

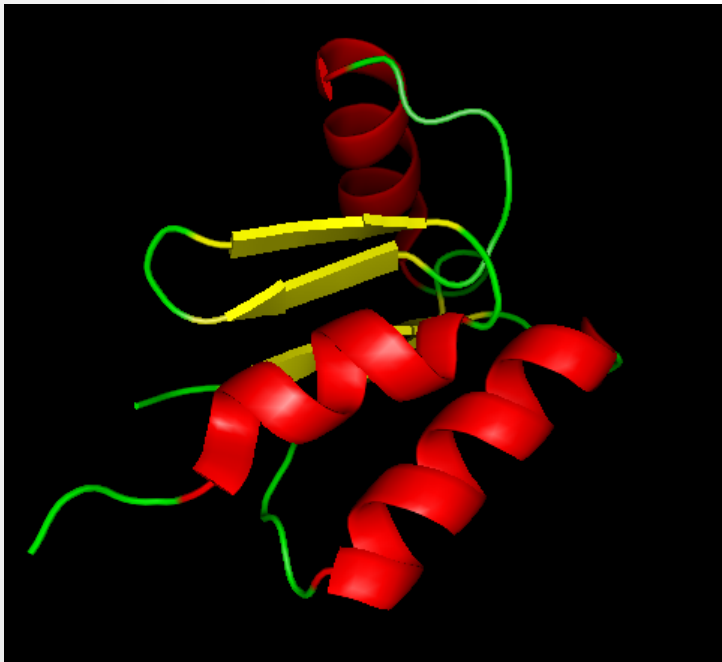
# BIOINFORMATICĂ APLICATĂ ÎN BIOLOGIA STRUCTURALĂ

## Seminar IV

Selecția unor particularități structurale și  
măsurarea distanțelor inter-atomice in  
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



The image shows a dark grey rectangular menu box with the text 'Selecting Atoms' in a monospaced font. The word 'Selecting' is in green and 'Atoms' is in red. The menu is positioned over a blurred background of the PyMol software interface.

- 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 NH<sub>2</sub> 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;**

The image shows a PyMOL interface with a protein structure. The protein is rendered in a stick representation with a yellow ribbon. The structure is colored in shades of green, blue, and red. A red circle highlights the text "Please click on the first atom..." in the command line area. The Measurement menu is open, showing options: Distances, Create New Object, Delete Last Object, Delete All Measurements, and Done. The menu is highlighted in blue. The command line shows the protein sequence: /1h75//A/1 6 11 16 21 26 31 36 41 46 51 56 61 66 MRITIIYTRND CVQCHATKRAMENRGDFEMINVDRVPEAAEALRAQGFRQLPVVIAGDLSWSGFRPDMIN. The command line also shows "For Educational Use Only" and "Please click on the first atom...".

Mod de măsurare activat

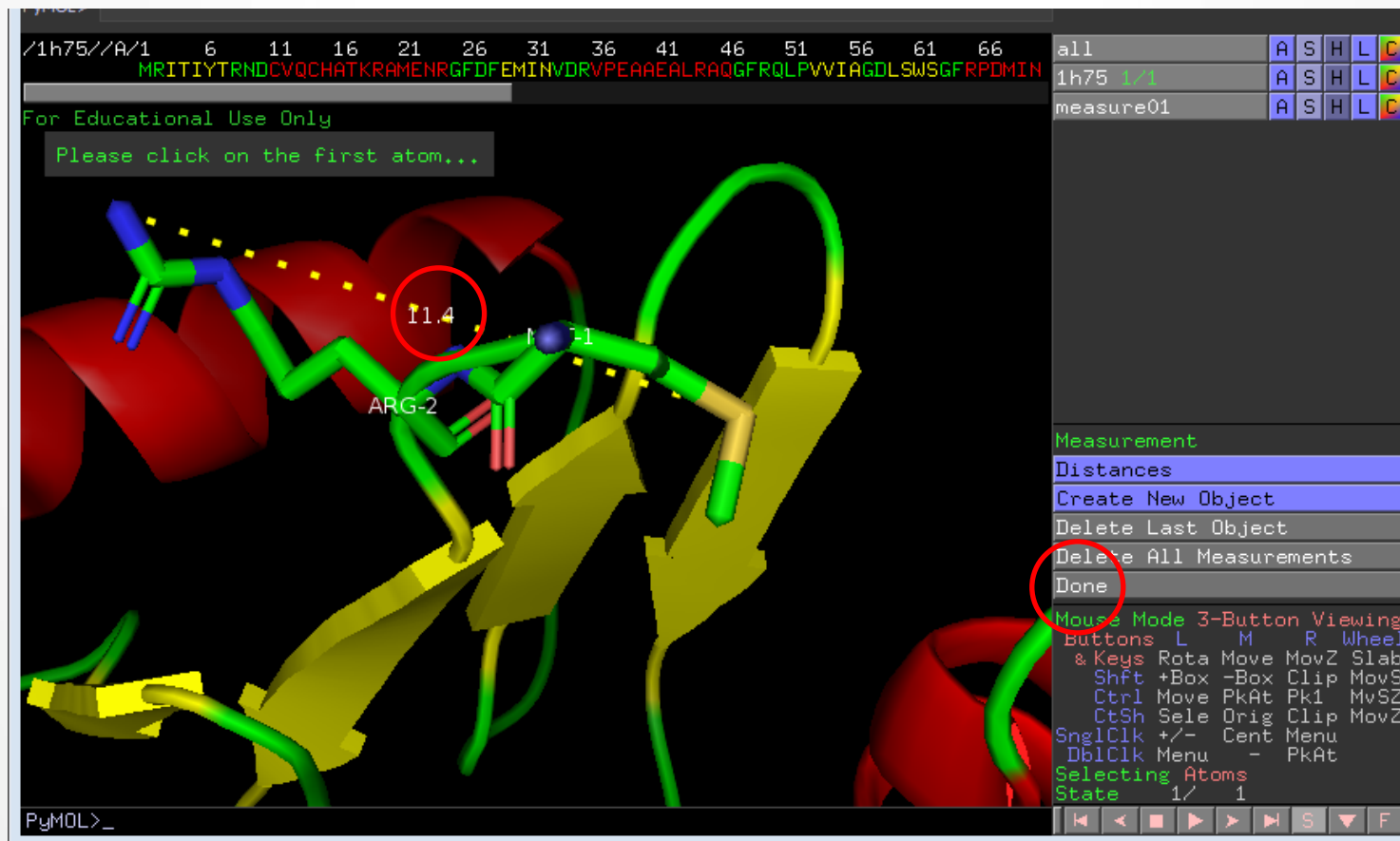
Stergerea ultimei măsurători

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;



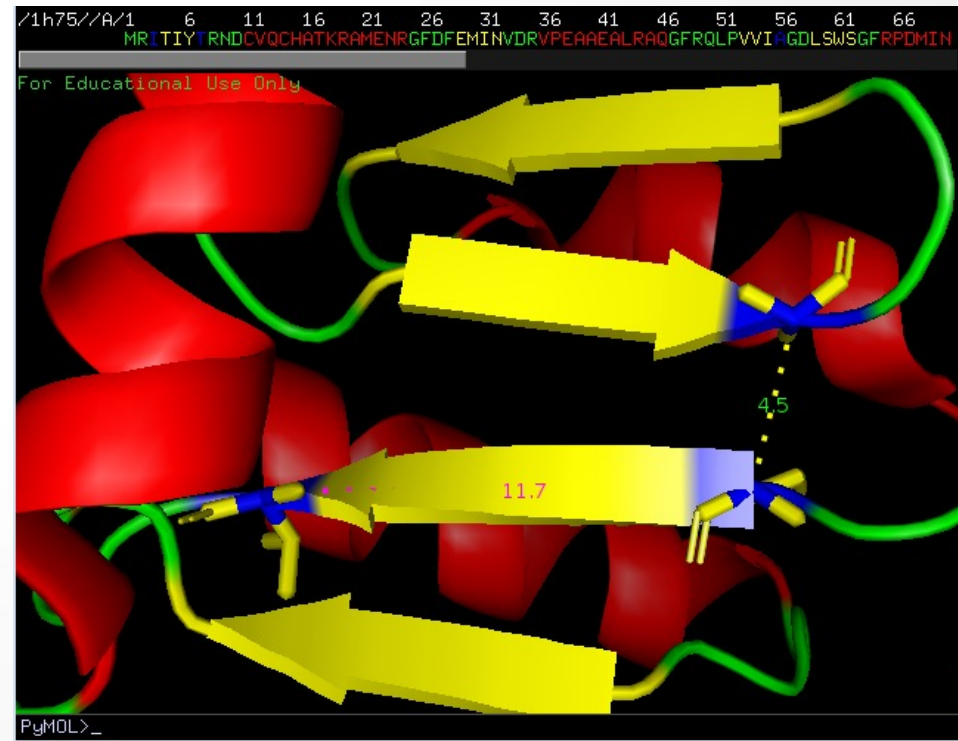
# Exercițiul 3 – la seminar

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.