Manual

BioBlender 2.1

2020-04-08

Índice

- 1. ¿Qué es BioBlender?
- 2. Requisitos
- 3. Instalar BioBlender
- 4. Importar un archivo PDB
- 5. Cambiar las vistas de la molécula
- 6. Movimiento de la proteína usando el motor físico de Blender
- 7. Calcular y visualizar el Potencial Lipofílico de la molécula (MLP)
- 8. Calcular y vizualizar el potencial electrostático (EP)
- 9. Exportar el archivo PDB
- 10. Calcular el NMA
- 11. Apuntes importante para su conocimiento.

¿Qué es BioBlender?

BioBlender es un paquete de software basado en el software de modelado 3D de código abierto Blender.

La biología funciona a nanoescala, con objetos invisibles para el ojo humano. Con BioBlender es posible mostrar algunos de los caracteres que pueblan nuestras células, en base a datos científicos y al más alto nivel de manipulación 3D. Científicos de todo el mundo estudian proteínas a nivel atómico y depositan información en el repositorio público Protein Data Bank, donde cada molécula se describe como la lista de sus átomos y sus coordenadas 3D.

Con BioBlender, los usuarios pueden manejar proteínas en el espacio 3D, mostrar su superficie de una manera fotorrealista y elaborar movimientos de proteínas sobre la base de conformaciones conocidas.

BioBlender es una implementación de Blender, un programa de código abierto, distribuido libremente, multiplataforma, interoperable y compatible de animación 3D, efectos visuales y videojuegos.

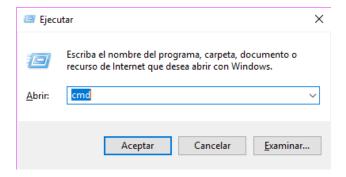
La combinación de gráficos por computadora en 3D, motores de juegos y programas científicos hacen de BioBlender un instrumento completo para elaborar el movimiento de proteínas y mostrar sus características de superficie utilizando un código visual basado en texturas y efectos especiales de partículas. De esta manera, es posible mostrar las propiedades físicas y químicas de una molécula en movimiento.

Requisitos

- Instalar Python 3.5.3
- Instalar Blender 2.79b
- Instalar Pymol
- Instalar las librerías Numpy y Prody

Para instalar estas librerías:

- 1. Abrir la consola de windows (**Windows** + **R**)
- 2. Escriba cmd



3. <u>Luego en la consola de</u> Windows escriba:

pip install numpy

4. Una vez terminado, proceda a instalar Prody:

pip install Prody

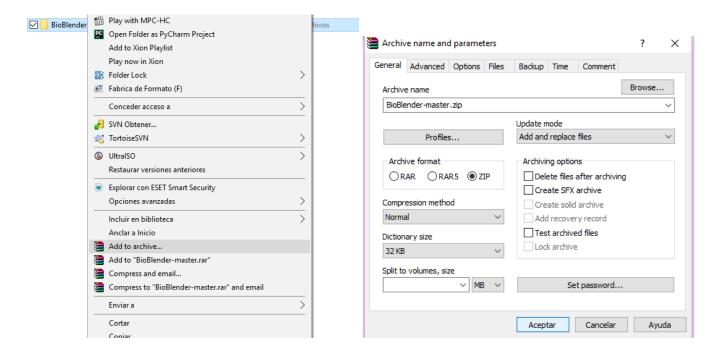
5. Por último. Necesario para el correcto funcionamiento de la librería Prody:

pip install scipy

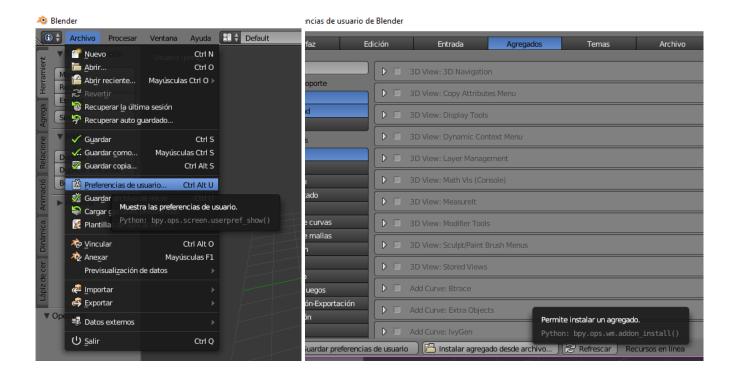
¿Cómo instalar BioBlender?

• Pasos:

1. Comprimir la carpeta BioBlender-master en un archivo .zip (En caso de que la carpeta no esté comprimida)



- 2. Una vez comprimida la carpeta abrir el Blender y agregar el archivo BioBlendermaster.zip a Blender. Para esto tiene que abrir:
 - Archivo > Preferencias de Usuario > Agregados > Instalar agregado desde archivo (Aquí busca el directorio, selecciona el archivo .zip y presiona Instalar agregado desde archivo)



3. Una vez agregado el BioBlender debe activarse automáticamente, pero en caso de que no se haya activado, se direge a :

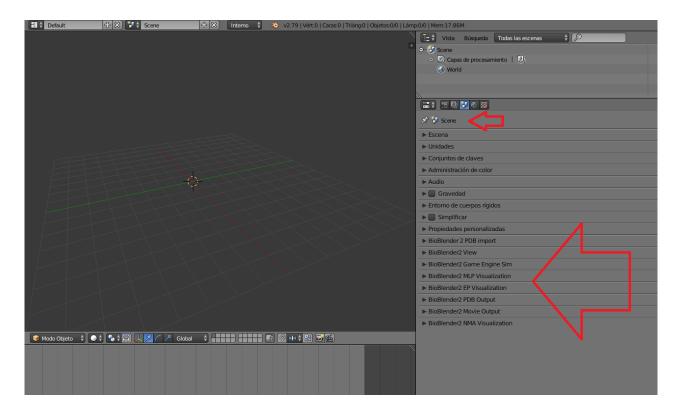
Archivo > Preferencias de Usuario > Agregados(Aquí activa el BioBlender 2.0) Luego guarde las preferencias de usuario.



Importar archivo PDB

Nota: Bueno, primero que nada, si usted desea eliminar todos los objetos que se cargan automáticamente al abrir Blender, presione la tecla \mathbf{a} , luego la tecla \mathbf{x} y **Enter**. Si desea que Blender siempre se abra sin objetos en la escena, presione $\mathbf{Ctrl} + \mathbf{u}$, para que se guarde la escena en la que se encuentra.

Las funciones de BioBlender se encuentran en el panel de propiedades denominado **Scene**.



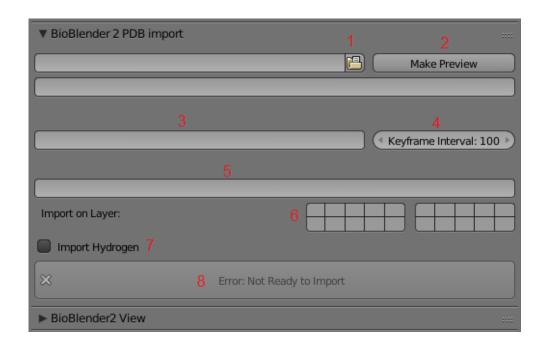
Protein Data Bank (PDB) es una base de datos de la estructura tridimensional de las proteínas y ácidos nucleicos. Estos datos, generalmente obtenidos mediante cristalografía de rayos X o resonancia magnética nuclear, son enviados por biólogos y bioquímicos de todo el mundo. Están bajo el dominio público y pueden ser usados libremente. El BioBlender tiene la posibilidad de leer archivos en formato pdb y obtener información de sus átomos para representarlos en el espacio.

HEADER	VIRAL PROTEIN 26-JAN-20 6LU7	SCALEI		υ.	OTO			0.00466		0.00000		
TITLE	THE CRYSTAL STRUCTURE OF COVID-19 MAIN PROTEASE IN COMPLEX WITH AN	SCALE2					0.012582			0.00000		
TITLE	2 INHIBITOR N3	SCALE3		0.				0.021223		0.00000		
COMPND	MOL ID: 1;	ATOM	1	. N	I	SER A	1	-32.073	9.085	33.695	1.00 38.90	N
COMPND	2 MOLECULE: SARS-COV-2 MAIN PROTEASE;	ATOM	2	C	CA	SER A	1	-32.156	8.073	34.741	1.00 37.44	C
COMPND	3 CHAIN: A;	ATOM	3	C		SER A	1	-30.857	8.000	35.536	1.00 34.96	C
COMPND	4 ENGINEERED: YES;	ATOM	4	C)	SER A	1	-30.047	8.926	35.507	1.00 33.29	0
COMPND	5 MOL ID: 2;	ATOM	5	(CB	SER A	1 1	-32.483	6.704	34.140	1.00 44.07	C
COMPND	6 MOLECULE: N-[(5-METHYLISOXAZOL-3-YL)CARBONYL]ALANYL-L-VALYL-N~1~-	ATOM	-		G	SER A	1 1	-31.312	6.067	33.660	1.00 47.56	0
COMPND	7 ((1R,2Z)-4-(BENZYLOXY)-4-OXO-1-{[(3R)-2-OXOFYRROLIDIN-3-	ATOM	1	N	1	GLY A	4 2	-30.665	6.892	36.240	1.00 36.02	N
COMPND	8 YL]METHYL}BUT-2-ENYL)-L-LEUCINAMIDE;	ATOM	8	C	CA	GLY A	4 2	-29.510	6.712	37.092	1.00 34.67	C
COMPND	9 CHAIN: C;	ATOM	9) C	2	GLY A	4 2	-29.828	6.998	38.551	1.00 38.34	C
COMPND	10 ENGINEERED: YES	ATOM	10) ()	GLY A	4 2	-30.810	7.663	38.892	1.00 45.40	0
SOURCE	MOL ID: 1;	ATOM	11	. N	ī	PHE A	7 3	-28.974	6.479	39.430	1.00 38.38	N
SOURCE	2 ORGANISM SCIENTIFIC: SEVERE ACUTE RESPIRATORY SYNDROME CORONAVIRUS	ATOM	12		CA	PHE A	3	-29.155	6.661	40.866	1.00 36.10	C
SOURCE	3 2;	ATOM	13		2	PHE A	3	-27.790	6.744	41.527	1.00 44.18	C
SOURCE	4 ORGANISM COMMON: SARS-COV-2;	ATOM	14	()	PHE A	3	-26.981	5.820	41.399	1.00 40.82	0
SOURCE	5 ORGANISM TAXID: 2697049;	ATOM	15		CB	PHE A	3	-29.978	5.522	41.468	1.00 38.52	C
SOURCE	6 EXPRESSION SYSTEM: ESCHERICHIA COLI BL21(DE3);	ATOM	16		CG	PHE A	3	-30.635	5.875	42.770	1.00 40.78	C
SOURCE	7 EXPRESSION SYSTEM TAXID: 469008;	ATOM	17	(D1	PHE A	3	-31.642	6.824	42.816	1.00 43.38	C
SOURCE	8 EXPRESSION SYSTEM VECTOR TYPE: PLASMID;	ATOM	18		CD2	PHE A	3	-30.247	5.261	43.949	1.00 40.00	C
SOURCE	9 EXPRESSION SYSTEM PLASMID: PGEX-6P-1;	ATOM	19		E1	PHE A	3	-32.251	7.155	44.012	1.00 42.94	C
SOURCE	10 MOL ID: 2;	ATOM	20) (E2	PHE A	3	-30.851	5.586	45.148	1.00 40.35	C
SOURCE	11 SYNTHETIC: YES;	ATOM	21		Z	PHE A	3	-31.854	6.534	45.179	1.00 43.94	C
SOURCE	12 ORGANISM SCIENTIFIC: SYNTHETIC CONSTRUCT;	ATOM	22	N	ī	ARG A	4 4	-27.541	7.844	42.233	1.00 39.42	N
SOURCE	13 ORGANISM TAXID: 32630	ATOM	23		CA	ARG A	4 4	-26.277	8.066	42.915	1.00 38.88	C
KEYWDS	PROTEASE, VIRAL PROTEIN	ATOM	24	C	2	ARG A	4 4	-26.545	8.642	44.296	1.00 40.55	C
EXPDTA	X-RAY DIFFRACTION	ATOM	25)	ARG A	4 4	-27.552	9.320	44.517	1.00 36.11	0
AUTHOR	X.LIU, B.ZHANG, Z.JIN, H.YANG, Z.RAO	ATOM	26		В	ARG A	4 4	-25.367	9.020	42.127	1.00 36.87	C
REVDAT	6 18-MAR-20 6LU7 1 JRNL	ATOM	27		CG	ARG A	4 4	-24.669	8.388	40.936	1.00 42.81	C
REVDAT	5 11-MAR-20 6LU7 1 COMPND SOURCE	ATOM	28		CD	ARG A	4 4	-23.342	7.771	41.340	1.00 42.72	C
REVDAT	4 26-FEB-20 6LU7 1 REMARK	ATOM	29	N	ΙE	ARG A	4 4	-22.460	7.579	40.193	1.00 47.79	N
REVDAT	3 19-FEB-20 6LU7 1 TITLE JRNL	ATOM	30) (CZ	ARG A	4 4	-21.235	7.068	40.270	1.00 53.27	C
REVDAT	2 12-FEB-20 6LU7 1 TITLE COMPND JRNL REMARK	ATOM	31	. N	IH1	ARG A	4 4	-20.744	6.693	41.443	1.00 47.42	N
REVDAT	2 2 1 SHEET LINK SITE ATOM	ATOM	32	N	IH2	ARG A	4 4	-20.502	6.930	39.173	1.00 49.36	N
REVDAT	1 05-FEB-20 6LU7 0	ATOM	33	N	ī	LYS A	₄ 5	-25.636	8.362	45.227	1.00 34.78	N
JRNL	AUTH Z.JIN, X.DU, Y.XU, Y.DENG, M.LIU, Y.ZHAO, B.ZHANG, X.LI, L.ZHANG,	ATOM	34	C	CA	LYS A	₄ 5	-25.667	9.020	46.528	1.00 36.92	C
JRNL	AUTH 2 C.PENG, Y.DUAN, J.YU, L.WANG, K.YANG, F.LIU, R.JIANG, X.YANG, T.YOU,	ATOM	35		2	LYS A	5	-25.399	10.504	46.317	1.00 32.31	C
JRNL	AUTH 3 X.LIU, X.YANG, F.BAI, H.LIU, X.LIU, L.GUDDAT, W.XU, G.XIAO, C.QIN,	ATOM	36		0	LYS A	5	-24.261	10.908	46.053	1.00 37.11	0
JRNL	AUTH 4 Z.SHI, H.JIANG, Z.RAO, H.YANG	ATOM	37		В	LYS A	5	-24.643	8.396	47.471	1.00 39.24	C
JRNL	TITL STRUCTURE OF MPRO FROM COVID-19 VIRUS AND DISCOVERY OF ITS	ATOM	38		CG	LYS A	. 5	-25.062	8.413	48.934	1.00 39.96	C
		ATOM	38	C	G	LYS A	5	-25.062	8.413	48.934	1.00 39.96	

Pasos para importar el PDB:

- 1. Seleccionar el archivo PDB que se desea importar, para esto BioBlender cuenta con 2 opciones:
 - Buscar en el ordenador local el archivo PDB y seleccionarlo.
 - Escribir solo el nombre del PDB que desea importar. Esto se basa en escribir con solo 4 letras el identificador del PDB, el cual se va a buscar en el repositorio http://www.pdb.org/ (Necesita Internet)
- 2. Leer el archivo PDB, dando click en Make Preview
- 3. Luego aparece una lista de números, estos números son los modelos que contiene el PDB. Esta lista usted tiene la posibilidad de modificarla e importar el modelo que usted desee.
- 4. Usted puede modificar el intervalo de los fotograma entre cada modelo donde dice **Keyframe Interval**

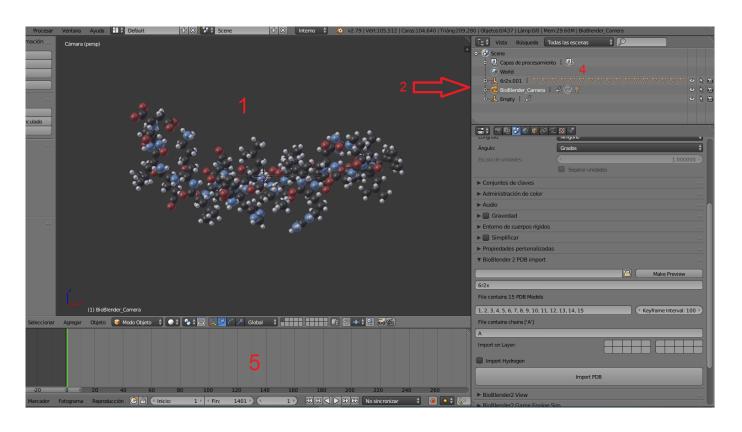
- 5. Luego aparece una lista de las cadenas que contiene el PDB.
- 6. Donde dice **Import on Layer**, usted selecciona en que capa(layer) de Blender usted desea importar la molécula.
- 7. También BioBlender le da la posibilidad de importar o no, los hidrógenos.
- 8. Por último presiona el click en **Import PDB**. El tiempo que dura en importar el PDB es proporcional al tamaño de la molécula. Si usted quiere representar una molécula de gran tamaño se demorará el proceso, ya que la importación se comporta de manera exponencial.



Una vez importado el archivo PDB podrá apreciar:

- 1. La molécula representada en la escena.
- 2. La lista de elementos que fueron creados durante su importación.
- 3. En la lista de elementos va a encontrar una Cámara, la cual se encuentra ubicada en la capa 20.
 - Si usted presiona la tecla **Num 0**. Podrá conocer lo que la cámara está observando.

- ullet Si presiona la tecla ${f N}$ podrá modificar su ubicación, podrá rotar la cámara y demás opciones que permite Blender.
- 4. También podremos encontrar un elemento que contiene el nombre del PDB importado, el cual tiene como hijos (dentro de él) todos los átomos importados.
- 5. Usted puede observar los fotogramas, los cuales representan la animación del cambio de un modelo a otro en el PDB. En este ejemplo el PDB contiene 15 modelos y los fotogramas llegan hasta 1401, esto se debe a que el primer modelo se encuentra en el fotograma 1, luego el segundo en 101 y así sucesivamente hasta llegar al final de los modelos. (En este ejemplo se escogió un intervalo de 100 fotogramas)

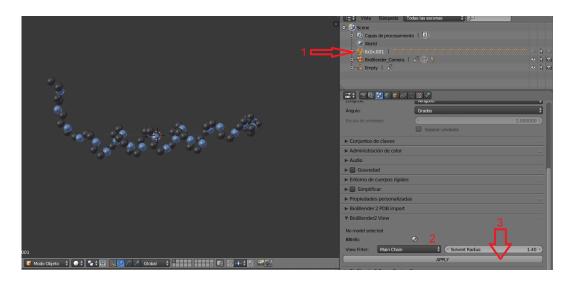


Cambiar las vistas de la molécula

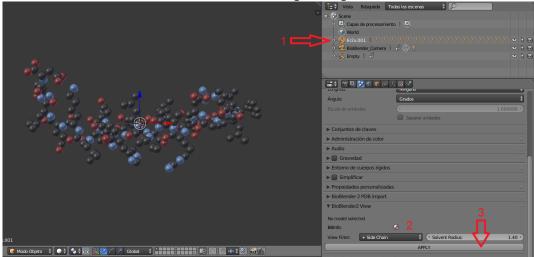
Una vez importado el PDB usted puede cambiar la vista de los átomos de la molécula, para ello BioBlender cuenta con varias opciones:

Nota: Primero tiene que seleccionar los átomos con los que desea trabajar

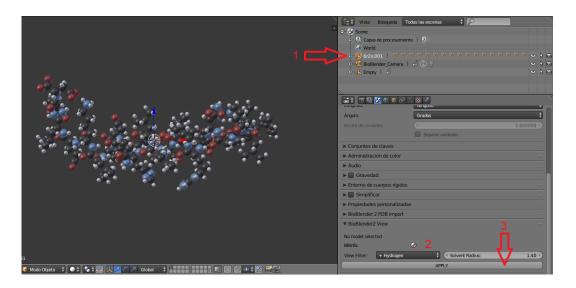
• Main Chain: Muestra la cadena principal



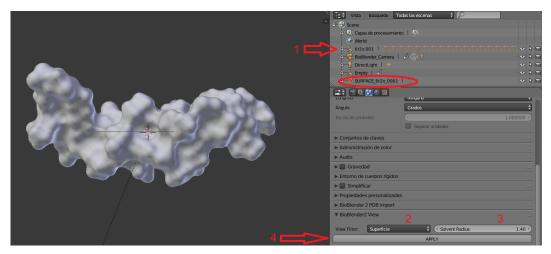
• + Side Chain: Muestra la cadena principal más los átomos unidos a ella



• + **Hydrogen**: Muestra todos los átomos importados más los hidrógenos. (Esto solo ocurre si usted importó los hidrógenos al inicio)



- Superficie: Calcula la superficie (A través del programa externo PyMol) y la muestra en la escena. Esta opción cuenta la propiedad que se encuentra a la derecha Solvent Radius, la cual se puede modificar para calcular la superficie de la molécula.
 - La propiedad **Solvent Radius** representa el radio del agua y presenta por defecto un valor de 1.40. Si este valor es más elevado puede calcular una buena superficie en menor tiempo.
 - Una vez calculada la superficie automáticamente se va a agregar un elemento en la escena. Este posee como nombre: SURFACE, seguido del nombre del PDB y luego el número de fotograma en que se encuentra.
 - Si ya usted calculó una superficie del PDB en el mismo número de fotogramas, si manda a calcular nuevamente la superficie no la calculará porque encontrará el elemento ya creado.

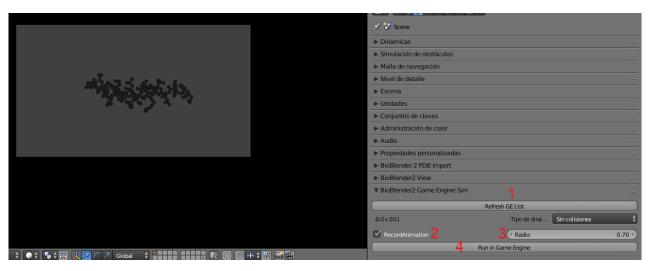


Movimiento de la proteína usando el motor físico de Blender

Al importar la molécula en la escena y presionar $\mathbf{Alt} + \mathbf{A}$ comienza a reproducirse la animación de la molécula. En este caso solo los átomos se están trasladando de una ubicación en una conformación a la otra, pero sin tener en cuenta sus propiedades físicas, por tanto para poder calcular la transición de la proteína entre dos conformaciones donde sí se tome en cuenta sus propiedades es necesaria la utilización del Blender Physics Engine.

Pasos para hace funcionar el Game Engine:

- 1. Click en **Refresh GE List**. Esto provocará que automáticamente se seleccionen las moléculas importadas y se muestre debajo de este botón el nombre que identifica la molécula y a su derecha el tipo de representación dinámica (Por defecto es **Sin Colisiones**)
- 2. **Record Animation**: Al ser seleccionado permite grabar la animación en Curvas-F.
- 3. Radio: Representa el valor del radio para las colisiones en el motor físico de Blender.
- 4. Click en **Run in Game Engine**. Esta operación una vez iniciada puede ser cancelada al presionar la tecla **Esc**

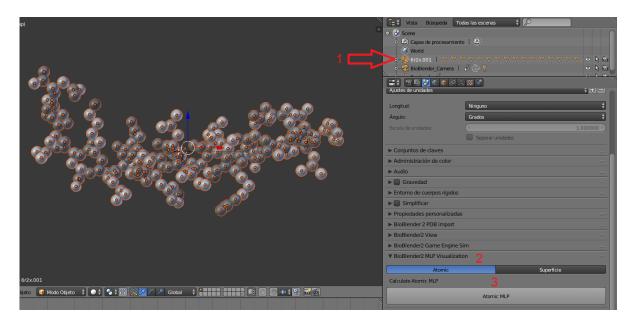


Calcular y visualizar el Potencial Lipofílico de la molécula (MLP)

BioBlender cuenta con la posibilidad de calcular el MLP, para esto es necesario la utilización del software externo Pymol, el cual realiza los cálculos y luego son importados al Blender.

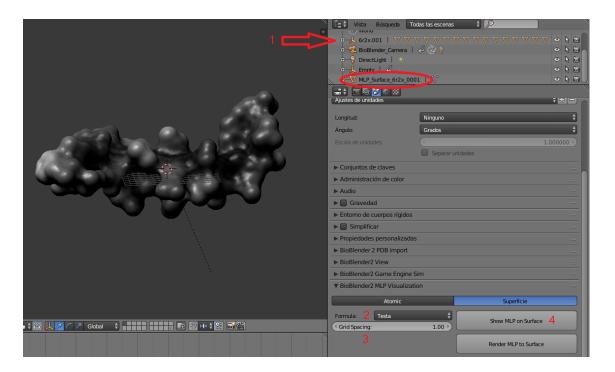
Bioblender cuenta de dos opciones:

• Calcular el MLP atómico: Para ello primero tiene que seleccionar los átomos en la lista de elementos.(En este caso no es necesaria la utilización del software externo Pymol)

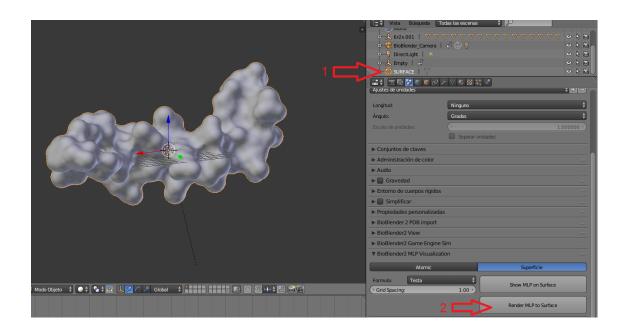


- Calcular el MLP en la superficie: Para representar la superficie se utiliza pyMLP, la cual obtiene los valores calculados por PyMol . Para su correcto funcionamiento es necesario seguir una lista de pasos.
 - 1. Seleccionar los átomos en la lista de elementos.
 - 2. Si anteriormente había creado una superficie a través de las opciones de las diferentes vistas de la molécula elimínela.
 - 3. Selecionar la fórmula por la que va a calcular el MLP
 - 4. Seleccionar el espaciado de la cuadrícula.

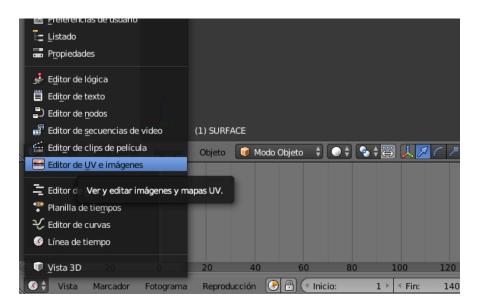
5. Click en Show MLP on Surface.



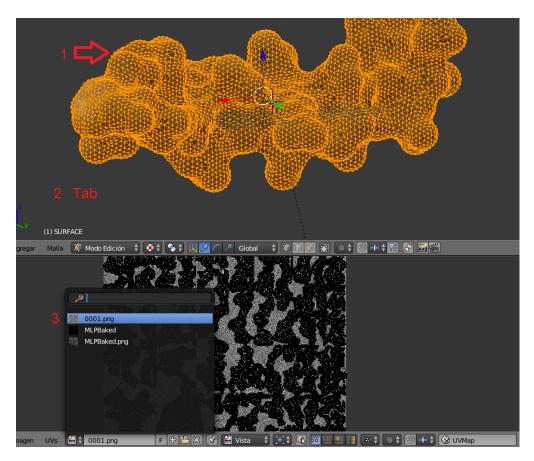
- 6. Una vez mostrada la superficie automáticamente se va a agregar un elemento en la escena. Este posee como nombre: MLP_Surface, seguido del nombre del PDB y luego el número del fotograma en que se encuentra.
- 7. Si ya usted calculó una superficie del PDB en mismo número de fotogramas, si manda a calcular nuevamente la superficie no la calculará porque encontrará el elemento ya creado.
- 8. Seleccionar la superficie creada.
- 9. Click en Render MLP to Surface



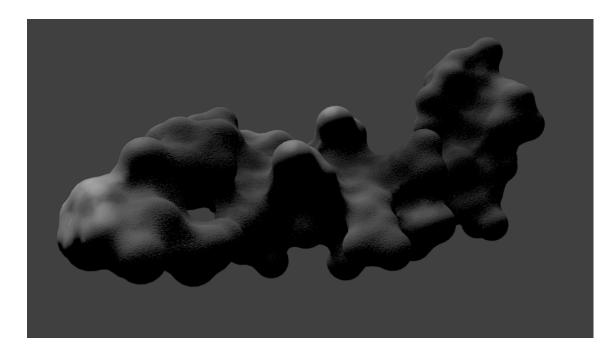
10. Una vez creada la textura diríjase a Editor de UV e imágenes



- 11. Seleccione la superfice y presione la tecla **Tab**. Automáticamente todos los vértices de la superficie se representaron en el Editor de UV.
- 12. Seleccione la imagen 001.png



13. Ya la molécula presenta la superficie con el MLP y su textura, lista para el renderizado.



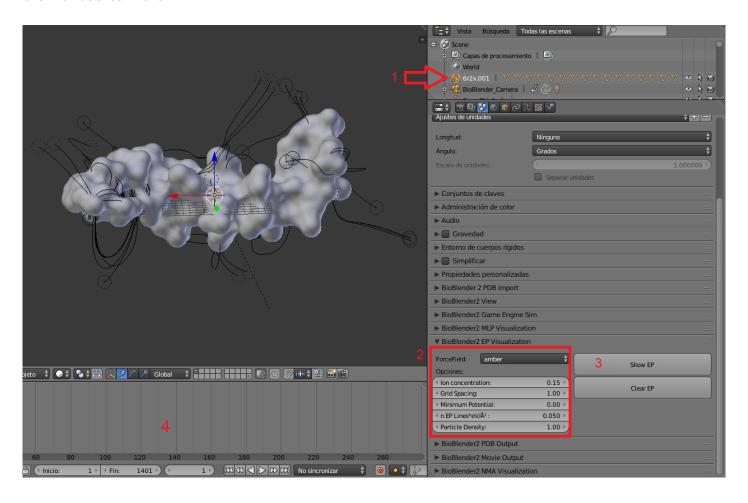
Calcular y visualizar el Potencial Electrostático (EP)

BioBlender cuenta con la posibilidad de calcular el potencial electrostático de la molécula y mostrar en la escena sus líneas potenciales. Para esto BioBlender necesita la utilización del software externo **apbs** para la realización de los cálculos del potencial y energía; y del software **SCIVIS** para calcular las líneas y exportarlas en un archivo .txt que posteriormente BioBlender leerá y hará posible su visualización en la escena.

Pasos para calcular el EP

- 1. Seleccionar los átomos con los que desea trabajar.
- 2. Esta función cuenta con diversas propiedades las cuales pueden ser modificadas acorde con lo que desea trabajar.
 - ForceField: Permite la selección del campos de fuerza con el que usted desea trabajar.
 - Ion concentration: Permite elegir la concentración de iones del solvente. Por defecto es de 0.15
 - Grid Spacing: Permite la elegir el espaciado de la cuadrícula. Más pequeño es mucho mejor, pero es más lento el calculo.
 - Minimum Potential: Permite elegir el potencial mínimo desde el cual inician las líneas del campo de fuerza en valor absoluto.
 - n EP Lines: Representa la concentración de las líneas.
 - Particle Density: Representa la densidad de las partículas.
- 3. Click en **Show EP** para calcular el potencial.
- 4. Una vez calculado el EP, las líneas mostradas en la escena presentan animación, la cual podrá darse cuenta ya que al calcular el EP automáticamente se reproduce la animación. (Estas solo llegan hasta los 270 fotogramas aproximadamente)

Nota: Si usted desea eliminar las líneas del potencial de la escena puede dar click en **Clear EP**, la cual eliminará todas las líneas no solo de la escena, sino de la lista de elementos también.

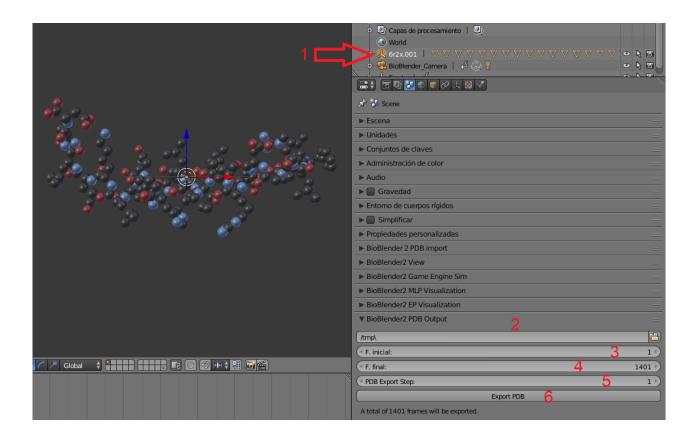


Exportar archivo PDB

BioBlender da la posibilidad al usuario de exportar un archivo PDB acorde a la ubicación de la molécula en la escena, es decir que al exportar el archivo PDB este va a ir tomando la posición de todos los átomos por cada fotograma de la animación, por tanto hay que tener presente que si tiene como fotograma final 1000, el archivo PDB que genera el BioBlender va a contener 1000 modelos, ya que por cada fotograma se crea un modelo.

Pasos para exportar un nuevo archivo PDB:

- 1. Seleccionar los átomos con los que se desea trabajar.
- 2. Buscar en el almacenamiento local la dirección donde desea guardar el archivo PDB.
- 3. Seleccionar el fotograma inicial desde el cual quiere comenzar a obtener la posición de los átomos para generar su archivo PDB.
- 4. Selecionar el fotograma final donde desea parar de obtener la posición de los átomos para generar su archivo PDB.
- 5. Seleccionar los saltos entre los fotogramas, por defecto es 1. Esto quiere decir que aumentará en 1 los fotogramas hasta llegar al final de los fotogramas seleccionados.
- 6. Click en **Export PDB**

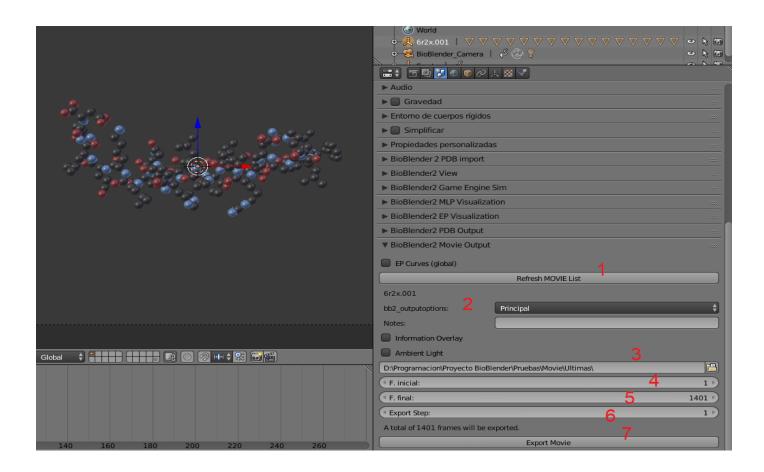


Exportar Película

BioBlender brinda la posibilidad de exportar todos los fotogramas que usted desee, así como elegir como desea observar la molécula en estas imágenes. Esto funciona a través del Render de Blender.

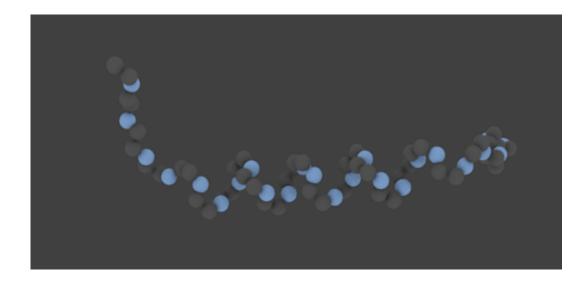
Pasos para exportar la película:

- 1. Click en Refresh MOVIE List
- 2. Configurar las diversas opciones que brinda:
 - EP Curves (global): Al ser seleccionado, al exportar en el fotograma la molécula, también introduce en la imagen el Potencial Electrostático (EP).
 - bb2_outputoptions: Permite la selección de la vista de la molécula que usted desea exportar en la imagen.
 - Notes: Permite agregar texto personalizado a la imagen.
 - Information Overlay: Brinda la información detallada de cada fotograma en la imagen.
 - Ambient Light: Agrega luz proveniente del ambiente.
- 3. Seleccionar en el almacenamiento local la dirección donde desea guardar la película.
- 4. Seleccionar el fotograma inicial desde el cual quiere comenzar a generar la película.
- 5. Seleccionar el fotograma final hasta donde quiere generar la película.
- 6. Seleccionar los saltos entre los fotogramas, por defecto es 1. Esto quiere decir que aumentará en 1 los fotogramas hasta llegar al final de los fotogramas seleccionados.
- 7. Click en **Export Movie**

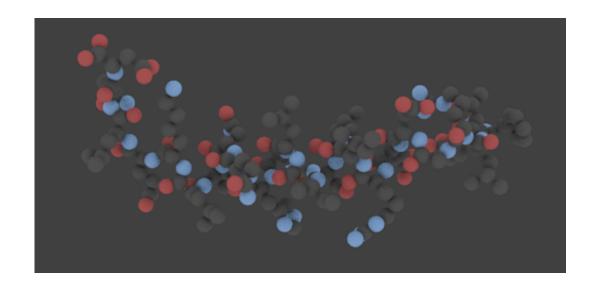


Ejemplo de diferentes vistas de la molécula:

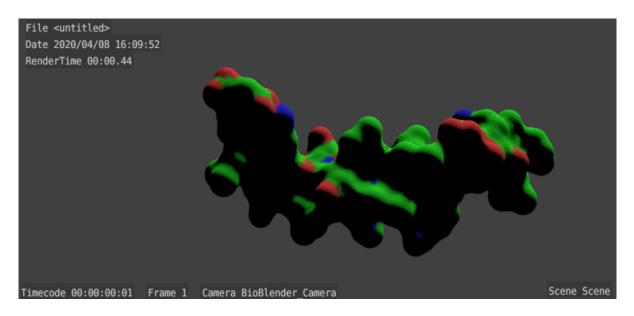
1. Selección de la vista **Principal** solamente.



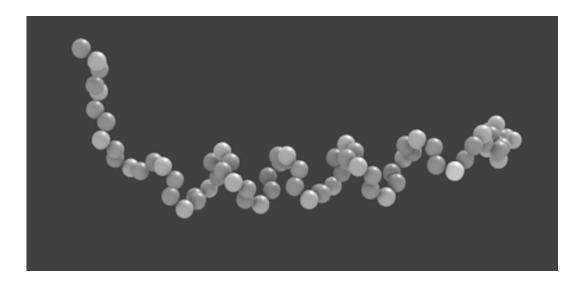
2. Selección de la vista + **Side** solamente.



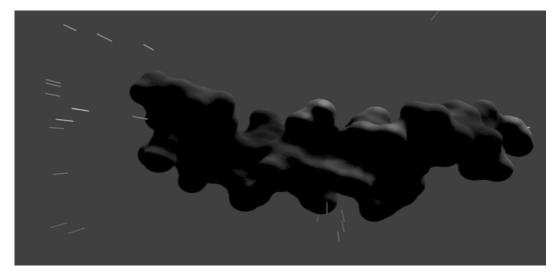
3. Selección de la vista Superficie y de Information Overlay

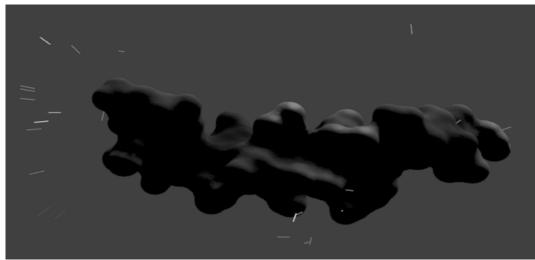


4. Selección de la vista MLP Main:



5. Selección de la vista MLP Surface y EP Curves (global)





Calcular el NMA

BioBlender cuenta con la posibilidad de calcular la trayectoria del **Normal Mode Analysis** para esto es necesaria la utilización de la librería **Prody**, la cuál permite realizar el análisis. El NMA solo se calcula para el primer modelo en el archivo PDB que se importó al inicio, por tanto si usted solo desea calcular el NMA al trabajar con BioBlender no va a ser necesaria la importación de todos los demás modelos del PDB. Para calcular el NMA no es necesaria la selección de los átomos con los que se desea trabajar.

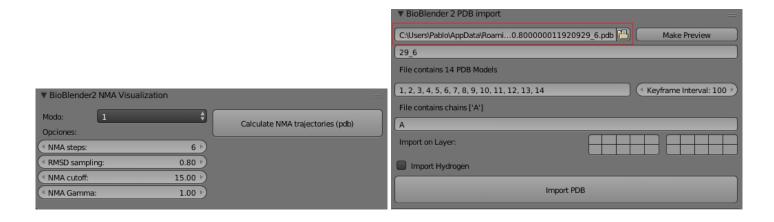
Opciones que brinda el cálculo del NMA:

- Modo: Permite la selección del modo normal de análisis para calcular.
- NMA Steps: Representa el número de conformaciones que van a ser calculados en cada dirección.
- RMSD sampling: RMSD entre el lado y la conformación más lejana.
- NMA cutoff: Distancia (A°) de truncamiento NMA para interacciones pairwise.
- NMA Gamma: Representa la constante de elasticidad NMA

Nota: Al calcular el NMA es exportado un archivo PDB en la carpeta

C:\Users\ Nombre de usuario\AppData\Roaming\Blender Foundation\Blender\2.79\scrip master\fetched

Este archivo contiene la trayectoria calculada y, la dirección donde se ubica es incorporada automáticamente en la función Import, listo para su importación.



Apuntes importante para su conocimiento

La gran mayoría de los procesos en BioBlender exportan consigo archivos de vital importancia para su funcionamiento, los cuales pueden servir de mucho para su uso personal a parte del BioBlender. Estos archivos son ubicados en la carpeta:

C:\Users\ Nombre de usuario\App
Data\Roaming\Blender Foundation\Blender\2.79\scrip master\tmp

Funciones que generan archivos en esta carpeta:

- BioBlender2 View: Al calcular la Superficie:
 - original.pdb
 - surface.pml
 - tmp.pdb
 - tmp.wrl
- BioBlender2 MLP Visualization: Al calcular el MLP en la Superficie:
 - original.pdb
 - surface.pml
 - tmp.pdb
 - tmp.wrl
 - tmp.dx
- BioBlender2 MLP Visualization: Al calcular la textura del MLP en la Superficie genera las imágenes necesarias para realizar la textura:
 - -0001.png
 - MLPBaked.png
 - noise.png

- composite.blend Este archivo es propio de Blender, el cual guarda consigo la composición de la textura.

• BioBlender2 EP Visualization: Al calcular el EP:

- scenewide.obj
- scenewide.in
- scenewide.pqr
- scenewide.wrl
- scenewide.pdb
- scenewide-input.p
- surface.pml
- io.mc
- tmp.txt
- pot.dx
- apbs.exe