

Ресурсы для обучения

Хорошая методичка с основами <http://www.pitt.edu/~epolinko/IntroPyMOL.pdf>

Pymol wiki https://pymolwiki.org/index.php/Main_Page

Плейлист от Molecular Memory https://www.youtube.com/playlist?list=PLUMhYZpMLtaL_Z7to3by2ATHP-cl4ma5X

[Еще один Cheat Sheet](#)

Открытие файла:

`>fetch [pdb_id]` - с сайта PDB (пример: `>fetch 2mgu` - загрузится структура токсина Hm-3)

`>load [filename or path to file]` - загрузить с диска

File->Open... - диалоговое окно для загрузки с диска

Можно использовать команды из Linux: `cd`, `ls`, `pwd` для навигации по папкам

File->Save Session As - сохранение сессии

***.pse** - формат сессии PyMOL

Сохраняем текущую сессию, затем все стираем из памяти программы

File->Reinitialize->Everything

Навигация в режиме 3-Button Viewing:

LeftDrag - вращение структуры (2 режима) ->

RightDrag - зум

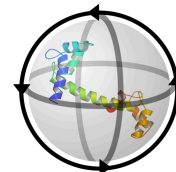
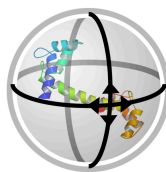
MiddleDrag - перемещение структуры

Wheel - clipping

MiddleClick - отцентровать атом

Ctrl+Wheel - перемещение молекулы сквозь плоскости обрезки

Shift+Wheel - перемещение обеих плоскостей обрезки



В режиме 3 Button Editing (Mouse->3 Button Editing или клик на Mouse mode внизу справа)

Ctrl+LeftDrag - перемещаем атом

Ctrl+RightDrag - вращаем связь (вращается часть молекулы, ближайшая к клику)

Управление объектами:



A - action, (assign sec. struc.(= команда `>dss`))

S - show (ribbon, lines, sticks, spheres, mesh, surface, dots, mainchain sticks) или команда: `>show sticks, (sc. or name CA) and not h.`

H - Hide (или команда: `>hide surface, all`)

L - Label (подписать названия остатков - **L->Residues**. Эти лейблы можно подвинуть в пространстве в режиме Editing)

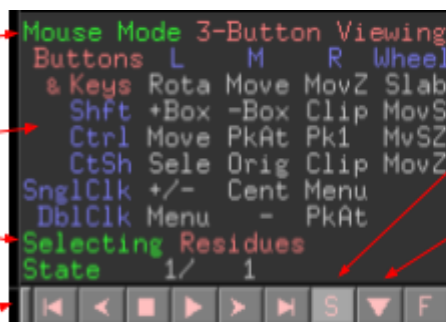
C - Color (можно командой `>color [color_name], [selection]; >color magenta, resn GLN+ASN+THR+SER+HIS`)

Режим мыши (Viewing/Editing)
Sequence

Подсказки с действиями мыши

Режим выделения (Residues, Atoms, ...)
режим

Управление видео/переключение между
состояниями



Показать

Движение камеры

Полноэкранный

Сохранение изображения:

File -> Export Image As -> PNG - далее можно выбрать настройки: raytracing, разрешение, название файла

`>ray` - применит raytracing к изображению

`>png [filename], [x res], [y res]` - сохранит файл с выбранным названием и разрешением.

Опциональный параметр `ray=1` - применит raytracing

Пример: `>png my_filename, 1600, 1200, ray=1`

Измерения:

Wizard->Measurement - появится панель с кнопками под панелью объектов

Расстояния, углы, двугранные углы и др. (кнопка **Distances**).

Можно сохранять как отдельные объекты (кнопка **Merge with previous**)

После окончания работы, нажимаем **Done**

Выделение:

`>sele/select [условие или логическое выражение]` - выделение сохранится во временном объекте (sele)

`>sele/select [название], [условие или логическое выражение]` - выделение сохранится отдельным объектом

Можно использовать название объектов, логические выражение or/and, скобки.

/объект/сегменты/цепочки/остатки/атомы - тоже вариант выделения

Пример: `>select bb4-10+20, hm3///4-10+20/CA+N+H+C+O`

Объекты, доступные для выделения:

resn (r.) - название остатка

resi (i.) - номер остатка

name (n.) - название атома

elem (e.) - химический элемент

chain (c.) - номер цепочки

hydrogens (h.) - водород

backbone (bb.) - основная цепь

sidechain (sc.) - боковая цепь

ss - вторичная структура (s, l или h)

Полная таблица с описанием объектов и примерами: https://pymolwiki.org/index.php/Selection_Algebra

Примеры выделения:

`>sele cyss, sc. and not h. and resn CYSS+CYS`

`>sele heavy_sc_some_residues, resi 1-6+10-12 and not h. and (sc or name CA)` ("-" для указания диапазона)

`>sele new_selection, byres [selection1] within 3.5 of [selection2]` - выделить остатки selection1, находящиеся в 3.5 Å от selection2 (выражение **byres** расширит итоговое выделение от атомов, до остатков)

Повернуть структуру вокруг оси на угол

`>turn y, 180`

Полезные настройки

`>set cartoon_rect_length, 1.2`

`>set cartoon_rect_width, 0.3`

`>set cartoon_discrete_colors, on`

`>bg_color white` (либо **Display->Background->White**)

Выравнивание ЯМР-структур с несколькими состояниями:

`>set all_states, on` - показываем все структуры белка

`>select bb, bb. and not h.` - выделяем только тяжелую часть основной цепи

`>intra_fit bb, 1` - выравниваем все состояния на 1е состояние по выделению bb

Можно объекты из нескольких состояний разделить на отдельные объекты:

`>split_states` или **A->state->split**

Загрузка скриптов (при загрузке они сразу исполняются):

`>load color_h.py` - загрузка скриптов на Python ([color_h](#)). Внутри этого скрипта 2 функции: `color_h` и `color_h2` - позволяет раскрасить остатки согласно гидрофобному потенциалу. Выполнить функцию: `>run color_h`

>load pymol_script.pml - загрузка макросов PyMol (в каждой строке команда PyMol)

Изображение Электростатического потенциала

A->generate->vacuum electrostatics->protein contact potential

Сложнее, но лучше:

Загружаем pdb на <http://server.poissonboltzmann.org/>, либо на сайте указываем pdb id, pdb2pqr, затем перекидываем результаты в arps и оттуда скачиваем *.dx

затем выполняем следующее:

>load [filename].dx - появится объект с названием [filename]

>ramp_new espramp, [filename], [-7, 0, 7] - в последнем параметре можно менять -7 и 7 - границы отображения потенциала

>show surface

>set surface_color, espramp

>set surface_ramp_above_mode

Полезные настройки для поверхностей

Setting->Surface->Ignore Unsurfaced

Setting->Surface->Color->Light Gray

Setting->Transparency->Surface->20%

Сцены:

Сцены позволяют сохранить раскраску и ориентацию внутри файла

С помощью них проще делать мультики

Scene->Append

Сцены можно переименовывать **RightClick** на названии сцены **Rename**

>scene 001, store - сохранить сцену

>scene 001, update, [some annotation] (либо **RightClick** на названии сцены **Update**) - обновить состояние в сцене на текущее

>super [selection1], [selection2] - выравнивание в пространстве двух структур

>save filename.fasta, [selection] - сохраняем белковый сиквенс выделения в формат Fasta

Поиск полярных контактов - изобразятся желтым пунктиром

A->find->polar contacts - поиск полярных контактов

Мультики

стандартная скорость - 30 fps

для 60 секундного видео - 1800 кадров

>mset 1x1800

выбираем сцену 001, фиксируем ее на 1м кадре

>mview store, 1 - также для остальных сцен

Для запуска:

>frame 1

>mplay

>mstop - остановка

Сохраняем полученное видео

File->Export Movie As->MPEG (может понадобится установка кодека ffmpeg)

Можно двигать ключевые кадры вниз,

Перезаписать мультик - снова mset