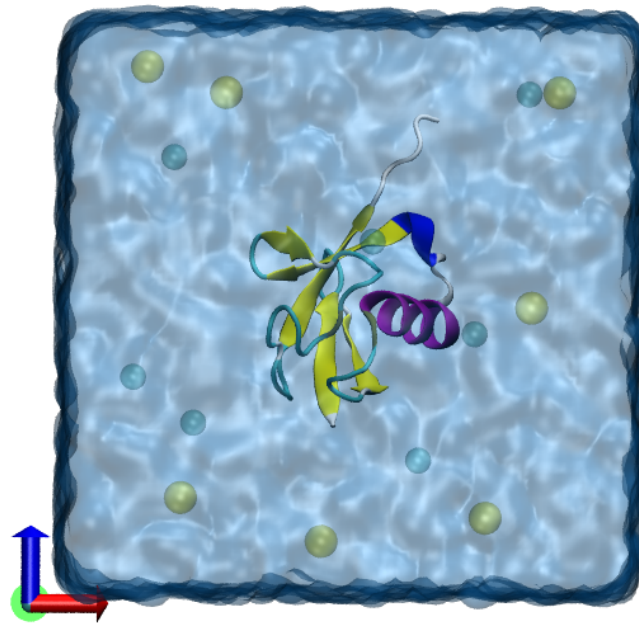


Visualización de proteínas usando VMD

Parte 2



Abrir

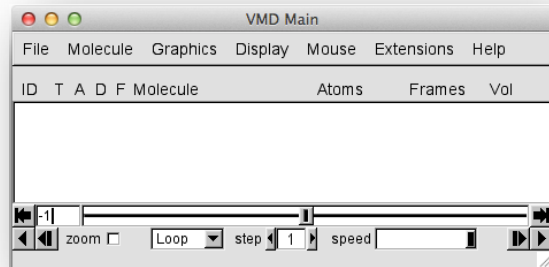


Cargar proteína

Se cargará la proteína ubiquitina entregada por el profesor.

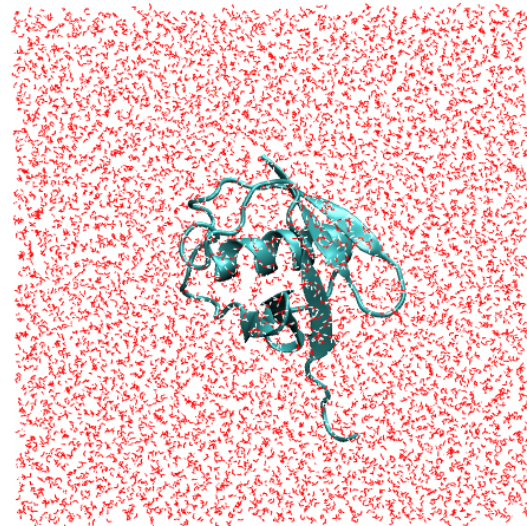
VMD Main → File → New Molecule... → Filename: **ubuquitin.psf**

VMD Main → File → Load Data Into Molecule... → Filename: **ubuquitin.pdb**



¿Qué contenía el archivo PDB?

¿Qué contiene el archivo PSF?



¿Qué contiene el archivo PSF?

PSF

```
1 !NTITLE
REMARKS original generated structure x-plor psf file

26190 !NATOM
  1 SOD  1   SOD  SOD  SOD   1.000000   22.9898   0
  2 SOD  2   SOD  SOD  SOD   1.000000   22.9898   0
  3 SOD  3   SOD  SOD  SOD   1.000000   22.9898   0
  4 SOD  4   SOD  SOD  SOD   1.000000   22.9898   0
  5 SOD  5   SOD  SOD  SOD   1.000000   22.9898   0
  6 SOD  6   SOD  SOD  SOD   1.000000   22.9898   0
  7 SOD  7   SOD  SOD  SOD   1.000000   22.9898   0
  8 CLA  1   CLA  CLA  CLA  -1.000000   35.4500   0
  9 CLA  2   CLA  CLA  CLA  -1.000000   35.4500   0
 10 CLA  3   CLA  CLA  CLA  -1.000000   35.4500   0
 11 CLA  4   CLA  CLA  CLA  -1.000000   35.4500   0
 12 CLA  5   CLA  CLA  CLA  -1.000000   35.4500   0
 13 CLA  6   CLA  CLA  CLA  -1.000000   35.4500   0
 14 CLA  7   CLA  CLA  CLA  -1.000000   35.4500   0
 15 UBIQ 1   MET  N   NH3  -0.300000   14.0070   0
 16 UBIQ 1   MET  HT1  HC   0.330000    1.0080   0
 17 UBIQ 1   MET  HT2  HC   0.330000    1.0080   0
 18 UBIQ 1   MET  HT3  HC   0.330000    1.0080   0
```

Mientras que el archivo PDB contiene toda la información de coordenadas atómicas que conforman un sistema, el archivo PSF contiene toda la información de conexión de dicho sistema, esto quiere decir que incluye nombres de átomos, que átomos están enlazados, y ángulos que forman.

Visualizar proteína

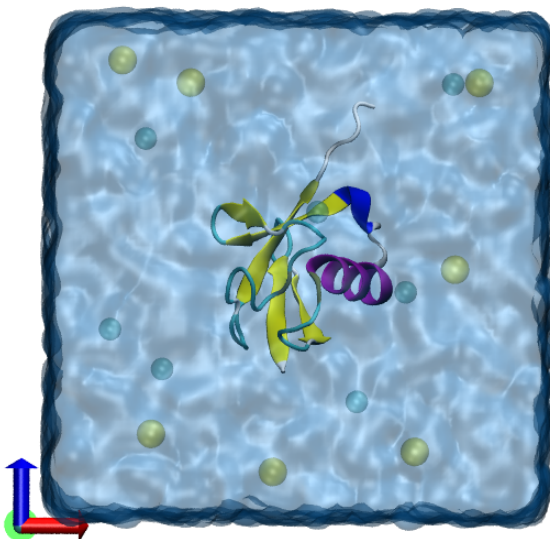
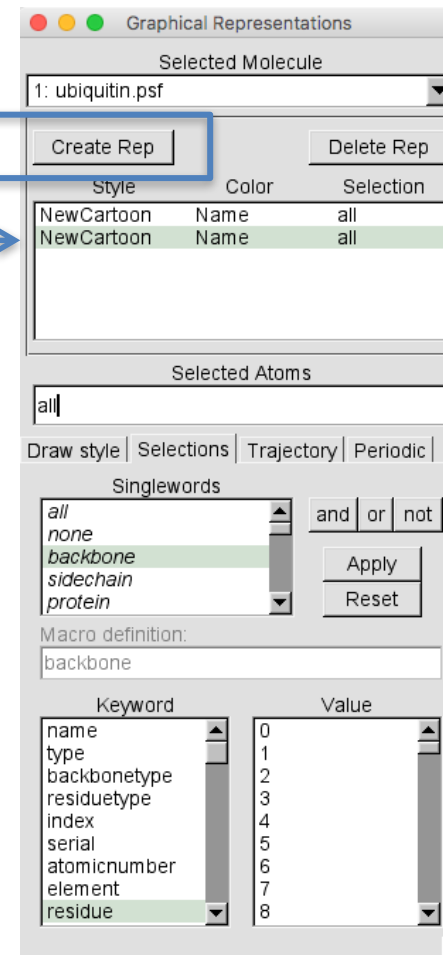
Si quieres obtener una imagen como la que se muestra abajo, es necesario realizar selecciones múltiples

- Graphical Representations → Create Rep.
- Luego puedes modificar cada replica con distintas selecciones.

Se creó una nueva replica



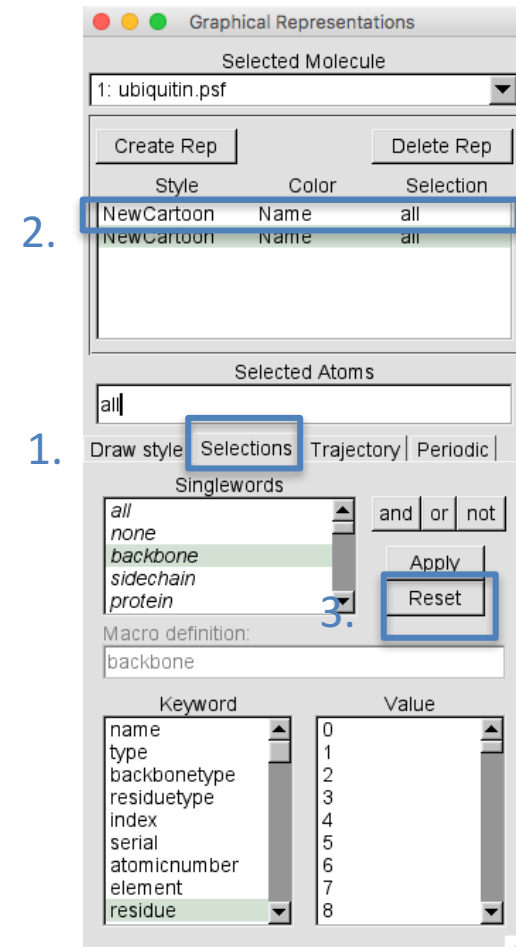
1.



Selecciones

Para editar cada replica, puedes ir a

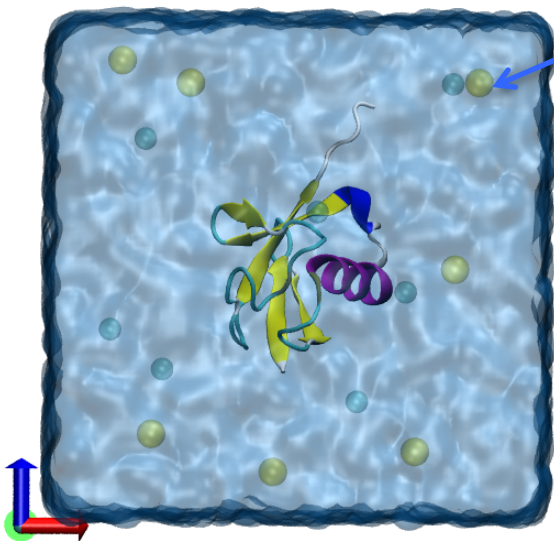
- **Graphical Representations** → **Selections**.
- Puedes buscar en Singlewords, palabras determinadas para distintos grupos atómicos.
- Antes de realizar la selección, **recuerda marcar la replica que quieres modificar** (2.).
- Luego haz clic en el **botón reset** (3.) → se encarga de eliminar la selección por defecto (all)
- Luego doble clic en la Singleword de tu interés, en este caso será **“protein”**
- Cambia el estilo de dibujo de tu selección a **“NewCartoon”**, como lo vimos en la clase pasada.



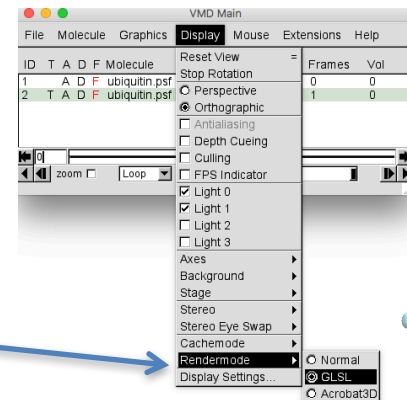
Selecciones

- Para el efecto del agua que rodea la proteína, solo debes modificar la segunda replica “all” con el estilo de dibujo “QuickSurf”.
- Si tu sistema aun no se parece al de la foto, recuerda modificar el material y color de la segunda replica.

Ahora solo faltan los iones de tu sistema, que se encuentran representados con método de dibujo ...

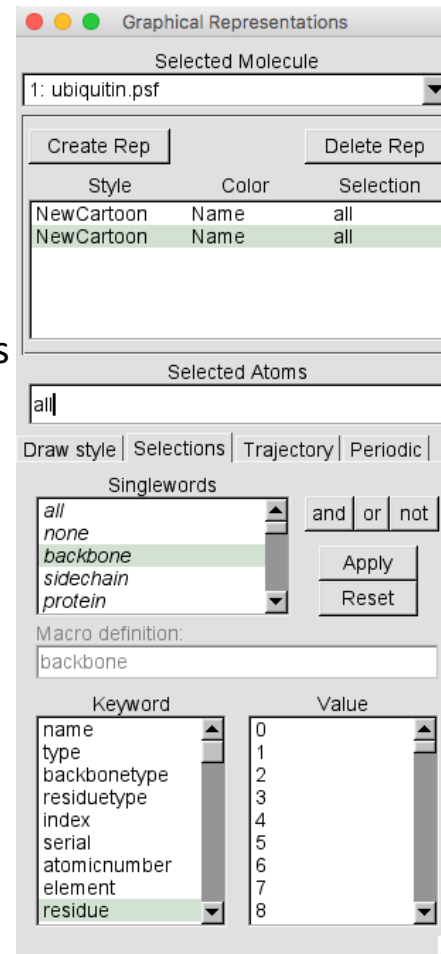


Para una mejor visualización activa Rendermode en Display→RenderMode→GLSL



Selecciones

- En la pestaña “**Selections**” también encontraras una sección llamada “**Keyword**”, en ella encontraras palabras que te ayudarán a realizar una selección mas específica de tu sistema.
- Algunos son:
 - name: encuentras nombres de átomos del sistema
 - index: enumeración de cada átomo del sistema
 - rename: código de letras para aguas, iones, ligando, lípidos
 - resid: enumeración de residuo de cada molécula del sistema o aminoácidos
 - chain: cadenas que contiene el sistema.

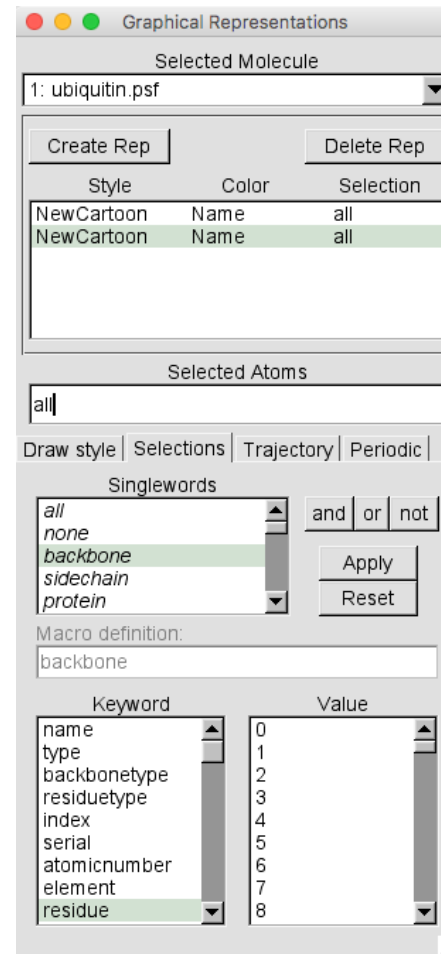


Selecciones

- Con “Keyword” puedes seleccionar lo mismo que en SingleWords

Keyword	SingleWords
waters	resname TIP3
ions	resname SOD CLA
ions	index 0 to 13
protein	chain U
protein	resid 1 to 76 and not resname TIP3 SOD CLA
protein	resname ALA ARG ASN ASP GLN GLU GLY...

NOTA: Recuerda que todas las selecciones dependen de cómo este definido el sistema en el archivo PDB



Actividad

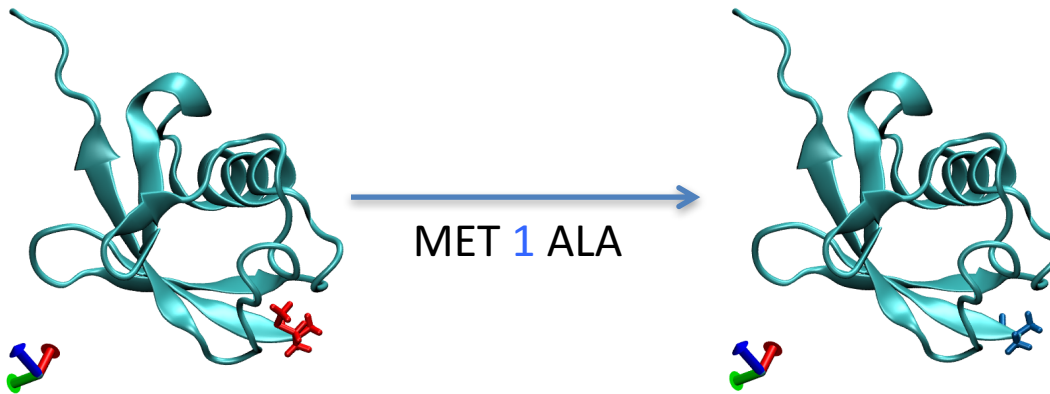
- Carga el sistema de canal de potasio en membrana (kcsa_popcwi.psf y kcsa_popcwi.pdb)
- Obtén una representación similar a la del sistema de ubiquitin, separando proteína (cada cadena de un color distinto), lípidos, iones y agua en distintos métodos de dibujos, materiales y colores.
- Trata de que sea visible cada parte del sistema y obtén una captura de pantalla de la ventana Display y Graphical Representations de vmd.
- NOTA: para una mejor visualización puedes ir a Display → Rendermode y activar GLSL, pero solo para sacar la imagen final, ya que ralentizara tu computador.
- NOTA: para las distintas selecciones recuerden buscar en Singlewords o Keywords → rename
- Adjunta la captura a tu informe.

Mutar residuo

- Sigue trabajando con el sistema de ubiquitin.
- Para mutar un residuo debes tener cargado previamente el PSF y PDB.
- Te diriges a:

Extensions → Modeling → Mutate Residue

- En Target residue, debes identificar el residuo que quieres mutar
- Recuerda que el nombre del segmento de tu proteína lo puedes encontrar en Selections → [Keyword segname](#).
- El ID del residuo, corresponde a “[resid](#)” en las selecciones.
- En Mutation debes colocar el código de tres letras del residuo que quieres poner en esa posición.
- RUN MUTATOR y obtendrás tu PSF y PDB mutado.



Mutator

Mutator performs point mutations on a protein
(based on internal coordinates).

Input

PSF:

PDB:

MUTATED

Target Residue

Segment name of target residue (optional):

ID of target residue:

Mutation (three letter residue name)

☐ Generate Free Energy Perturbation (FEP) files

FEP Prefix:

Mutator does not support DNA.
It is strongly recommended to perform a minimization
on the resulting structure.

Actividad

INSTRUCCIONES:

Sigue trabajando con el sistema de canal de potasio. Responder las preguntas y enviarlas al correo bit120.unab.republica@gmail.com. **Plazo de entrega: Jueves 18 de Mayo de 2017 hasta las 23:59 hrs.**

1. Genera una triple mutante en el sistema de canal de potasio, indica cuales son. Adjunta una captura de la ventana Display, Graphical Representation y Mutator, a tu informe comparando el sistema “wild type” con el mutado, contando los átomos de la proteína, ¿A que se debe la diferencia?. Verifica si el centro de la proteína cambia o no, ¿porque?
2. ¿Qué tipos de iones hay? ¿Cuántos hay de cada tipo?
3. ¿Cuántos átomos de la selección “waters and name OH2” hay? ¿cuántos átomos de la selección “waters” hay? ¿A que se debe la diferencia de números? ¿cuántas moléculas de agua tiene el sistema?.
4. ¿Cuántos átomos existen en la membrana lipídica? ¿cuántas moléculas de POPC hay?
5. ¿Cuántas moléculas de agua hay a 3 angstrom de la proteína?
6. Indique resname, resid, chain de los residuos que se encuentran a 6 angstrom de index 34980. (PISTA: considerar que la selección solo debe tomar atomos name CA de los residuos).