

## Изучение трехмерной структуры белка

Скачать и установить Pymol

<https://pymol.org/2/>

Extra для домашнего изучения, не для урока:

Pymol for beginners: Labeling

<https://www.youtube.com/watch?v=nFY3EjBNPBQ>

Полезные ссылки

[https://pymolwiki.org/index.php/Main\\_Page](https://pymolwiki.org/index.php/Main_Page)

<https://www.rcsb.org/>

<http://www.wwpdb.org/documentation/file-format>

Что можно делать в pymol?

- Быстро получать красивые изображения
- Создавать видео
- Измерять расстояния и углы
- Редактировать PDB
- Выполнять структурное выравнивание
- Запускать python и pymol скрипты
- Подключать плагины

## Множества в rutil

Название	краткая форма	значение	примеры
all	*	все атомы	
none		пустое множество	
visible	v.	Все атомы, тем или иным способом показанные в данный момент в графическом окне	
hydro	h.	Все атомы водорода	
hetatm	het	Все атомы, помеченные в PDB файле, как HETATM	delete het
resi	i.	Остатки с данными номерами	resi 15-20
resn	r.	Остатки с данными именами	resn lys+arg
chain	c.	Цепи с данными идентификаторами	chain a+b
symbol	e.	Атомы данных химических элементов	symbol c+s
name	n.	Атомы с данными именами	name ca
solvent		Атомы растворителя	delete solvent

## Работа с выделениями в rutil

Оператор	Эффект
not s1	Выбирает атомы не включенные в s1
s1 and s2	Выбирает атомы включенные ,и в s1 ,и в s2
s1 or s2	Выбирает атомы включенные s1 или s2
s1 around X	Выбирает атомы с центрами не дальше X А от центров атомов s1
s1 expand X	Расширяет выделение s1 атомами с центрами не дальше X А от центров атомов s1
s1 within X of s2	Выбирает атомы из s1 с центрами не дальше X А от центров атомов s2
byres s1	Расширяет выделение до полных оснований
byobject s1	Расширяет выделение до полных объектов
neighbor s1	Выбирает атомы связанные с s1
create n1, s1	Создает из выделения отдельный объект

Замечание

РуMOL чувствителен к регистру!

Заглавные буквы в командах не используются

## **Практика -**

### **1 Загружаем белок**

Команда

*>fetch 1duz*

Или скачать через браузер и открыть командой *load filename*

Скачивается в директорию rutil'a (если его там ещё нет)

Молекула МНС.

### **2. Сколько цепей?**

MHC molecules consist of two protein chains, here A and B (and D and E) and a peptide, here C (and F), which in this case is 9 residues long.

Now the structure is shown in the Viewer window in the "lines" representation. You can now see the two biomolecules plus a lot of water molecules (red crosses). We only want to look at one molecule, so we define an object consisting of chains A-C, by entering at the command prompt

*>create molecule1, chain A or chain B or chain C*

### **3 Расположение и вид**

Спрятать 1duz нажав H(ide)->everything.

Если "molecule1" не в центре, нажать "zoom" в меню A(ction).

Можно использовать разные репрезентации S(how) "molecule1"

Чтобы не перекрывались, нужно скрыть остальные

Вернитесь к cartoon

Поиграйте с цветом C(olor)

Цвета

- bg 0xFF0000
- bg 0x00FF00
- bg 0x0000FF
- bg red
- bg green
- bg blue

Покрутите мышкой

## 4 Выделение углерода

Объект содержащий все углероды

*>create carbons, name ca+cb+cg+cd*

*>create carbons, (name ca+cb+cg+cd) and (chain A or chain B or chain C)*

## 5 Поверхности

*>create MHCmolecule, molecule1 and (chain A or chain B)*

*>show surface, molecule1*

*>create pep, molecule1 and chain C*

Оставим только MHCmolecule and pep

*>disable \**

*>enable MHCmolecule or pep*