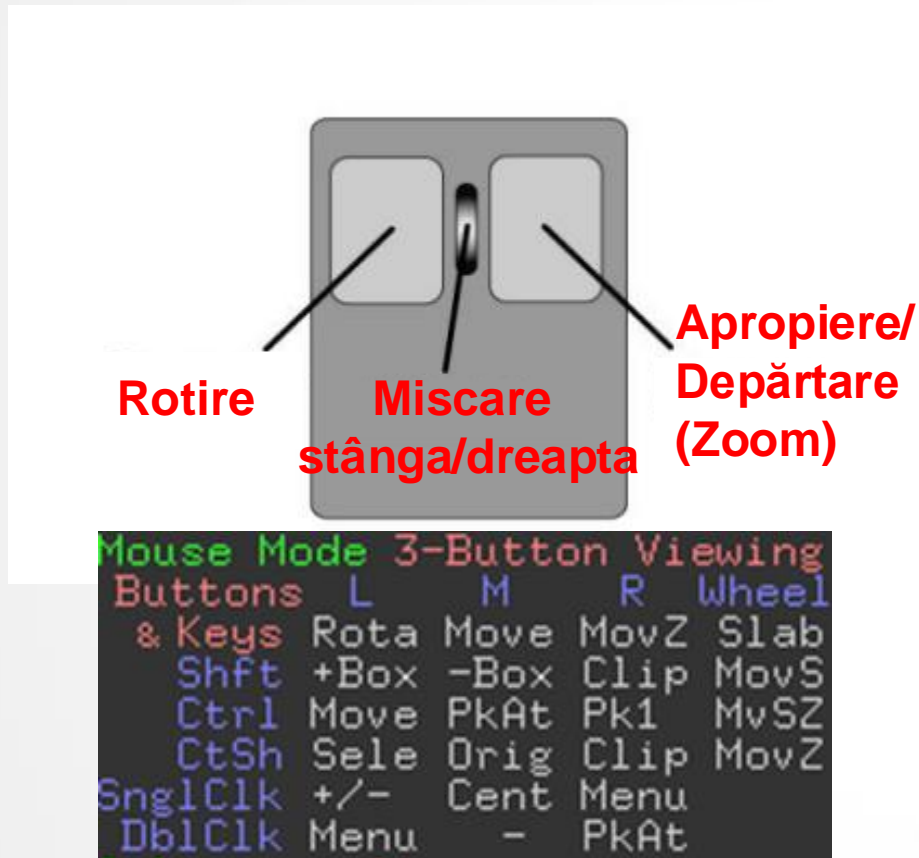
all	A	S	H	L	C
1h75 1/1	A	S	H	L	C

At the bottom right, there is a "Mouse Mode 3-Button Viewing" section with a table of keyboard shortcuts:

Buttons	L	M	R	Wheel
& Keys	Rota	Move	MovZ	Slab
Shft	+Box	-Box	Clip	MovS
Ctrl	Move	PkAt	PK1	MvSZ
CtSh	Sele	Orig	Clip	MovZ
SnglClk	+/-	Cent	Menu	
Db1Clk	Menu	-	PkAt	

Interacțiunea cu molecula vizualizată în PyMol

Cu ajutorul mouse-ului:

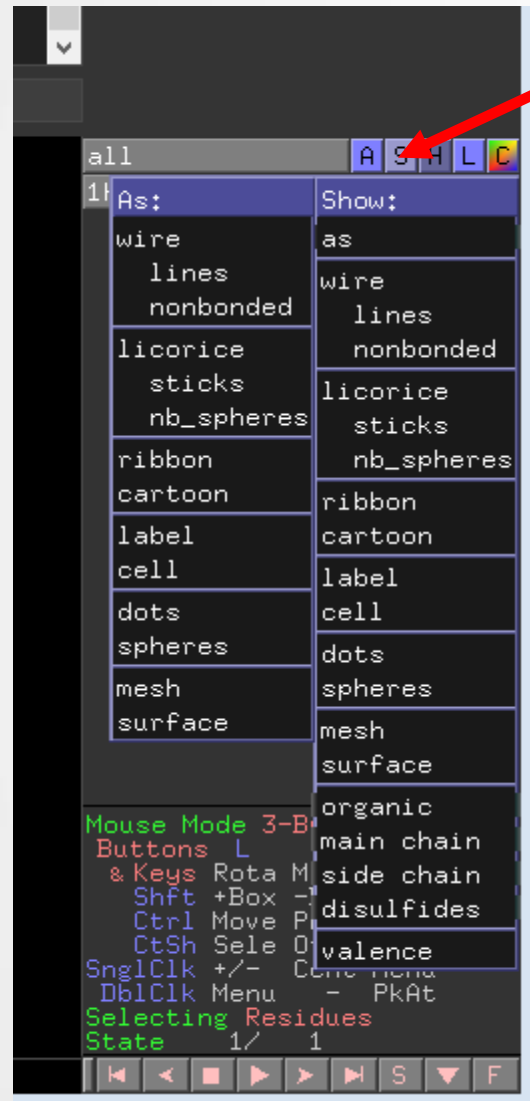


Se ține apăsat butonul dorit și se mișcă mouse-ul stânga-dreapta, spate-fața.

Cate zone helicale si cate structuri β -pliate sunt în molecula afișată?

Schimbarea modului de vizualizare in PyMol

Show



S>as – modul de vizualizare selectat se va schimba pentru toată molecula

S> - modul de vizualizare selectat se adaugă peste cel deja afișat

wire>lines – legăturile sunt linii simple, atomii sunt amplasați la intersecția liniilor;

wire>nonbonded – sunt reprezentați ca puncte doar atomii ce nu sunt implicați în legături covalente;

licorice>sticks - legăturile covalente sunt linii, simple – o linie, duble- două linii etc. atomii sunt amplasați la intersecția liniilor;

licorice>nb_spheres - sunt reprezentați ca puncte doar atomii ce nu sunt implicați în legături covalente;

ribbon – catena polipeptidică este reprezentată ca o sfoară, nu se văd catenele laterale ale aminoacizilor;

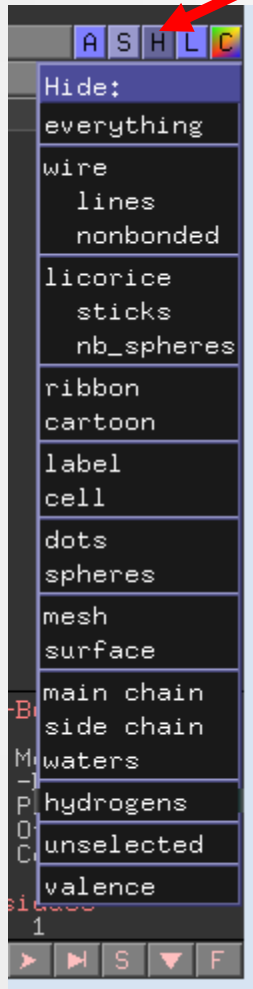
cartoon – catena polipeptidică este reprezentată sub forma unui desen, spirale și săgeți, nu se văd catenele laterale ale aminoacizilor;

spheres – atomii sunt reprezentați ca sfere a căror dimensiune este direct proporțională cu raza atomică;

surface – suprafața moleculară ținând cont de densitatea electronică;

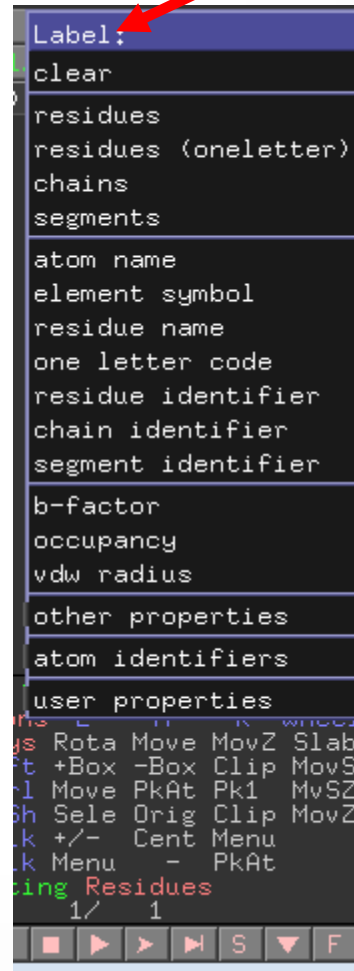
Schimbarea modului de vizualizare in PyMol

Hide



H> everything – toate modurile de afisare sunt anulate, molecula dispare din ecranul de vizualizare;
H> se ascunde din ecranul de vizualizare modul de vizualizare selectat.

Label



H - aplică diverse tipuri de etichete in zona de vizualizare;
Etichete relevante:
Residues;
Chains – catena polipeptidica in cazul in care sunt mai multe catene in aceeasi proteina;

Schimbarea modului de vizualizare in PyMol

Color



C> permite aplicarea diverselor scheme de culoare pe molecula vizualizată

by element – fiecare atom va fi colorat functie de natura sa; schema de culoare este utilă pentru a identifica atomi exotici: S, Halogeni, Metale;

by chain – catenele polipeptidice din componenta unei proteine se colorează diferențiat; schema de culoare este utilă pentru a identifica usor numărul de catene dintr-o moleculă peptidică;

by ss – structurile secundare (α -helix, β -pliat, loops) sunt colorate diferențiat; schema de culoare este utilă pentru a identifica usor tipurile de structuri secundare dintr-o moleculă peptidică;

Exercițiu 1 – in timpul seminarului

- 1. Reprezentați molecula deschisă doar ca și cartoon.**
- 2. Colorați molecula deschisă funcție de structura secundară.** Câte α -helixuri și structuri β -pliate are molecula afișată?
- 3. Adăugați la vizualizare licorice>sticks.**
- 4. Faceți zoom pe o structura helicală.** Unde sunt resturile R ale aminoacizilor?
- 5. Faceți zoom pe o structura β -pliată.** Unde sunt resturile R ale aminoacizilor?

Exercițiu 1 – de completat in prezentare

1. Reprezentați molecula dvs. doar ca și cartoon.
2. Colorați molecula deschisă funcție numărul de catene polipeptidice. **Cate catene conține proteina dmv.? Salvati o imagine cu molecula deschisa care sa demonstreze raspunsul dmv. si inserati-o in fisierul PowerPoint. Scrieți o scurtă legendă pentru figura.**
3. Faceți zoom pe una dintre subunitati. Colorați molecula deschisă funcție de structura secundară. **Cate α -helixuri si structuri β -pliate are o subunitate? Salvati o imagine cu molecula deschisa care sa demonstreze raspunsul dmv. si inserati-o in fisierul PowerPoint. Scrieți o scurtă legendă pentru figura.**
4. Adaugati la vizualizare licorice>sticks.
5. Faceți zoom pe o structura helicala. Unde sunt resturile R ale aminoacizilor?