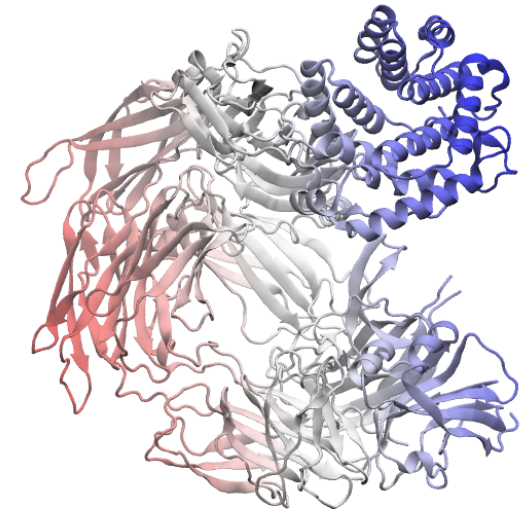
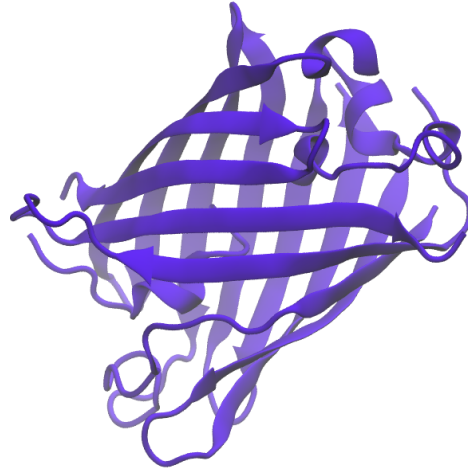
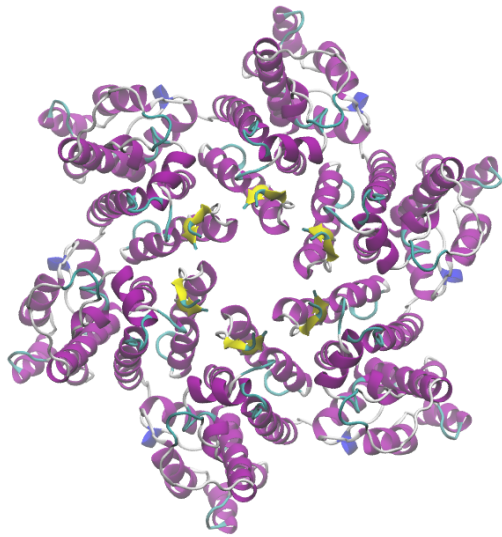


# Visualización de Proteínas usando VMD



# Descargar e instalar VMD

NIH CENTER FOR MACROMOLECULAR MODELING & BIOINFORMATICS | UNIVERSITY OF ILLINOIS AT URBANA-CHAMPAIGN

Type Keywords SEARCH

## THEORETICAL and COMPUTATIONAL BIOPHYSICS GROUP

Home Research Publications Software Instruction News Galleries Facilities About Us

Home Overview Publications Research Software

**2** **VMD Molecular Graphics Viewer**

NAMD Molecular Dynamics Simulator

BioCoRE Collaboratory Environment

MD Service Suite

Structural Biology Software Database

Computational Facility

Outreach

**1** **VMD Mailing List**

**Download VMD**

VMD Tutorials

VMD Manuals

VMD Community Pages

### VMD Visual Molecular Dynamics

VMD is a molecular visualization program for displaying, animating, and analyzing large biomolecular systems using 3-D graphics and built-in scripting. VMD supports computers running MacOS X, Unix, or Windows, is distributed free of charge, and includes source code. (more details...)

#### Spotlight

VMD provides the ability to render molecular scenes using external programs such as ray tracers and commercial animation packages. This feature can be used to attain higher image quality than is normally possible using the built-in OpenGL rendering features in VMD. The Tachyon parallel ray tracer is distributed with VMD.

**Other Spotlights**

#### Overview

Molecular representations  
VMD plugin library  
Molecular file formats  
GPU-accelerated computing  
Interactive molecular dynamics  
Programs that use VMD  
VMD research publications  
How to cite VMD  
VMD citation list (17,617 as of Mar'16)

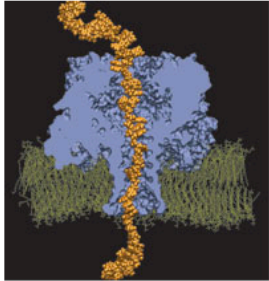
#### Download

**3**

Download (all versions)  
VMD 1.9.2 (MacOS X, Unix, Windows)  
VMD 1.9.1 (MacOS X, Unix, Windows)  
VMD script library  
License, Copyright and Disclaimer

#### News and Announcements

Molecular dynamics-based model refinement and validation for sub-5Å cryo-electron microscopy maps, eLife 2016 **NEW**  
Immersive Molecular Visualization with Omnidirectional Stereoscopic Ray Tracing and Remote Rendering, HPDAV 2016 **NEW**  
High Performance Molecular Visualization: In-Situ and Parallel Rendering with EGL, HPDAV 2016 **NEW**  
Evaluation of Emerging Energy-Efficient Heterogeneous Computing Platforms for Biomolecular and Cellular Simulation Workloads, HCW 2016 **NEW**  
Example VMD VR/3-D YouTube videos **NEW**  
Atomic Detail Visualization of Photosynthetic Membranes with GPU-Accelerated Ray Tracing, J. Par. Comp. 2016 **NEW**  
Chemical Visualization of Human Pathogens: the Retroviral Capsids, SC'15 Viz. Showcase (YouTube)  
VMD 1.9.2 image making tutorial video (YouTube)  
Multilevel Summation Method for Electrostatic Force Evaluation, JCTC 2015  
Updated Gromacs plugins for VMD 1.9.2  
VMD 1.9.2 Released  
Visualization of Energy Conversion Processes in a Light Harvesting Organelle at Atomic Detail, SC'14  
Petascale Tcl with NAMD, VMD, and Swift/T, HPTCDL'14  
GPU-Accelerated Analysis and Visualization of Large Structures Solved by Molecular Dynamics Flexible Fitting, FD169, 2014.  
Methodologies for the Analysis of Instantaneous Lipid Diffusion in MD Simulations of Large Membrane Systems, FD169, 2014.  
Past announcements



# Descargar PDB

Se descargará una proteína desde el **Protein Data Bank (PDB)**:  
<http://www.rcsb.org/>

Código PDB: **1AQ2**

The screenshot displays the RCSB PDB website interface. At the top, there is a navigation bar with links: Deposit, Search, Visualize, Analyze, Download, Learn, and More. A search bar is located in the center, with the text "Search by PDB ID, author, macromolecule, sequence, or ligands". Below the search bar, there are links for "Advanced Search" and "Browse by Annotations".

The main content area shows the entry for **1AQ2**, **PHOSPHOENOLPYRUVATE CARBOXYKINASE**. The entry details include: DOI: 10.2210/pdb1aq2/pdb, Classification: **KINASE**, Deposited: 1997-08-05, Released: 1998-10-14, Deposition author(s): **Tari, L.W., Matte, A., Goldie, H., Delbaere, L.T.J.**, Organism: **Escherichia coli**, and Expression System: Escherichia coli.

On the left, there is a 3D structure visualization of the protein. Below the structure, there is a link to "View in 3D: JSmol or PV (in Browser)".

On the right, there is a "Download Files" button. A dropdown menu is open, showing the following options: FASTA Sequence, PDB Format, PDB Format (gz), PDBx/mmCIF Format, PDBx/mmCIF Format (gz), PDBML/XML Format (gz), Structure Factors (CIF), Structure Factors (CIF - gz), and Biological Assembly (PDB format - gz) (A).

At the bottom, there is a "wwPDB Validation" section with a bar chart showing the following metrics: Clashscore, Ramachandran outliers, Sidechain outliers, and RSRZ outliers. The chart indicates that the structure is of high quality, with all metrics falling within the "Good" range.

# Identificar contenido del PDB

- Al descargar una estructura cristalográfica desde PDB, es importante revisar la información contenida en el archivo de extensión .pdb
- Para esto, abrimos el archivo .pdb con nuestro editor de texto favorito (por ejemplo: WordPad o Block de Notas en windows, gedit en linux, o TextEdit en mac).

<b>HEADER</b>	<i>Nombre y fecha de creación del archivo PDB.</i>
<b>COMPND</b>	<i>Nombre de la molécula.</i>
<b>SOURCE</b>	<i>Organismo del que se obtuvo la proteína.</i>
<b>AUTHOR</b>	<i>Lista de los Autores que proporcionaron la estructura molecular al PDB</i>
<b>REVDAT</b>	<i>Datos de revisión de la estructura de la proteína.</i>
<b>REMARK</b>	<i>Comentarios en relación a los artículos en donde se publicó la estructura molecular o sobre las características de la molécula.</i>
<b>SPRSDE</b>	<i>Lista de archivos de coordenadas para la misma estructura.</i>
<b>SEQRES</b>	<i>Secuencia de los aminoácidos de la proteína.</i>
<b>FTNOTE</b>	<i>Notas de pie de página. No todos los archivos lo tienen.</i>
<b>HET &amp; FORMUL</b>	<i>Lista de cofactores, grupos prostéticos, inhibidores y otras sustancias no proteicas presentes.</i>
<b>HELIX, SHEET &amp; TURN</b>	<i>Lista de los residuos con estructura secundaria en la proteína.</i>
<b>CRYST1, ORIG &amp; SCALE</b>	<i>Información general sobre los cristales con los que se obtuvo la estructura por Rayos X</i>
<b>ATOM &amp; HETATM</b>	<i>Contiene la información de la posición espacial en los ejes X,Y y Z de cada uno de los átomos, especificando el residuo y la cadena.</i>
<b>CONECT</b>	<i>Enlaces formados entre los átomos no proteicos presentes en el PDB.</i>
<b>MASTER &amp; END</b>	<i>Indican la finalización del archivo.</i>

# Identificar contenido del PDB

ATOM	1	N	ASN	A	4	56.782	-25.220	15.666	1.00	64.32		N
ATOM	2	CA	ASN	A	4	57.408	-25.360	17.014	1.00	65.19		C
ATOM	3	C	ASN	A	4	56.672	-24.501	18.038	1.00	67.27		C
ATOM	4	O	ASN	A	4	56.508	-23.285	17.850	1.00	66.75		O
ATOM	5	CB	ASN	A	4	58.882	-24.972	16.959	1.00	63.84		C
ATOM	6	N	ASN	A	5	56.258	-25.148	19.129	1.00	69.44		N
ATOM	7	CA	ASN	A	5	55.521	-24.502	20.221	1.00	72.16		C
ATOM	8	C	ASN	A	5	56.057	-23.127	20.651	1.00	74.94		C
ATOM	9	O	ASN	A	5	57.268	-22.870	20.607	1.00	73.53		O
ATOM	10	CB	ASN	A	5	55.453	-25.444	21.427	1.00	71.14		C
ATOM	11	N	GLY	A	6	55.134	-22.255	21.063	1.00	77.37		N
ATOM	12	CA	GLY	A	6	55.489	-20.915	21.503	1.00	79.78		C
ATOM	13	C	GLY	A	6	55.039	-19.850	20.519	1.00	82.20		C
ATOM	14	O	GLY	A	6	53.985	-19.235	20.690	1.00	83.52		O

Nº de átomo

Nombre del átomo

Nombre del residuo

Nombre de la cadena

Nº del residuo

Coordenadas x y z

Ocupancia

Factor de temperatura

Nombre del segmento

Símbolo del elemento

# Identificar contenido del PDB

- La sección **HETATM**, al final del archivo .pdb, contiene información correspondiente a todas las moléculas que fueron cristalizadas junto a la proteína y que no poseen estructura secundaria. Por ejemplo: iones, inhibidores, sustratos, agua.

HETATM	4116	MN	MN	A	543	31.603	1.346	9.663	1.00	18.20	MN
HETATM	4117	MG	MG	A	544	31.574	4.572	13.755	1.00	20.81	MG
HETATM	4118	PG	ATP	A	541	31.346	4.585	10.377	1.00	20.40	P
HETATM	4119	01G	ATP	A	541	30.803	3.264	9.987	1.00	16.32	O
HETATM	4120	02G	ATP	A	541	32.195	5.210	9.328	1.00	23.99	O
HETATM	4121	03G	ATP	A	541	32.011	4.534	11.671	1.00	28.91	O
HETATM	4122	PB	ATP	A	541	29.281	6.154	11.848	1.00	21.40	P
HETATM	4123	01B	ATP	A	541	27.860	5.856	11.500	1.00	23.11	O
HETATM	4124	02B	ATP	A	541	29.873	5.577	13.065	1.00	26.47	O
HETATM	4125	03B	ATP	A	541	30.179	5.752	10.443	1.00	20.62	O
HETATM	4126	PA	ATP	A	541	29.655	8.515	13.133	1.00	22.39	P
HETATM	4127	01A	ATP	A	541	28.646	8.035	14.097	1.00	28.12	O
HETATM	4128	02A	ATP	A	541	31.084	8.462	13.512	1.00	22.89	O
HETATM	4129	03A	ATP	A	541	29.488	7.710	11.749	1.00	18.02	O



Nombre del residuo

Abrir

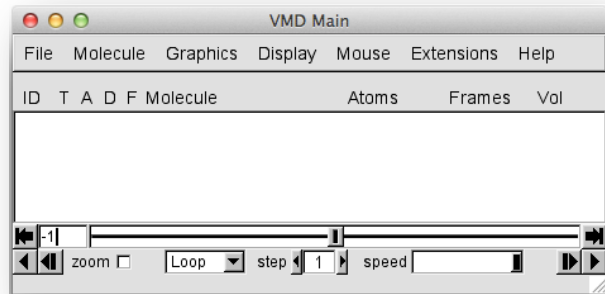




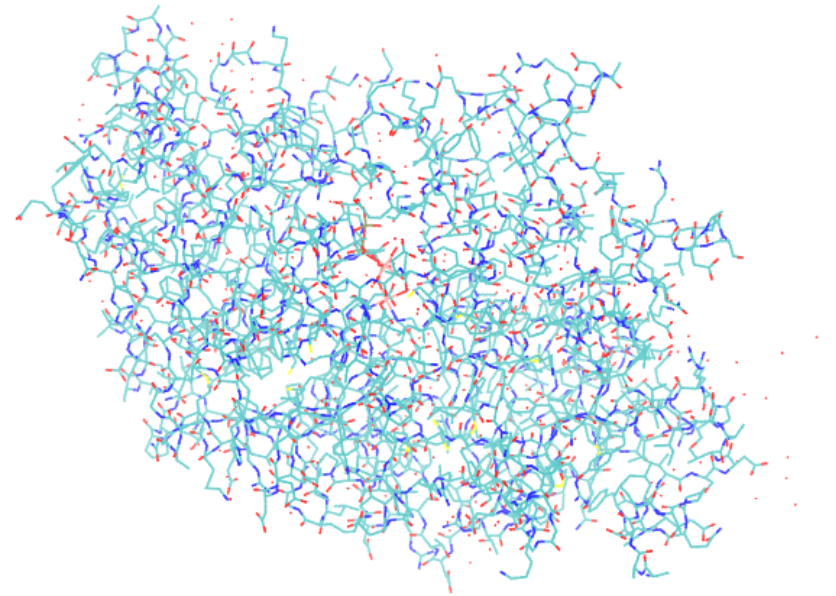
# Cargar proteína

Se cargará la proteína desde el Protein Data Bank (PDB): <http://www.rcsb.org/>, o se cargará a partir de la carpeta de destino del archivo .pdb descargado.

VMD Main → File → New Molecule... → Filename: **1AQ2**



Si se dispone de conexión a Internet, automáticamente el programa cargará la información cristalográfica de la proteína señalada.

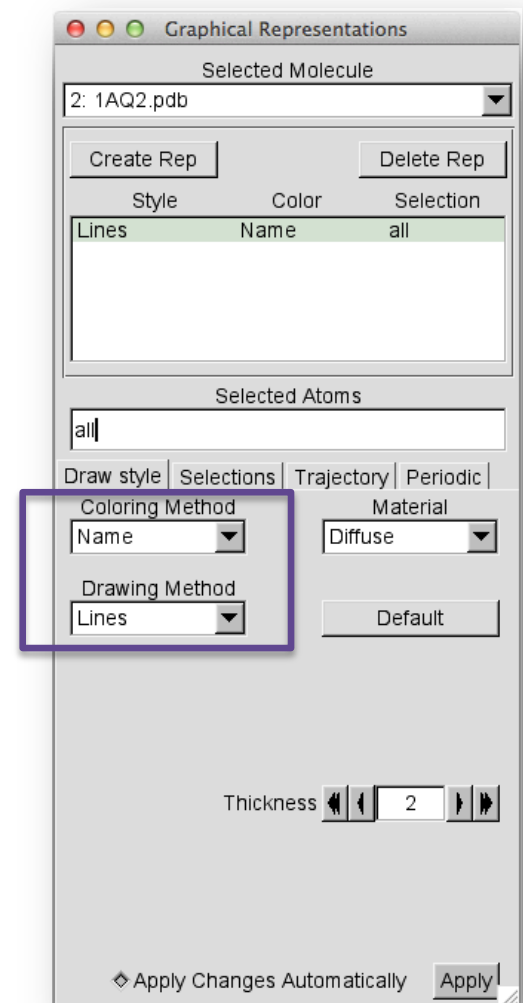
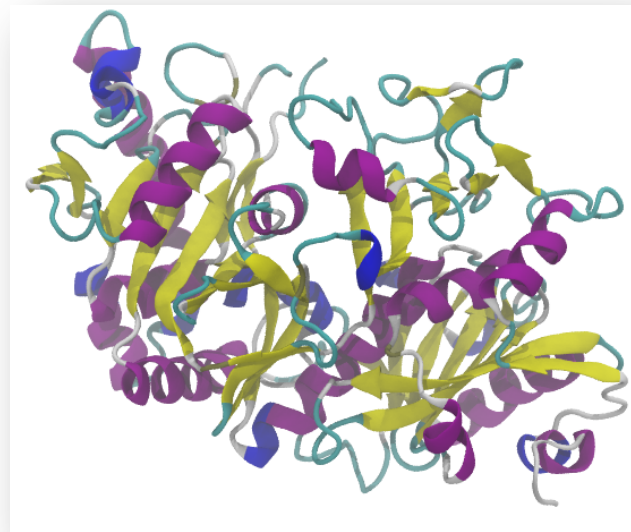




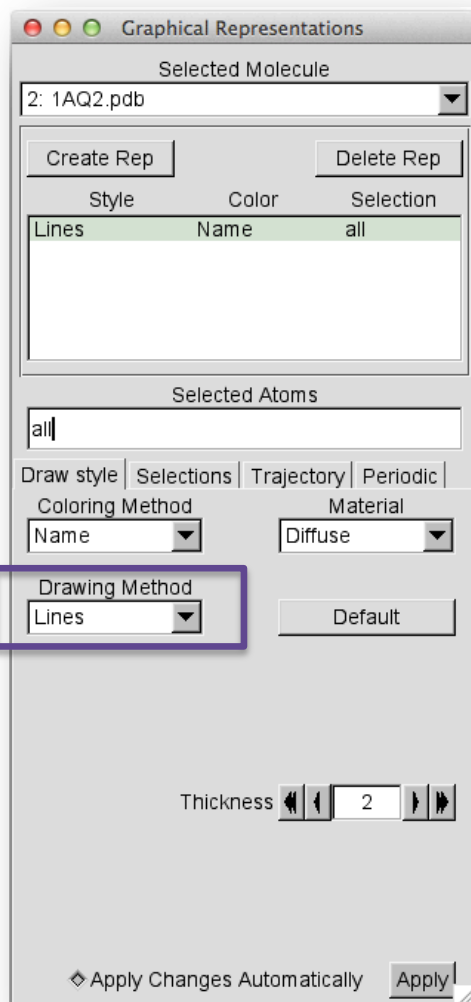
# Visualizar proteína

Para una mejor visualización, ir a Graphics → Representations

- Drawing Method → New Cartoon
- Luego, Coloring Method → Secondary Structure.



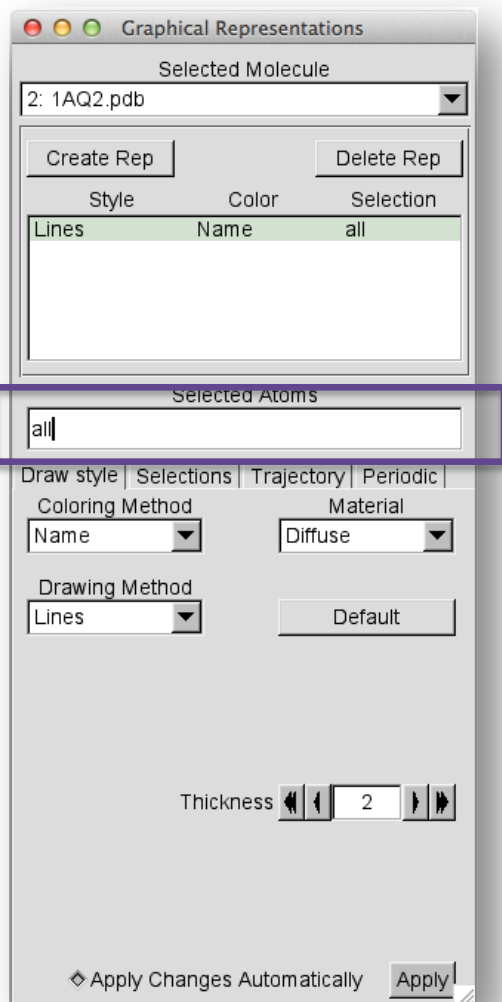
# Crear representaciones



Cada **método de dibujo** tiene sus propios parámetros.

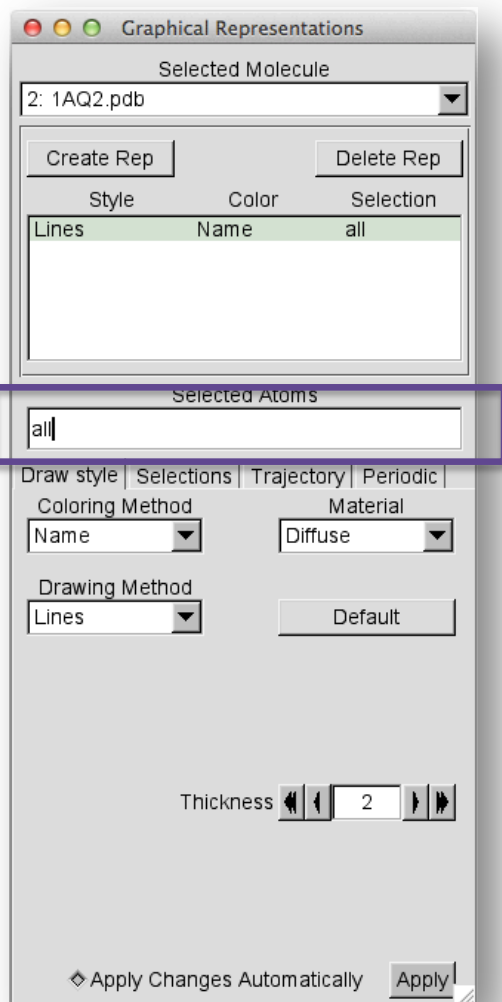
- **VDW (van der Waals)** → Cada átomo es representado como una esfera, esto permite visualizar la forma y el volumen de la molécula.
- **New Cartoon** → Permite visualizar de forma simplificada la estructura secundaria de la proteína. Las hélices se visualizan en forma de espiral, laminas  $\beta$  en forma de flechas y las otras estructuras en forma de un tubo delgado. Este método es el de mayor uso en representaciones de sistemas proteicos.
- **CPK** → Emula los sistemas de bolas de radio variable y tubos utilizados en química para visualizar moléculas.
- **Licorice** → Representa los átomos como esferas de radio fijo que no puede ser modificado.

# Crear representaciones



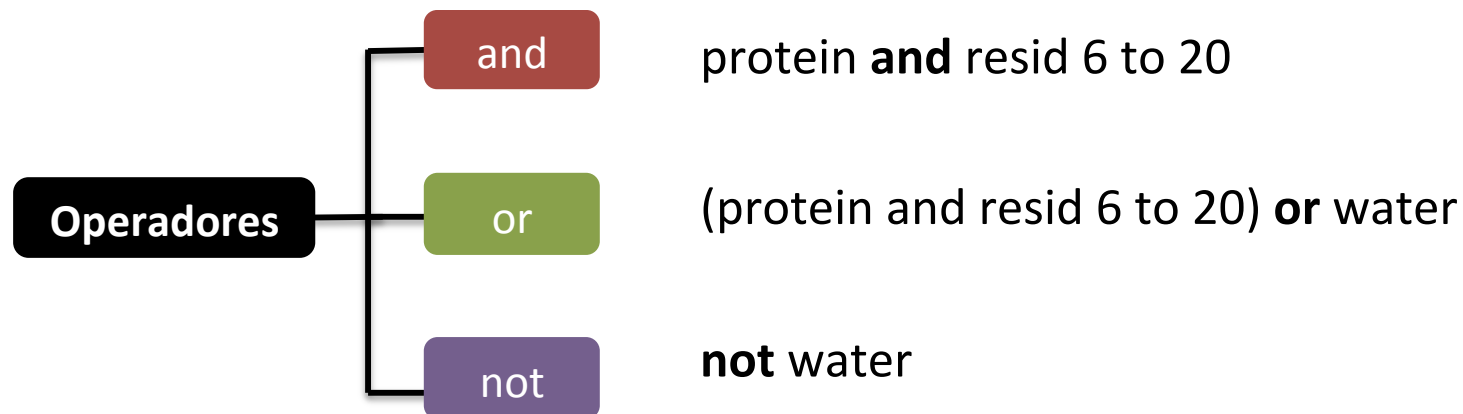
¿Qué queremos visualizar?	¿Cómo lo representamos en VMD?
Proteína	
Esqueleto de la proteína	
Cadenas laterales	
Hélices	
Sábanas beta	
Aminoácidos aromáticos	
Aminoácidos básicos	
Aminoácidos ácidos	
Todo menos la proteína	
Aguas	
iones	
ligandos	

# Crear representaciones



¿Qué queremos visualizar?	¿Cómo lo representamos en VMD?
Proteína	protein
Esqueleto de la proteína	backbone
Cadenas laterales	sidechain
Hélices	helix
Sábanas beta	betasheet
Aminoácidos aromáticos	aromatic
Aminoácidos básicos	basic
Aminoácidos ácidos	acidic
Todo menos la proteína	all and not protein
Aguas	water
iones	ions
ligandos	resname XXX

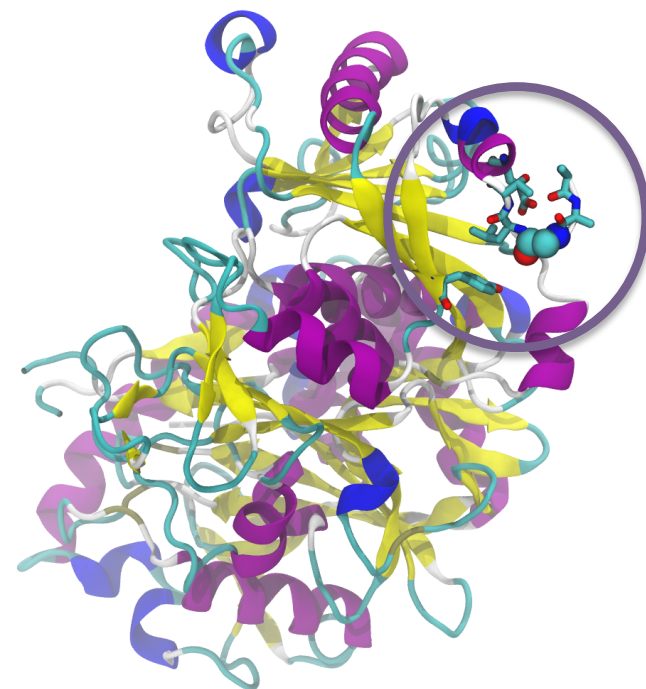
# Crear representaciones



Para observar residuos cercanos a una selección específica, utilizamos una representación más compleja:

**protein and same residue as within 5 of resid 6**

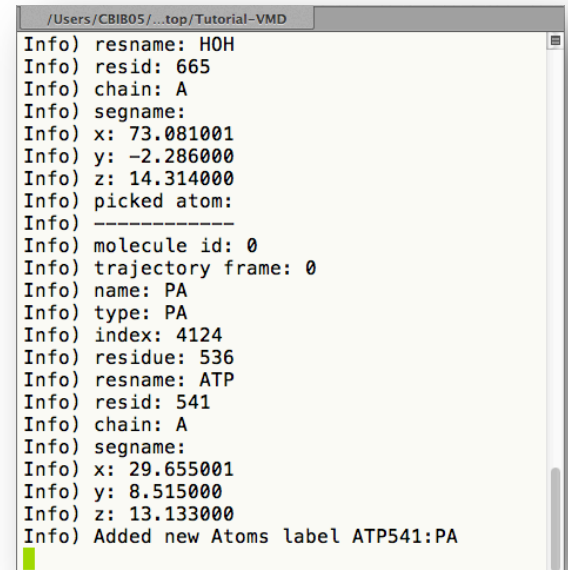
**Tarea 2:** Identificar aminoácidos cercanos al residuo 6



# Acciones básicas del teclado

- Tecla **1** → Se obtienen las características de un átomo específico. \*
- Tecla **2** → Se obtiene la distancia entre dos átomos específicos. \*
- Tecla **3** → Se obtiene el ángulo entre tres átomos específicos. \*
- Tecla **4** → Se obtiene el ángulo diedro entre cuatro átomos específicos. \*
- Tecla **r** → Rotar la proteína (estado inicial).
- Tecla **t** → Traslada la proteína (solo visualmente).
- Tecla **s** → Aumentar o disminuir la proteína (zoom).

\* VMD Main → Graphics → Labels...



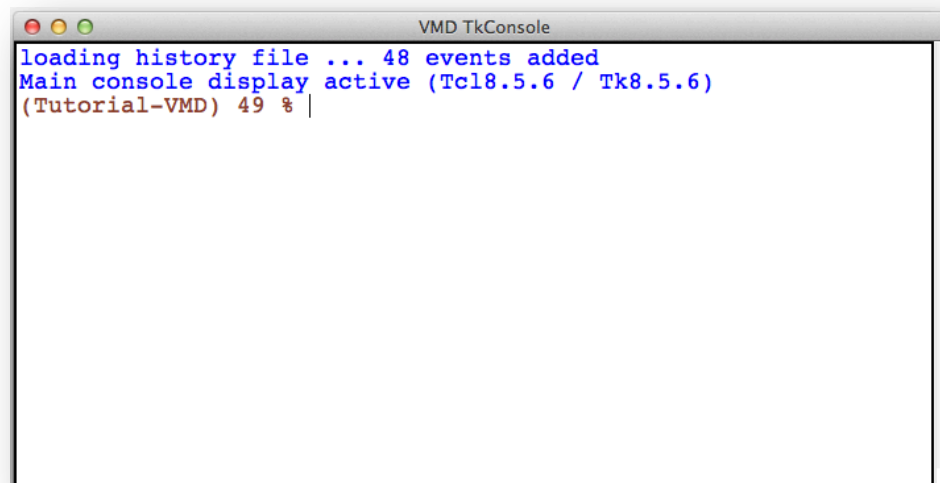
```
/Users/CBIB05/...top/Tutorial-VMD
Info) resname: HOH
Info) resid: 665
Info) chain: A
Info) segname:
Info) x: 73.081001
Info) y: -2.286000
Info) z: 14.314000
Info) picked atom:
Info) -----
Info) molecule id: 0
Info) trajectory frame: 0
Info) name: PA
Info) type: PA
Info) index: 4124
Info) residue: 536
Info) resname: ATP
Info) resid: 541
Info) chain: A
Info) segname:
Info) x: 29.655001
Info) y: 8.515000
Info) z: 13.133000
Info) Added new Atoms label ATP541:PA
```



# Tk Consola

La **TK consola** nos permite la ejecución de scripts, escritos en formato de programación tcl, para llevar a cabo una tarea. Sin embargo, la programación no es el propósito de este curso, por lo tanto, aplicaremos conceptos básicos para realizar tareas simples pero de gran utilidad.

VMD Main → Extensions → Tk Console



```
VMD TkConsole
loading history file ... 48 events added
Main console display active (Tcl8.5.6 / Tk8.5.6)
(Tutorial-VMD) 49 % |
```

# Tk Consola

- Seleccionar una molécula:

```
set todo [atomselect top "all"]  
set proteina [atomselect top "protein"]
```

***todo** y **proteina** son variables que guardan la selección que le señalamos.*

- Guardar selección:

```
$proteina writepdb proteina_sola.pdb
```

*Se antepone el signo \$ a una variable para llamarla (**\$proteina**).*

- Contar átomos de la selección:

```
$todo num
```

- Localizar la selección (centro):

```
measure center $todo
```

*El tamaño final del sistema se calcula mediante la diferencia o distancia entre los vectores:*

- Tamaño del sistema:

```
measure minmax $todo
```

*$X = X_2 - X_1$   
 $Y = Y_2 - Y_1$   
 $Z = Z_2 - Z_1$*

- Mover una selección en el eje Z:

```
$proteina moveby {0 0 40}
```

*Dentro de las llaves van las unidades en angstrom que quiero mover en los ejes {**x y z**}.*

# Actividad en Clases

## INSTRUCCIONES:

Descargar la proteína **PDB ID: 1OS1** (*Structure of Phosphoenolpyruvate Carboxykinase complexed with ATP, Mg, Ca and pyruvate*). Responder las preguntas y enviarlas al correo **bit120.unab.republica@gmail.com** . **Plazo de entrega Jueves 11 de mayo de 2017 hasta las 23:59 hrs.**

- 1)- Señale el método experimental por el cuál se resolvió la estructura de la proteína 1OS1 y la resolución que tiene.
- 2)- Identifique las moléculas cristalizadas en el PDB, (PISTA: proteínas, moléculas orgánicas, ligandos, agua, iones, etc.).
- 3)- Identificar aminoácidos cercanos (4 angstrom) al residuo 20 de la proteína. Señalar código de 3 letras y número de residuo del aminoácido (Ej: Lys45, Val87, etc.)
- 4)- Señale el número de moléculas de agua del sistema si las hubiese.
- 5)- ¿Cuál es el centro de la molécula de ATP?

# Actividad en Clases

- 6)-** Indique el tamaño (x, y, z) de todo el sistema.
- 7)-** ¿Cuáles son los aminoácidos ubicados a 3 Å de la molécula **PYR**?
- 8)-** Señale la distancia entre los carbono alfa (name CA) de los aminoácidos Gln34 y Thr8.
- 9)-** Indique la descripción (name, type, index, residue, resname, resid, chain, x, y, z) del átomo “serial 3391”
- 10)-** Indique qué ion se encuentra más cercano al ATP y señale las distancias correspondientes (PISTA: Considerar el último fosforo del ATP name PG).