

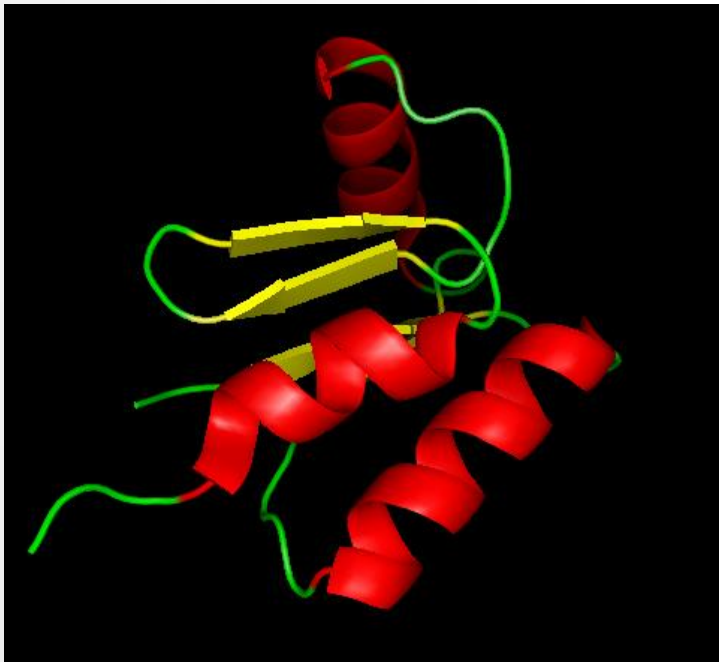
BIOINFORMATICĂ APLICATĂ ÎN BIOLOGIA STRUCTURALĂ

Seminar IV

Selecția unor particularități structurale și
măsurarea distanțelor inter-atomice în
PyMol

Selecția atomilor, resturilor de aminoacizi și catenelor peptidice în PyMol

1. Din zona cu meniuri se apasă **File**, apoi **Open...**
2. Se selectează calea către fișierul dorit:
Desktop/BABS/1h75.pdb
3. Ascundeți moleculele de apă legată
H>Wire>nonbonded



4. Colorați molecula funcție de structurile secundare

Selecția atomilor, resturilor de aminoacizi și catenelor peptidice în PyMol

PyMol oferă 2 posibilități de selecție a aminoacizilor sau moleculelor non-proteice:

- A) Direct în zona de vizualizare, prin click stânga pe elementul dorit;
- B) Pe secvența afișată în zona de vizualizare (seminarul anterior);

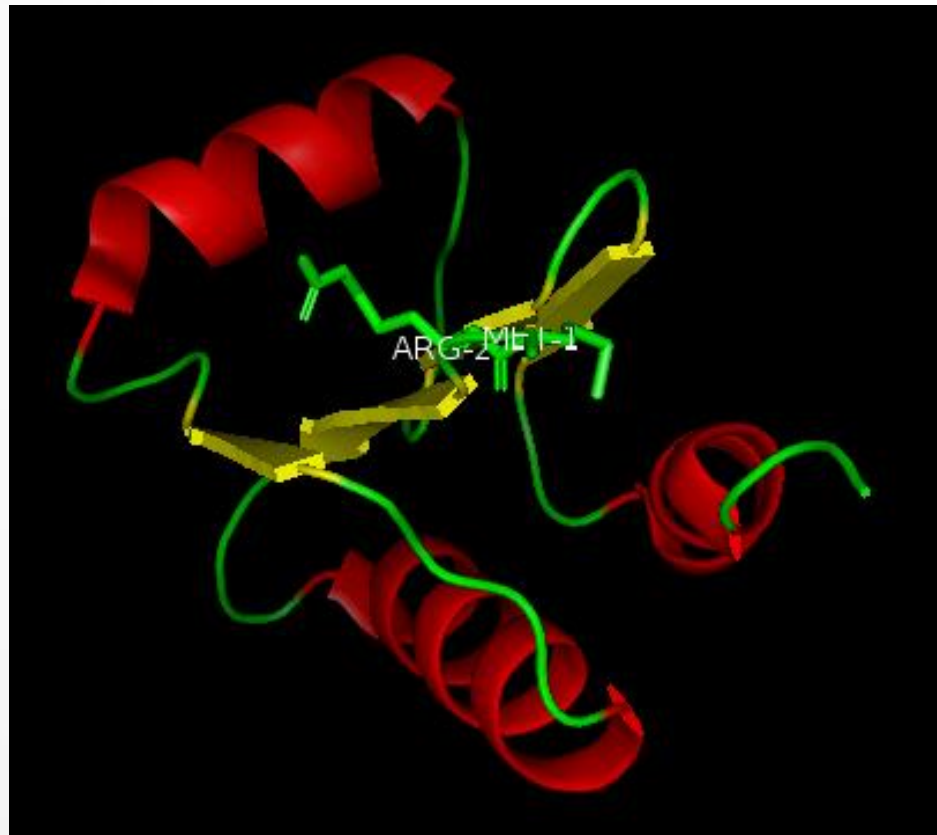
Selecția, indiferent de modul de realizare funcționează în câteva moduri distincte ce sunt selectabile din zona de control a vizualizării

A screenshot of the PyMol software interface showing the 'Selecting Atoms' menu. The text 'Selecting Atoms' is displayed in a green, monospaced font on a dark background. The 'Atoms' part of the text is highlighted in red. The menu is part of a larger window with a blue title bar.

- 1.Atoms** – fiecare atom din molecula fișată poate fi selectat individual;
- 2.Residues** – click pe un atom duce la selecția întregului rest de aminoacid, a întregii nucleotide sau a întregii molecule non-proteice;
- 3.Chains** – click pe un atom sau o zonă apropiată unui atom duce la selecția întregului lanț polipeptidic din care acesta face parte;
- 4.Molecule** – click pe un atom sau o zonă apropiată unui atom duce la selecția întregii molecule;
- 5.C-alpha** – click pe un atom sau o zonă apropiată unui atom duce la selecția atomului de C alfa din catena polipeptidică.

Selecția atomilor, resturilor de aminoacizi și catenelor peptidice în PyMol

5. Selectați modul de selecție ca **Residues**
6. Selectați primii 2 aminoacizi și adăugați la reprezentarea lor modul licorice/stiks pentru a vedea catenele laterale;
7. Adăugați etichete pentru acești aminoacizi;



Măsurarea distanțelor interatomice în PyMol

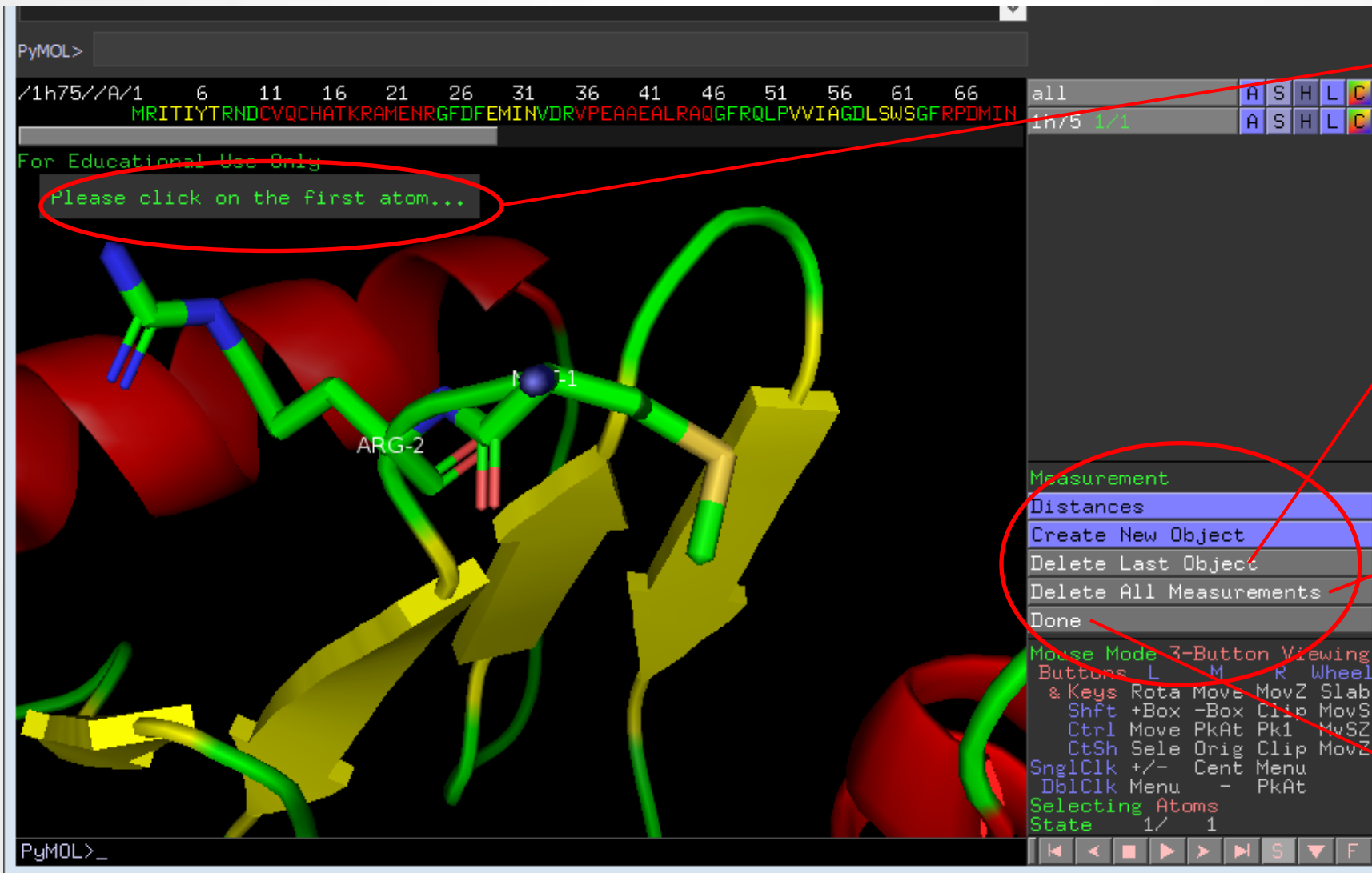
Dorim să măsurăm distanța dintre atomii de S (galben) al Met și cel de N(albastru) din NH2 al Arg.

8. Colorați aac selectați funcție de tipul de atomi și schimbați modul de selecție la **Atoms;**



Măsurarea distanțelor interatomice în PyMol

9. Din zona cu meniuri se accesează **Wizard>Measurement;**



Mod de
măsurare
activat

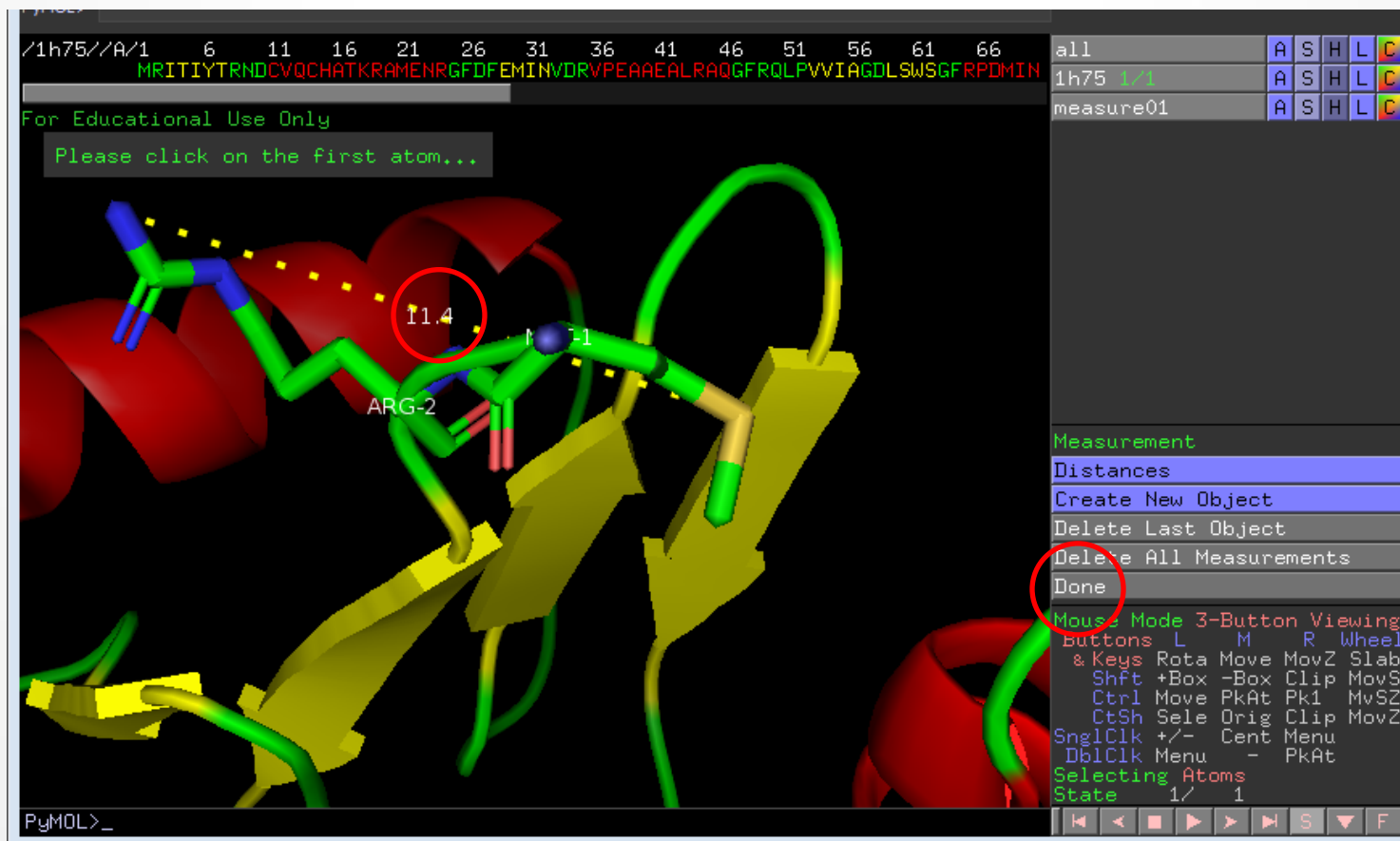
Stergerea
ultimei
măsurători

Stergerea
tuturor
măsurătorilor

Iesirea din
modul
măsurare

Măsurarea distanțelor interatomice în PyMol

10. Selectați succesiv cei 2 atomi indicați și programul va calcula distanța dintre aceștia și va afișa valoarea în Å (Angstromi) – 11.4 Å pentru cei doi atomi selectați. Prin selecția unui al treilea atom și al patrulea atom procedura de măsurare este reinițiată și o nouă distanță este afișată. După ce toate distanțele dorite au fost măsurate, se apasă **Done** pentru a ieși din modul de măsurare;



Exercițiul 3 – la seminar

Câți aminoacizi despart **Ile3 de Tre7** în proteina cu structura 1h75. Care este distanța în Å între atomii C alfa ai acestor 2 aminoacizi?

Câți aminoacizi despart **Ile3 de Ala56** în proteina cu structura 1h75. Care este distanța în Å între atomii C alfa ai acestor 2 aminoacizi?

3 aac si 11.7 Å vs 52 aac si 4.5 Å

Cum se explică acest lucru?



Exercițiul 3 – pentru prezentare

Care sunt aminoacizii din poziția 22 și poziția 42, catena A de aminoacizi din proteina dmv.? **Care este distanța dintre atomi extremi ai catenelor lor laterale ?** Salvati o imagine care să suporte răspunsul dmv. si inserati-o in fisierul PowerPoint. Scrieți o scurtă legendă pentru figura.