

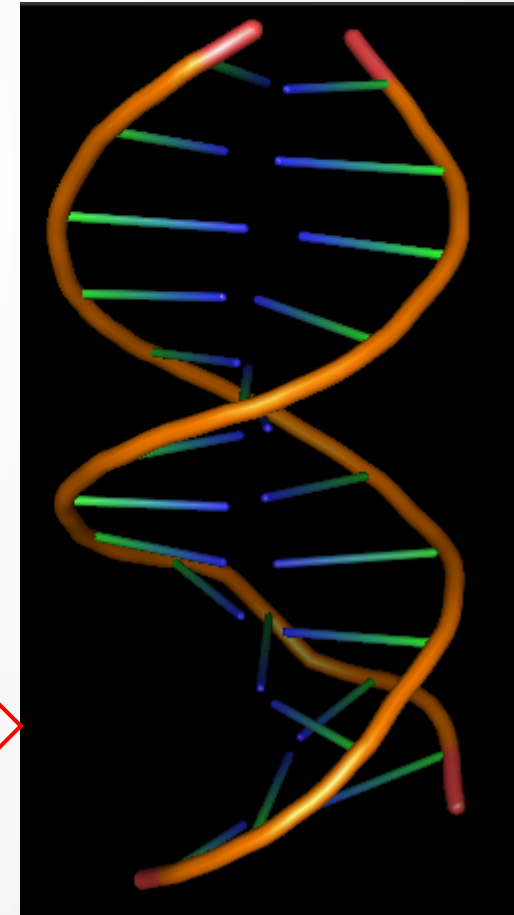
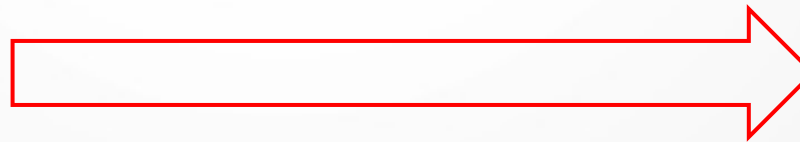
BIOINFORMATICĂ APLICATĂ ÎN BIOLOGIA STRUCTURALĂ

Seminar VI

Vizualizarea acizilor nucleici in PyMol

Proteine vs ADN in PyMol

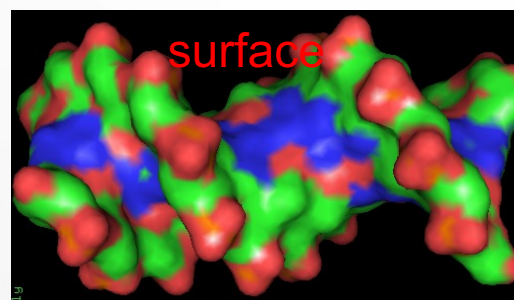
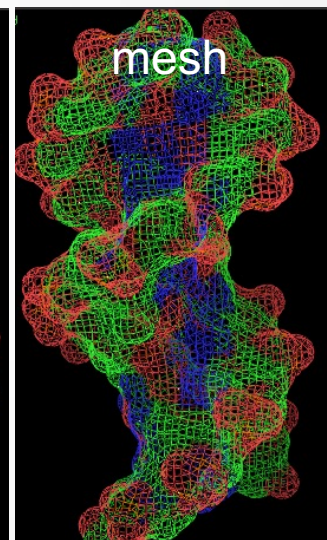
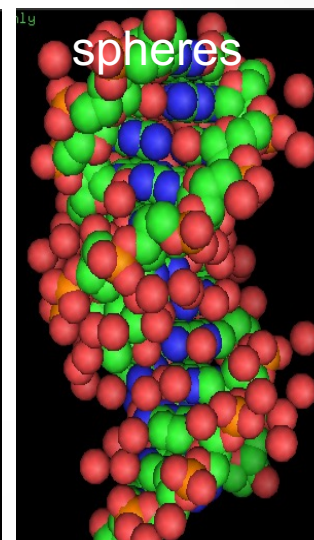
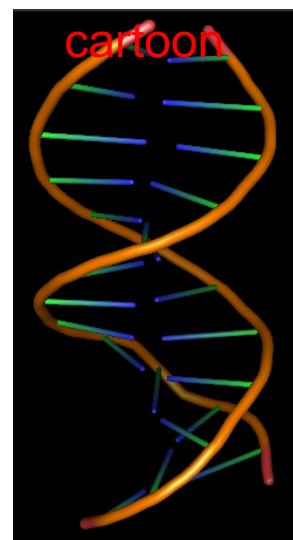
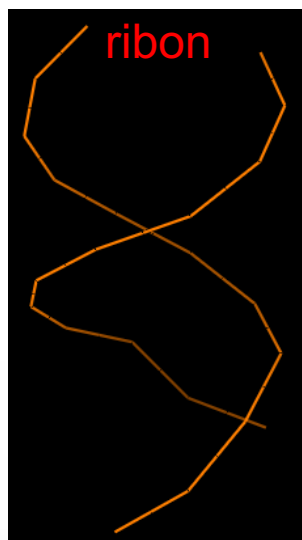
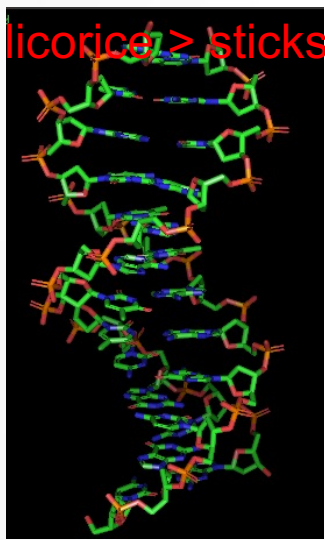
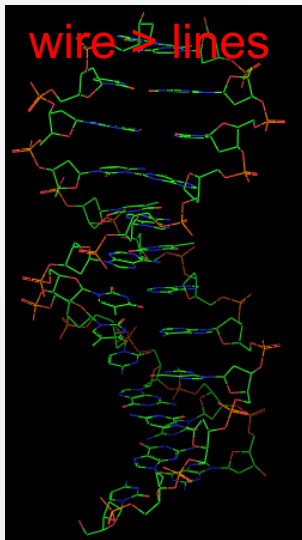
1. Din zona cu meniuri se apasă **File**, apoi **Open...**
2. Se selectează calea către fișierul dorit:
Desktop/BABS/2bna.pdb
3. Ascundeți moleculele de apă legată
H>Wire>nonbonded
4. Rotiți molecula și ampalsați-o în zona de vizualizare în așa fel încât să fie vizibilă pe toata lungimea;



Proteine vs ADN in PyMol

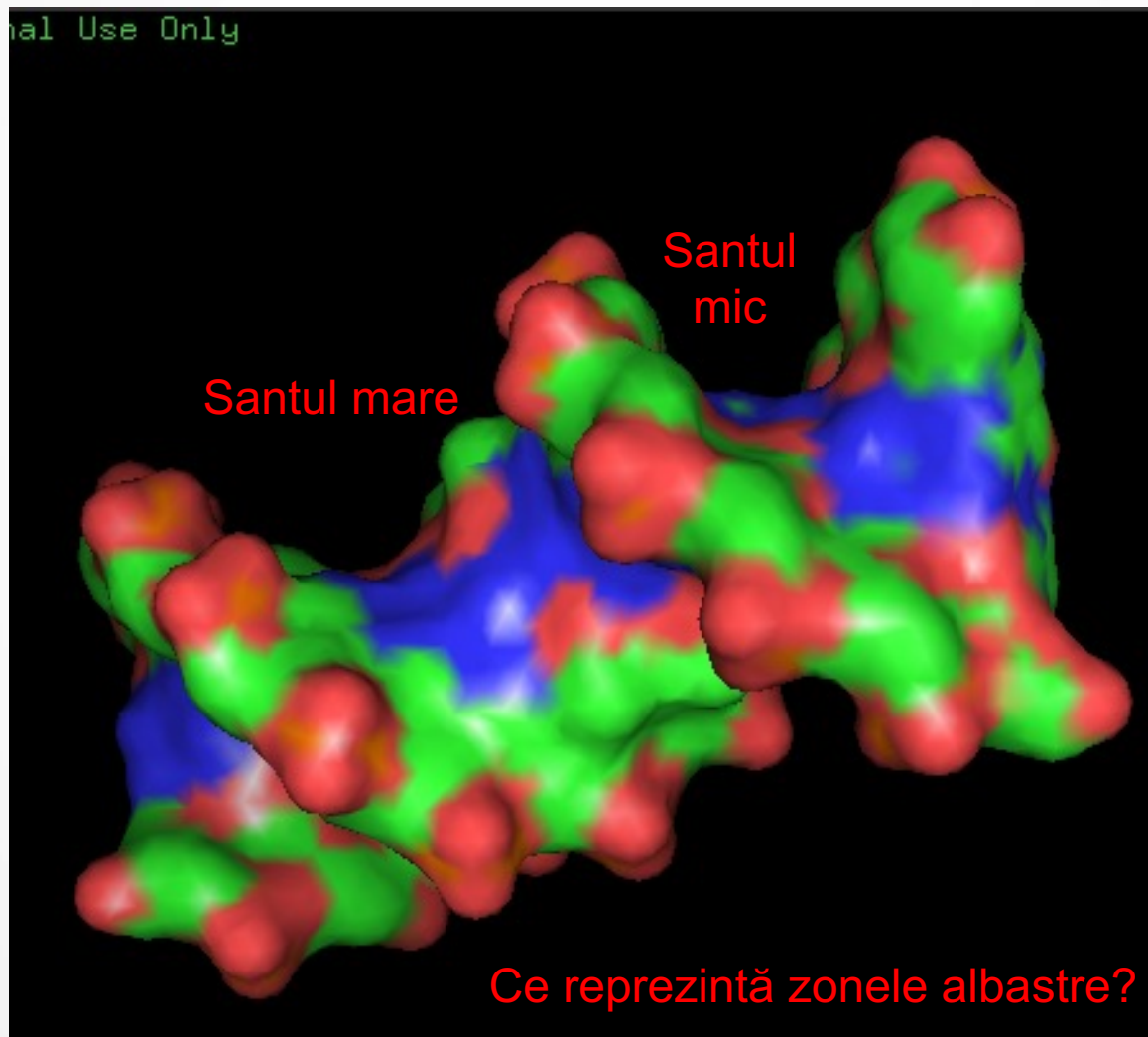
5. Vizualizați molecula succesiv în toate modurile disponibile și observați diferențele în ceea ce privește modul de reprezentare a catenei fosfo-diesterice și a bazelor azotate;

S>as>



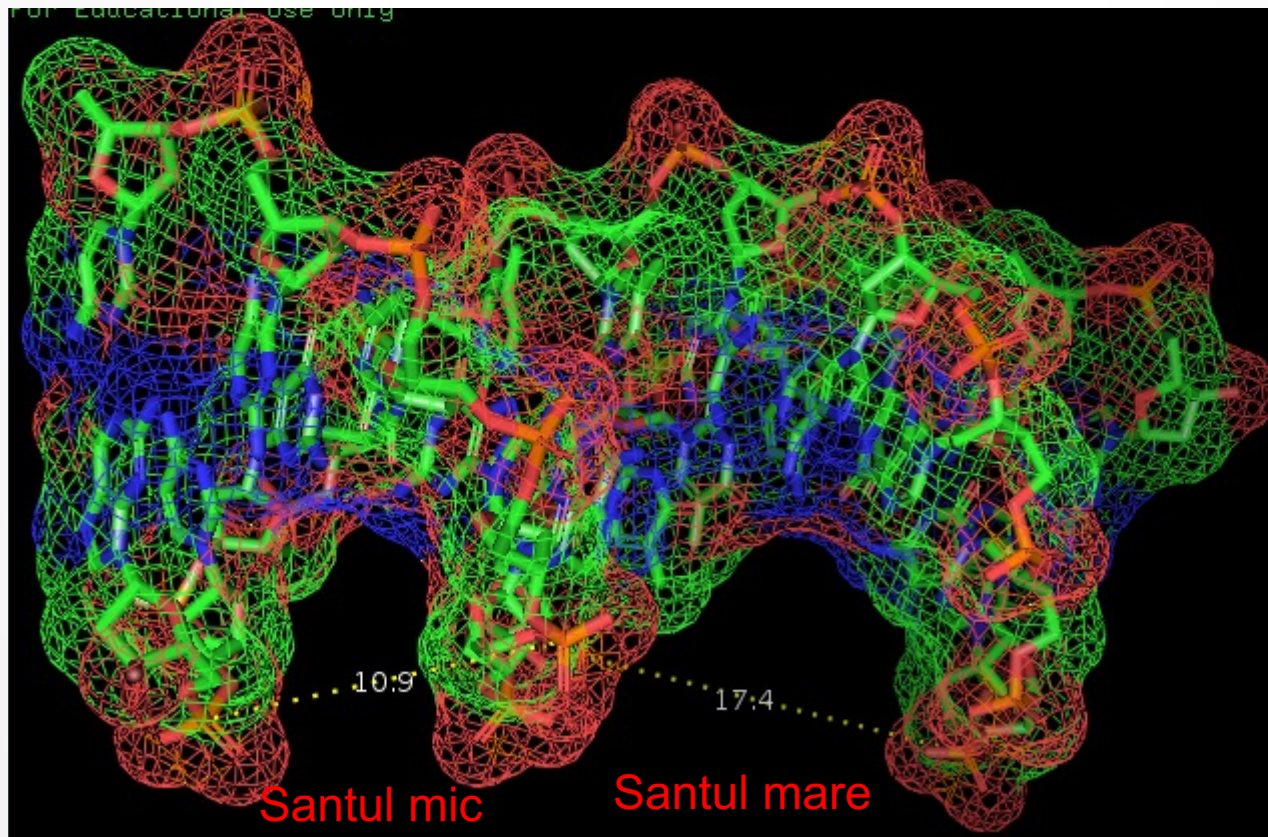
Șanțul mare și șanțul mic în molecula de ADN

6. Vizualizați molecula în modul surface. Rotiți molecula și identificați șanțul mare și șanțul mic.



Șanțul mare și șanțul mic în molecula de ADN

7. Schimbați modul de vizualizare la mesh și adăugați modul de vizualizare surface. Schimbați modul de selecție la atomi și măsurați lățimea șanțului mare și a șanțului mic (distanța dintre atomii de P)



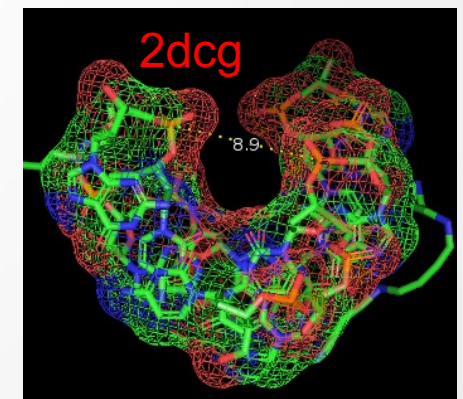
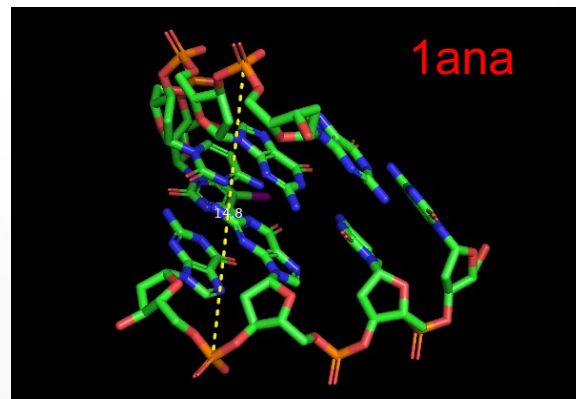
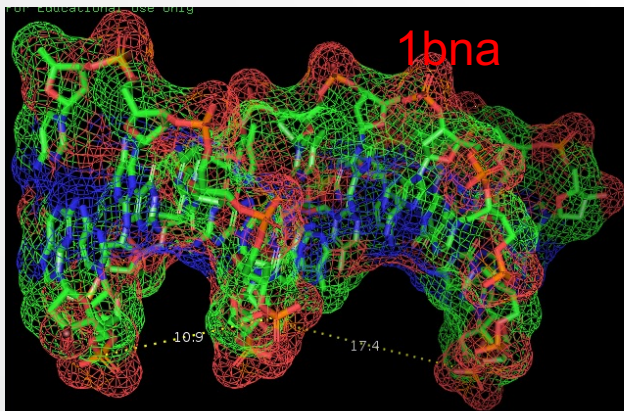
Exercitiu în seminar – măsurați dimensiunile șanțurilor în cele 3 conformații ale ADN-ului

5. Deschideți pe rând în PyMol structurile corespunzătoare celor 3 conformații ale ADN-ului și măsurați lățimea șanțurilor mare și mic.

1ana – ADN în conformația A

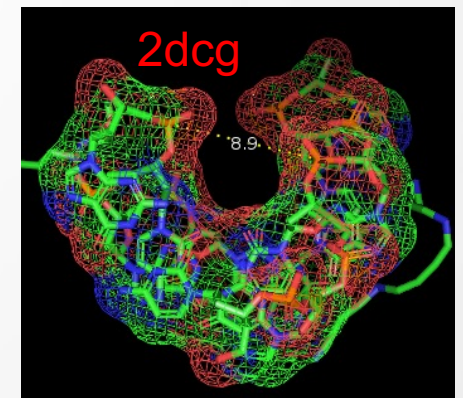
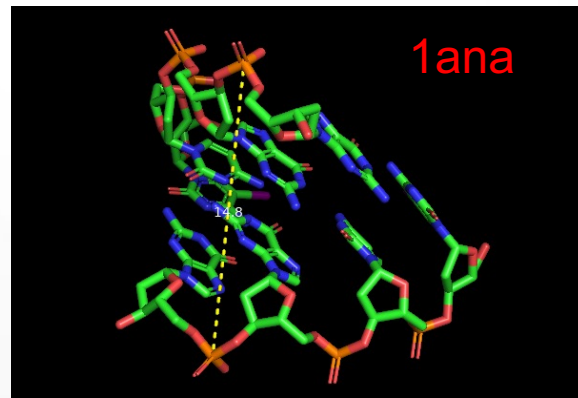
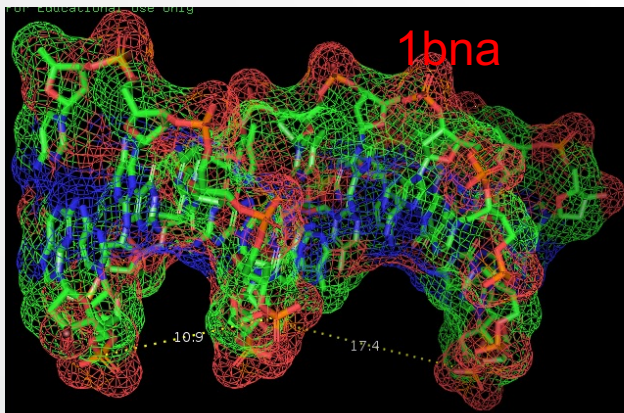
1bna – ADN în conformația B

2dcg – ADN în conformația Z



Exercitiu pentru prezentare

Deschideți molecula dmv. și identificați dacă conține molecule de acizi nucleici. Dacă **da**, salvați o imagine care să demonstreze acest lucru și inserați-o în prezentare cu o scurtă descriere. Dacă **nu conține**, notați răspunsul în prezentare și generați o imagine care să demonstreze acest lucru.



Structura ribozomului – ARN + Proteine

