

# 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/>

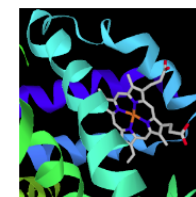
RasMol - <http://rasmol.org/>

MDL Chime - [www.mdl.com](http://www.mdl.com)

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

VMD -

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



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>

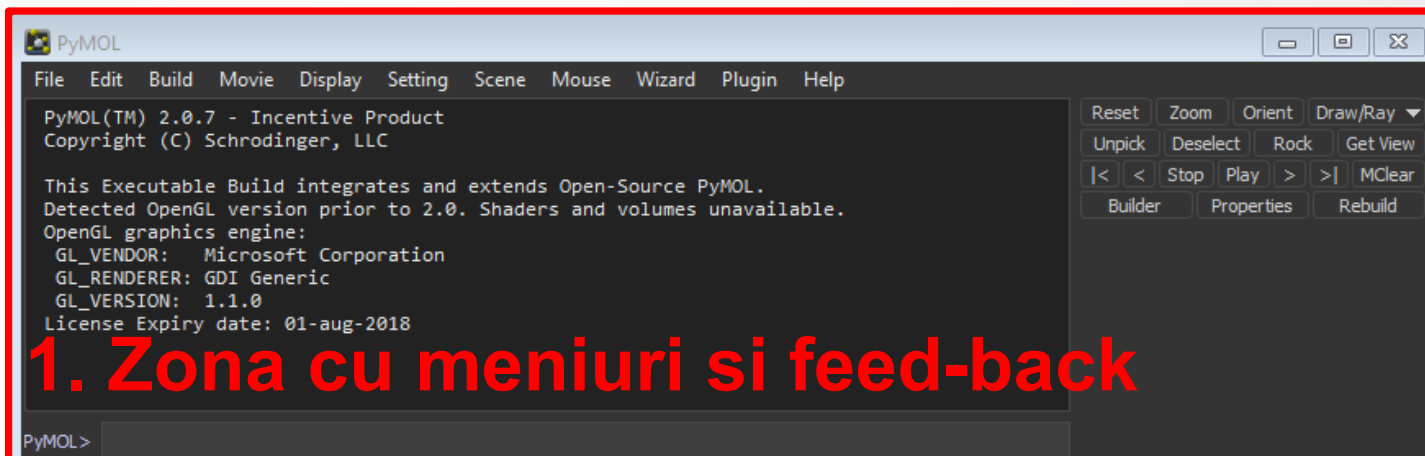
<http://pymol.sourceforge.net/newman/userman.pdf>

# Lansarea si componentele programului PyMol

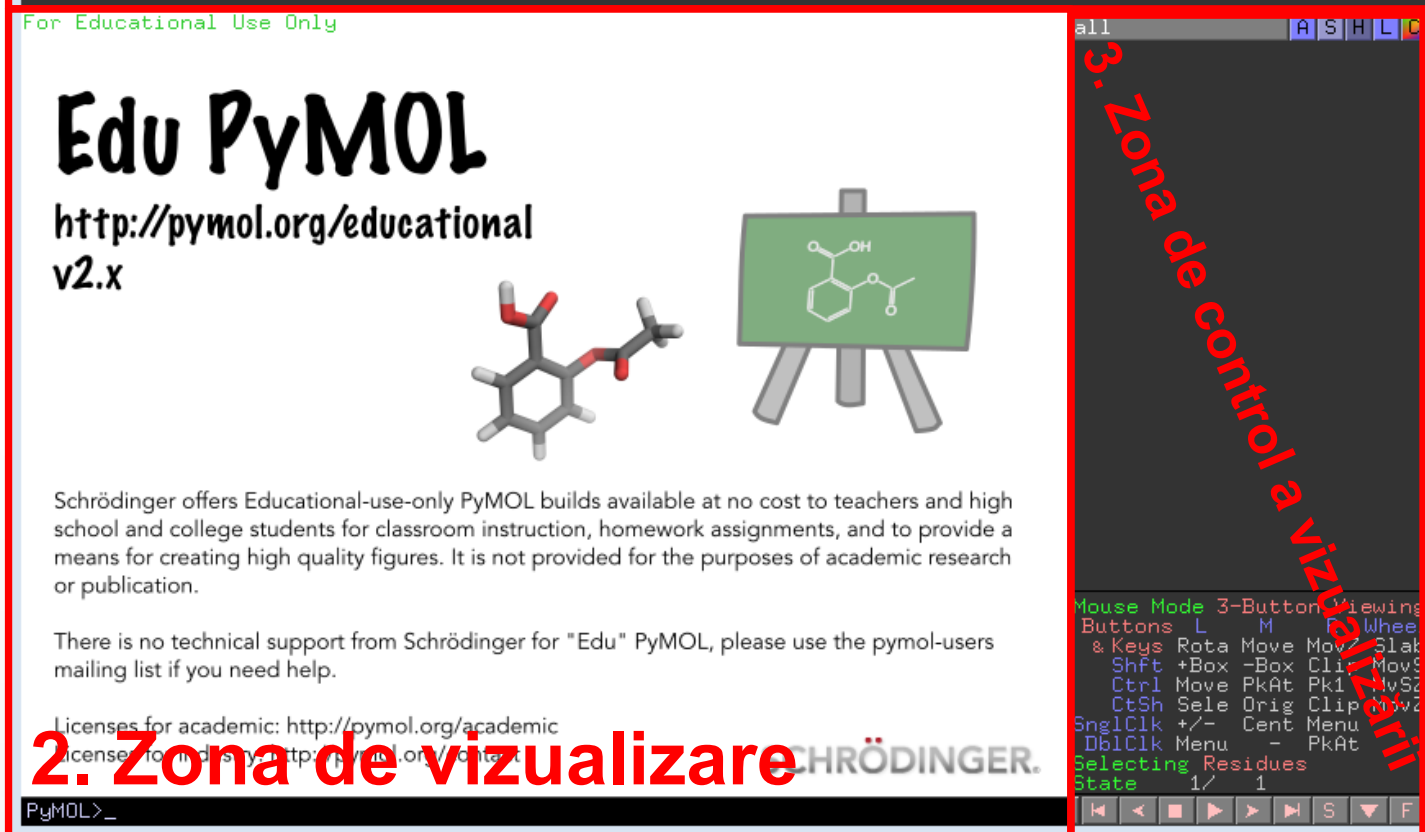
## Lansează programul de pe Desktop



PyMOL



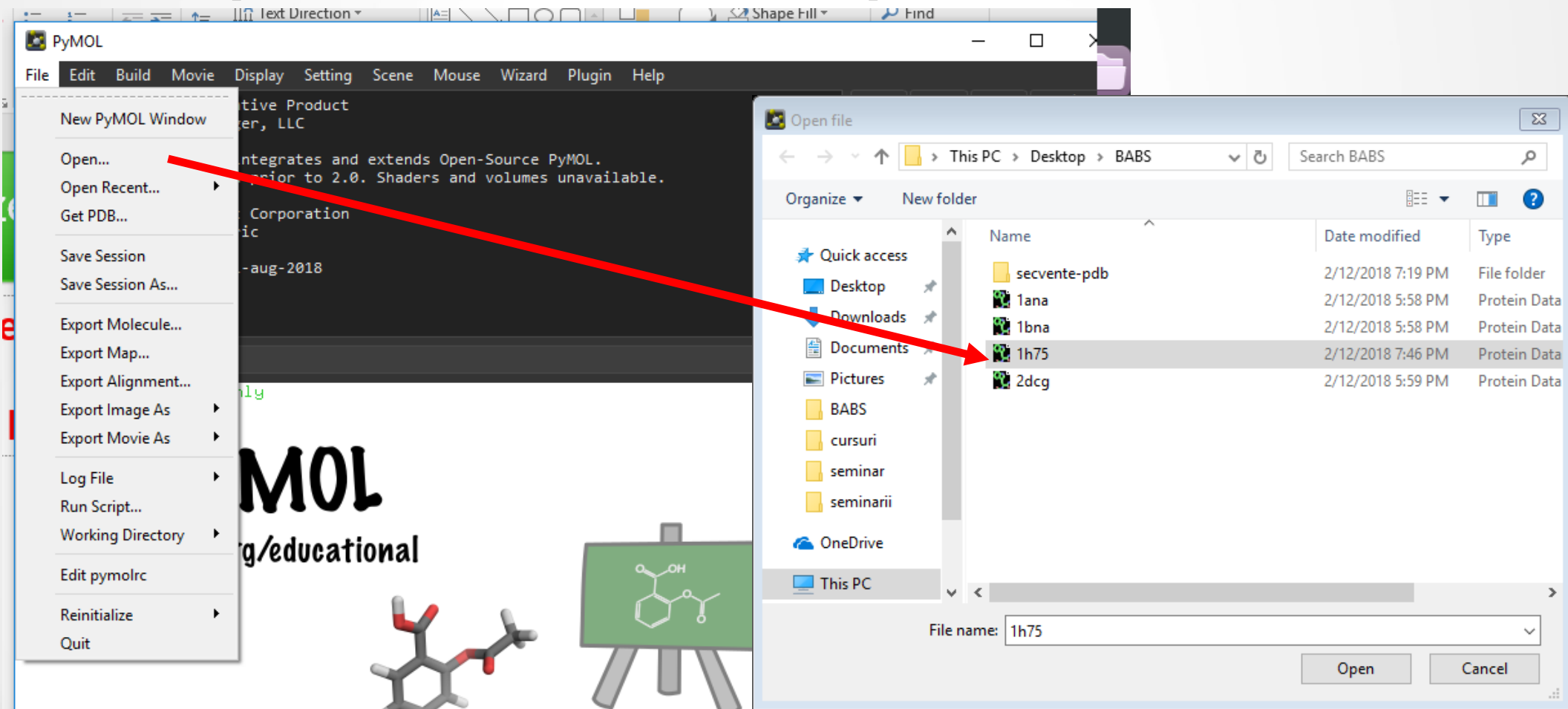
## 1. Zona cu meniuri si feed-back



## 2. Zona de vizualizare

# Cum sa vizualizezi o moleculă în PyMol

1. Se zona 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 screenshot displays the PyMOL molecular visualization software. The main window shows a protein structure rendered in a green ribbon representation, surrounded by numerous water molecules represented as small red '+' signs. Two red arrows point to specific features: one points to a beta-strand of the protein labeled "Catena polipeptidică", and the other points to a water molecule labeled "H<sub>2</sub>O".

The command console at the top left contains the following script:

```
### 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 right-hand panel includes a toolbar with buttons for "Reset", "Zoom", "Orient", "Draw/Ray", "Unpick", "Deselect", "Rock", "Get View", "Stop", "Play", "MClear", "Builder", "Properties", and "Rebuild". Below the toolbar is a table with columns for "all" and "1h75 1/1", and rows for "A", "S", "H", "L", and "C".

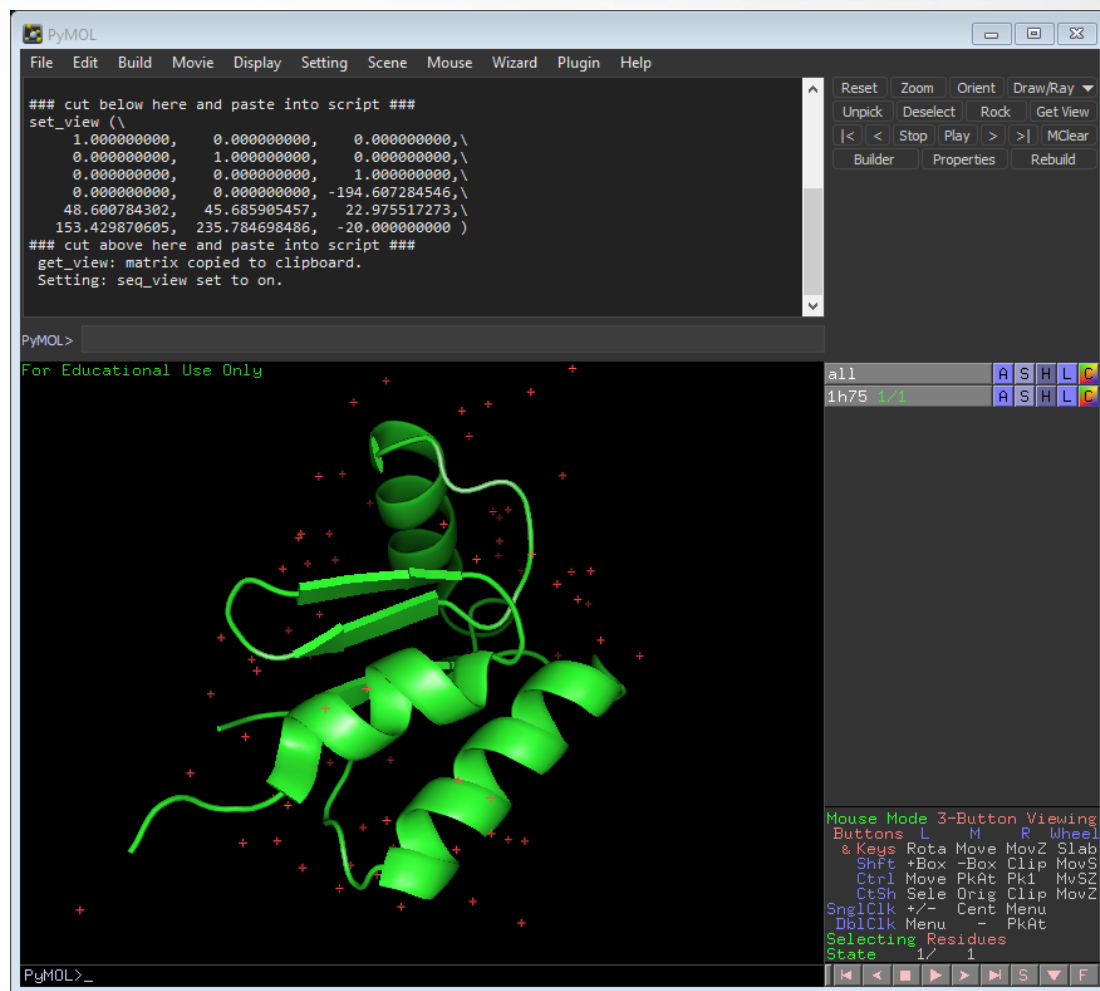
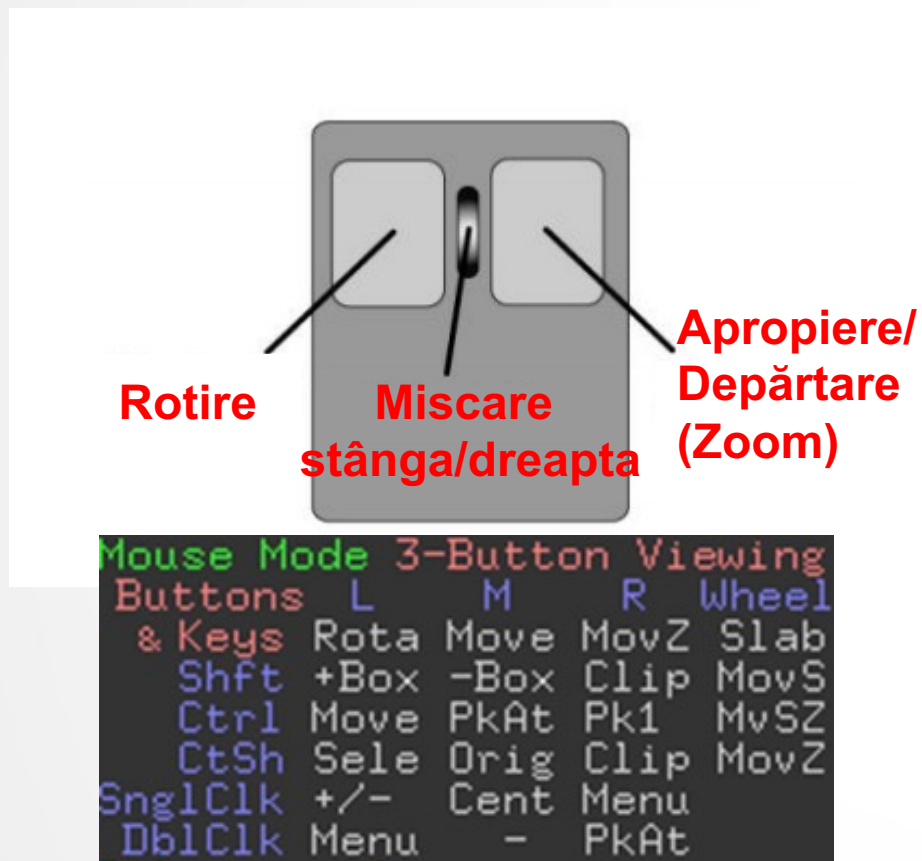
all	A	S	H	L	C
1h75 1/1	A	S	H	L	C

At the bottom right, there is a "Mouse Mode 3-Button Viewing" table:

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	
DblClk	Menu	-	PkAt	

# Interacțiunea cu molecula vizualizată în PyMol

Cu ajutorul mouse-ului:

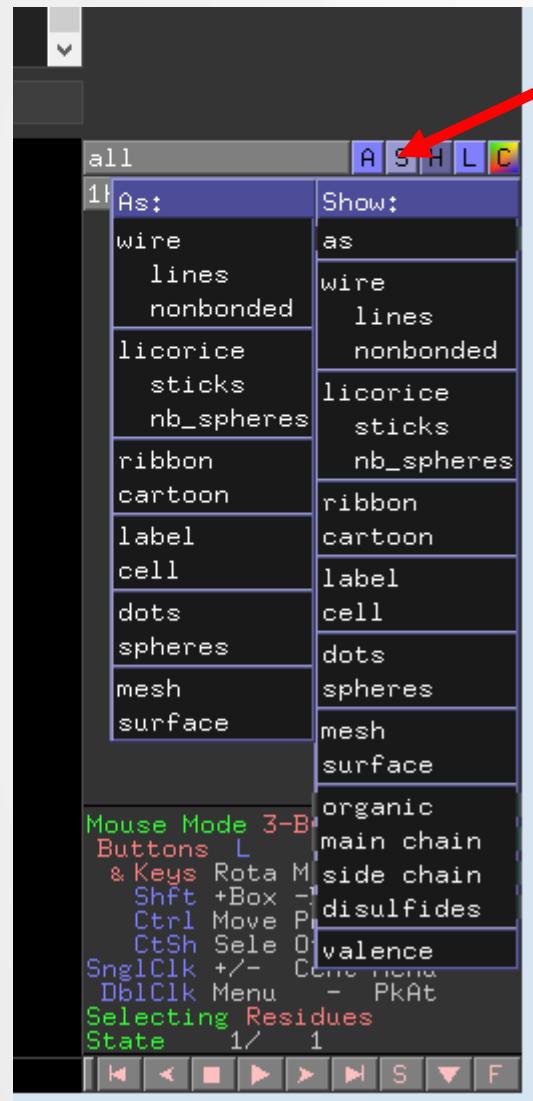


Se ține apăsat butonul dorit și se mișcă mouse-ul stânga-dreapta, spate-fața.

Cate zone helicale si cate structuri  $\beta$ -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;

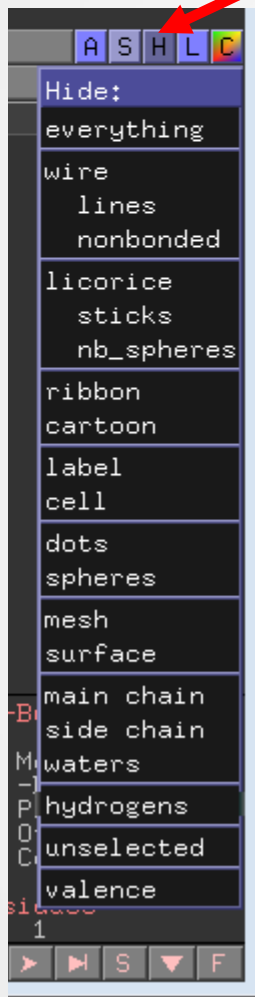
**spheres** – atomii sunt reprezentați ca sfere a căror dimensiune este direct proporțională cu raza atomică;

**surface** – suprafața moleculară ținând cont de densitatea electronică;



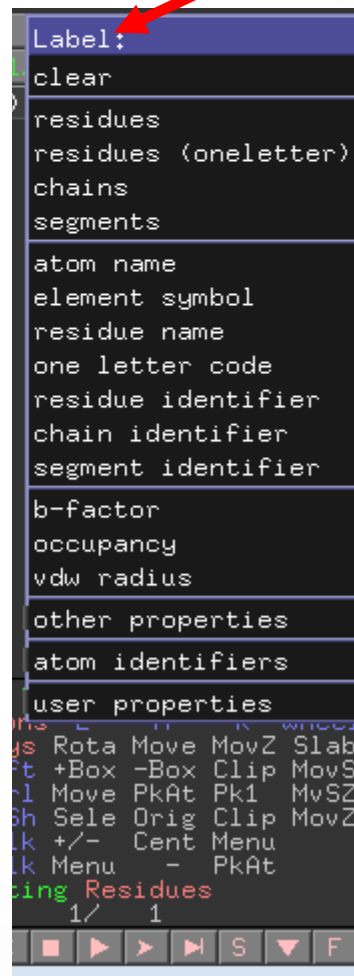
# Schimbarea modului de vizualizare in PyMol

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 diferentiat; schema de culoare este utilă pentru a identifica usor numărul de catene dintr-o moleculă peptidică;

**by ss** – structurile secundare ( $\alpha$ -helix,  $\beta$ -pliat, loops) sunt colorate diferentiat; 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  $\alpha$ -helixuri și structuri  $\beta$ -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  $\beta$ -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 subunități. Colorați molecula deschisă funcție de structura secundară. **Cate  $\alpha$ -helixuri si structuri  $\beta$ -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 helicală. Unde sunt resturile R ale aminoacizilor?