

## Esquema treball final de màster

### codi

#### atributs

- atributs.py
- dades.py
- estructura.py
- pat.py

#### dades\_pdb

- 1bkv.pdb
- 1tup.pdb
- 1yd9.pdb
- 3pte.pdb
- 3wct.pdb
- 4bj3.pdb
- 4dkl.pdb
- 5l6X.pdb
- 5uru.pdb

#### models

- atom\_sphere.egg.pz
- Dirlight.egg.pz

#### plot2D

- proteina2D.py

#### plot3D

- proteina3D.py

aminoacids.py

colors.py

dades\_bat.py

fitxers.py

opcions.py

taula.idx (taula que guarda la taula .pdb un cop escollida pel mòdul fitxers.py)

visor2D.py

visor3D.py

README.md

## Mòdul fitxers

```
>>> python fitxers.py
```

Escollir un fitxer

-----

- 1.- 1bkv.pdb - COLLAGEN .- Residus: 94
- 2.- 1tup.pdb - TUMOR SUPPRESSOR P53 COMPLEXED WITH DNA .- Residus: 630
- 3.- 1yd9.pdb - 1.6A CRYSTAL STRUCTURE OF THE NON-HISTONE DOMAIN OF THE HISTONE VARIANT MACROH2A1.1. .- Residus: 754
- 4.- 3pte.pdb - THE REFINED CRYSTALLOGRAPHIC STRUCTURE OF A DD-PEPTIDASE PENICILLIN-TARGET ENZYME AT 1.6 A RESOLUTION .- Residus: 347
- 5.- 3wct.pdb - THE STRUCTURE OF A DEOXYGENATED 400 KDA HEMOGLOBIN PROVIDES A MORE ACCURATE DESCRIPTION OF THE COOPERATIVE MECHANISM OF GIANT HEMOGLOBINS: OXYGENATED FORM .- Residus: 1204
- 6.- 4bj3.pdb - INTEGRIN ALPHA2 I DOMAIN E318W-COLLAGEN COMPLEX .- Residus: 421
- 7.- 4dkl.pdb - CRYSTAL STRUCTURE OF THE MU-OPIOID RECEPTOR BOUND TO A MORPHINAN ANTAGONIST .- Residus: 460
- 8.- 5I6X.pdb - X-RAY STRUCTURE OF THE TS3 HUMAN SEROTONIN TRANSPORTER COMPLEXED WITH PAROXETINE AT THE CENTRAL SITE .- Residus: 983
- 9.- 5uru.pdb - INSULIN WITH PROLINE ANALOG DHP AT POSITION B28 IN THE R6 STATE .- Residus: 206

Opció :

## Mòdul aminoàcids

```
>>> python aminoacids.py
```

Aminoàcid	Sigles	Lletra	Tipologia
-----	-----	----	-----
Alanina	ALA	A	1
Arginina	ARG	R	4
Asparagina	ASN	N	2
Àcid Aspàrtic	ASP	D	3
Cisteïna	CYS	C	2
Fenilalanina	PHE	Q	2
Glutamina	GLN	E	3
Àcid Glutàmic	GLU	G	2
Glicina	GLY	H	4
Histidina	HIS	I	1
Isoleucina	ILE	L	2
Leucina	LEU	K	4
Lisina	LYS	M	1
Prolina	PRO	P	1
Metionina	MET	Q	1
Serina	SER	S	2
Treonina	THR	T	2
Tirosina	TYR	W	1
Triptòfan	TRP	Y	2
Valina	VAL	V	1

## Possibles opcions gràfiques previstes

```
>>> python opcions.py
```

### Opcions visor2D.py

OPCIO	2D i pseudo 3D	Matplotlib	Param1	Param2	Param 3
A01.	Representacio en pseudo-3d de les molecules		a	molecula	
A02.	Representacio en pseudo-3d dels residus (carbonis alfa) per molecules		a	residu	
A03.	Representacio en 2D i pseudo 3D		a	vistes	
A04.	Representacio en linies per molecules en pseudo 3D		c	molecula	
A05.	Representacio en linies dels residus en pseudo 3D segons tipus aminoacid		c	tipus	

### Opcions visor3D.py

OPCIO 3D Panda 3D

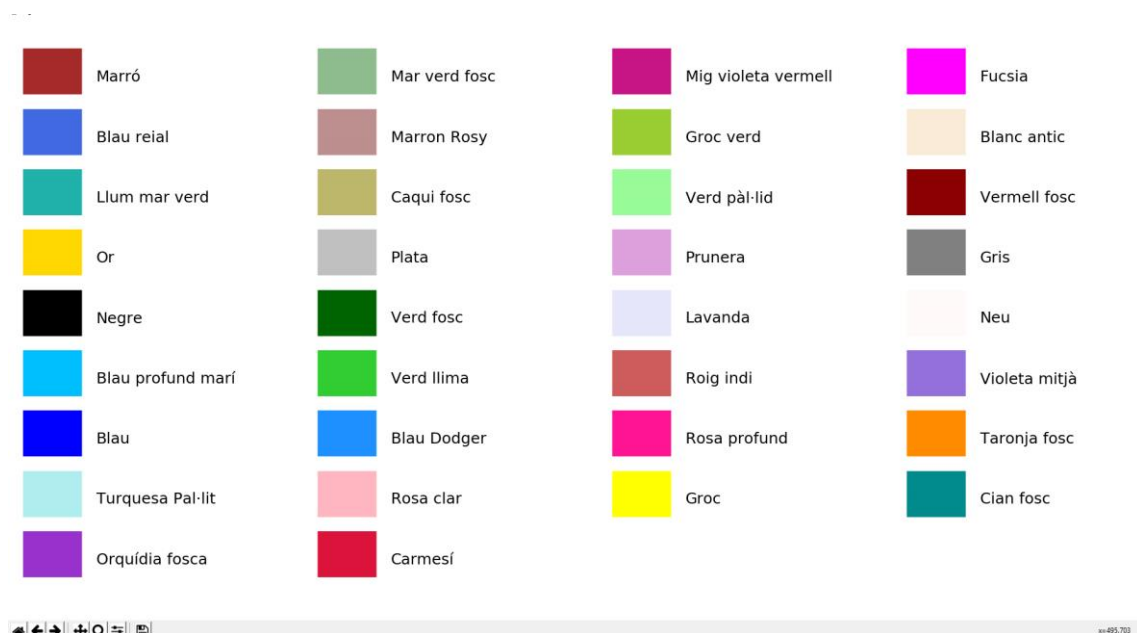
B01.	Representacio del complex proteic segons color aminoacids	a	residu	
B02.	Representacio dels elements externs a la proteina	a	extern	
B03.	Representacio per tipus aminoacids	a	tipus	
B04.	Representacio ubicacio d'un aminoacid concret	a	amino	sigles_amino
B05.	Representacio del complex per molecules	a	molecula	
B06.	Representacio dels carbonis alfa units per les linees que representen els aminoacids	c	alfa	
B07.	Representacio en spaghetti	c	tipus	

Exemple:

```
>>> python visor2D.py a residu
```

```
>>> python visor3D.py a amino TRP
```

## Paleta de colors



```
>>> python colors.py
```

## Mòdul

Taula: 5I6X.pdb .- Nom complex: X-RAY STRUCTURE OF THE TS3 HUMAN SEROTONIN TRANSPORTER COMPLEXED WITH PAROXETINE AT THE CENTRAL SITE

Paraules clau: None

Nombre de models: 1

Descripció de les molècules:

Nombre de molècules: ['A', 'B', 'C']

MOL\_ID: 1;

MOLECULE: SODIUM-DEPENDENT SEROTONIN TRANSPORTER;

CHAIN: A;

SYNONYM: SERT,5HT TRANSPORTER,5HTT,SOLUTE CARRIER FAMILY 6 MEMBER 4;

ENGINEERED: YES;

MUTATION: YES;

MOL\_ID: 2;

MOLECULE: 8B6 ANTIBODY, HEAVY CHAIN;

CHAIN: B;

ENGINEERED: YES;

MOL\_ID: 3;

MOLECULE: 8B6 ANTIBODY, LIGHT CHAIN;

CHAIN: C;

ENGINEERED: YES

Els elements heterogenis del complex proteic

Molècula NAG - N-ACETYL-D-GLUCOSAMINE de la molècula A format per 14 àtoms de formula  $2(C_8 H_{15} N O_6)$

Molècula CLR - CHOLESTEROL de la molècula A format per 28 àtoms de formula  $C_{27} H_{46} O$

Molècula LMT - DODECYL-BETA-D-MALTOSE de la molècula A format per 22 àtoms de formula  $C_{24} H_{46} O_{11}$

Molècula 8PR - PAROXETINE de la molècula A format per 24 àtoms de formula  $C_{19} H_{20} F N O_3$

Molècula CL - CHLORIDE ION de la molècula A format per 1 àtoms de formula  $CL^-$

Molècula NA - SODIUM ION de la molècula A format per 1 àtoms de formula  $Na^+$

ELEMENTS QUÍMICS

Els elements químics que formen part de la proteïna exclosos els hidrògens

( N : 1202 ) ( C : 4892 ) ( O : 1392 ) ( S : 40 )

Total elements exclosos l'hidrogen: 7526

Descripció dels elements heterogenis:

Els elements químics que no formen part de la proteïna exclosos l' HOH

( C : 74 ) ( N : 3 ) ( O : 24 ) ( F : 1 ) ( CL : 1 ) ( NA : 1 )

RESIDUS

Els residus que formen part de la proteïna que són aminoàcids

-----  
( GLY : 73 ) ( SER : 100 ) ( GLN : 32 ) ( GLU : 35 ) ( ARG : 28 ) ( THR : 85 ) ( TRP : 27 ) ( LYS : 44 ) ( VAL : 71 ) ( ASP : 31 )  
( PHE : 57 ) ( LEU : 79 ) ( ILE : 64 ) ( TYR : 53 ) ( ALA : 65 ) ( ASN : 33 ) ( PRO : 47 ) ( CYS : 23 ) ( MET : 17 ) ( HIS : 12 )  
Total tipus aminoàcids: 20 i total residus 976

Els residus que formen part de la proteïna que no són aminoàcids

Els residus heterogenis que no formen part de la proteïna

( NAG : 2 ) ( CLR : 1 ) ( LMT : 1 ) ( 8PR : 1 ) ( CL : 1 ) ( NA : 1 )

Process finished with exit code 0

>>> python dades\_bat.py

