

BIOLOGIA ESTRUTURAL – QBQ2505 e QBQ5758

MINI TUTORIAL – PYMOL

Download e Instalação

Faça o download do software Pymol no link <https://pymol.org/2/>

Siga as instruções do fabricante para instalação

Lançar o Software e Abrir um Arquivo pdb

Para lançar o programa clique no ícone de atalho usualmente criado no desktop. São abertas duas janelas, uma tela de comandos (caixa branca) e uma tela de visualização de estruturas (fundo preto, usualmente).

Para abrir um arquivo pdb use a tela de comandos (caixa branca) clique em File, Open e escolha o arquivo desejado. A estrutura deve ser carregada na tela de visualização (fundo preto).

Minimize a tela de comandos e maximize a tela de visualização. É possível alternar entre as duas janelas quando desejar, bem como mudar seu tamanho.

Manipulação do Modelo Estrutural

Na lateral direita há uma caixa de opções para visualização e manipulação da estrutura. Algumas operações possíveis: clicar sobre o nome do arquivo faz com que a estrutura fique invisível. A operação é reversível clicando novamente no mesmo ponto.

O botão H (Hide) permite ocultar toda a estrutura (everything) ou modos de visualização particular (lines, sticks, ribbon, cartoon, surface, etc...).

O botão S (Show) permite visualizar a estrutura de modos particulares (lines, sticks, ribbon, surface, etc...).

Teste estas operações clicando inicialmente em H e everything. Toda a estrutura deve ficar invisível. Em seguida clique em S e cartoon. A estrutura deve tornar-se visível como cartoon (fitas).

As cores da estrutura podem ser modificadas no botão C (Colors). Pode ser escolhida uma única cor para estrutura toda nas opções da parte de baixo da caixa aberta no botão C ou ainda colorir a estrutura por elementos (by elements), cadeia polipeptídica (by chain) e elementos de estrutura secundária (by ss). Finalmente há uma opção que colore a estrutura com diversas cores (by spectrum).

Movimentação da Estrutura

A estrutura pode ser movida com o mouse. Para isso posicione o mouse sobre um ponto da estrutura e mantendo o botão da esquerda (indicador) pressionado, mova a estrutura como um todo até a orientação desejada.

O tamanho da estrutura pode ser modificado. Para isso, posicione o mouse em um ponto fora da estrutura e mantendo o botão da direita pressionado, mova o mouse para cima (diminuição) ou para baixo (aumento).

Operações de posicionamento também podem ser executadas na caixa da direita no botão A (Actions). Zoom ajusta o tamanho. Center centraliza a estrutura na tela de visualização.

Visualização da Estrutura Primária

A sequência de resíduos de aminoácidos pode ser exibida na tela de visualização. Para isso, na caixa de comandos (tela branca) clique em Display e Sequence. A sequência será exibida no topo da tela de visualização em código de uma letra. Caso a estrutura possua mais do que uma cadeia polipeptídica, elas serão identificadas por A, B, C, etc... logo no início da numeração dos resíduos.

No botão Display também é possível modificar a cor do fundo da tela de visualização na opção Background. As cores disponíveis são White, Light Gray, Gray e Black.

Na sequência da proteína é possível selecionar resíduos específicos clicando sobre eles. Na caixa da direita surge uma nova linha chamada sele, na qual é possível modificar o modo de visualização apenas dos resíduos selecionados. A seleção pode ser desfeita clicando no botão A da linha sele e escolhendo a opção delete selection.

Isolamento de Domínios

Os domínios que constituem uma proteína podem ser visualizados e manipulados isoladamente. Para isso é possível criar um objeto que corresponde apenas à parte de uma cadeia polipeptídica. Esta operação também se aplica a resíduos isolados ou conjuntos descontínuos de resíduos. Para esta operação exiba a sequência no topo da tela de visualização (ver acima). Usando o mouse selecione (mantendo clicado e arrastando) o trecho da sequência que corresponde ao domínio a ser isolado. Será exibida na caixa da direita uma nova linha intitulada sele. Nesta linha, clique no botão A e então Create Object. Uma nova linha surgirá intitulada Obj1. A sequência de resíduos do Obj1 é exibida no topo da tela de visualização. Na linha sele, clique no botão A e a seguir Delete Selection. Apenas as linhas correspondentes à proteína completa e ao domínio isolado (Obj1) restarão na caixa à direita. Agora a estrutura completa pode ser temporariamente apagada clicando sobre seu nome na caixa da direita e o domínio isolado pode ter sua visualização modificada conforme desejado.

Alinhamento Estrutural

Várias estruturas podem ser visualizadas simultaneamente. Para isso abra dois arquivos pdb em sequência. Usualmente elas ocupam posições diferentes na tela, podendo inclusive não serem vistas simultaneamente. Cada uma das estruturas pode ser manipulada separadamente. Para isso, torne uma delas invisível clicando no seu nome na caixa da direita. Para produzir um alinhamento estrutural, mantenha ambas estruturas visíveis. Em seguida, clique no botão A da estrutura que deve ser movida sobre a outra (alinhada). Escolha a opção Align e to molecule. Deve aparecer o nome da estrutura sobre a qual ela será movida. Clique no nome desta segunda estrutura para completar a operação. Finalizada a operação, ambas devem ser visíveis e estarem sobrepostas (se possível). Na tela de comandos é exibido o RMSD para os carbonos alfa.

Salvar a Estrutura

A estrutura pode ser salva como exibida na tela de visualização usando na tela de comandos o botão File e Save Session. Um nome e local para alocação do arquivo devem ser escolhidos. O arquivo salvo será do tipo pdb. Ao reabrir este arquivo, a estrutura será exibida como no último passo da sessão anterior.