**Задание по 3D структурам (часть 1)**

*1. Выберите вирусный белок с известной пространственной структурой и сохраните PDB файл в своей директории.*

Запишите свою фамилию латинскими буквами. Вспомните название вируса, начинающееся с первой буквы вашей фамилии. Найдите в PDB структуру какого-нибудь белка этого вируса. Сохраните PDB файл в своей директории.

**Подсказки.** Найдите домашнюю страницу Protein Data Bank (PDB). Там есть поиск по ключевым словам (Advanced). Выбирайте структуры, решенные с помощью рентгеноструктурного анализа (X-ray diffraction) и включающие лиганд или ион . На странице выбранной вами структуры есть (справа сверху) ссылка — Download files. Скачайте в текстовом формате “PDB format”.

*2. Исследуйте заголовок PDB файла. Внесите в протокол:*

PDB ID структуры (то же, что код, четыре символа).

Название белка. Если знаете, то русское название и функцию.

Авторов и год расшифровки.

В какой статье описана структура (первый автор, название, журнал, год) ?

Разрешение структуры (в ангстремах).

Сколько цепочек в PDB файле, их имена.

Какие цепочки относятся к вирусным белкам?

Есть ли участки полипептидной цепи, структуру которых не удалось расшифровать (“missing residues”)?

Сколько лигандов или ионов и их названия (ищите слово “HETNAM”).

Выберите одну цепочку вирусного белка (если их несколько) для работы. Ее однобуквенное имя внесите в протокол. Выберите лиганд или ион. Его название из поля HET внесите в протокол.

*3. Создайте красивое изображение вашего белка при помощи Jmol. Раскрасьте структуру по цепочкам. Какая цепочка соответствует вашему белку? Оставьте на изображении только одну цепочку белка, раскрасьте её по вторичной структуре. Сохраните полученное изображение. Сохраните скрипт, создающий это изображение.*

**Подсказки.** Если в Jmol вы не видите окна консоли (маленького окошка, в котором можно выполнять команды), то вызовите её: правая кнопка мыши на фоне основного (черного) окна.

**Синтаксис Jmol можно посмотреть в презентации и в файле Jmol\_faq.doc.**

Команды пишутся в консоли. Некоторые выполняются из основного меню.  
Укажите путь к своей директории командой

cd H:\Virology\<своя директория> для того, чтобы Jmol работал с ней.

Откройте PDB файл: (File→Open) или в консоли напишите   
load <имя вашего файла> или используйте Get PDB в меню.

Раскрасьте командой color chain. Определите каким цветом показана выбранная цепочка.

Оставьте изображение только выбранной цепочки. Команда restrict :<имя цепочки> (например, "restrict :С").

Отцентруйте (center selected) и покажите ленточную модель (cartoons).

Уберите шаростержневую модель (wireframe off и cpk off).

Раскрасьте командой color structure.

Сохраните изображение командой write <имя>.jpg (формат jpeg), например

write YYYY\_1.jpg , где YYYY – PDB код

Сохраните скрипт командой write <имя>.spt, например,   
write YYYY\_1.spt , где YYYY – PDB код

Сотрите всё (restrict none)и выполните скрипт командой script <имя>.spt для проверки.

*4. Сохраните изображение лиганда и аминокислотных остатков, взаимодействующих с ним, и скрипт, создающий изображение.*

Сотрите всё изображённое.

Выберите лиганд командой select <имя лиганда>, покажите spacefill

Выберите атомы на расстоянии не более 5 ангстрем от лиганда. Используйте выражение   
select within(5.,<имя лиганда>), проверьте, что получается.

Сделайте так, чтобы сам лиганд не выделялся ( используйте and not … )

Определите нужное множество атомов командой define neib <множество>

Изобразите его шариками небольшого размера, например, cpk 0.5

Добавьте проволочное (wireframe) изображение целиком аминокислотных остатков, атомы из которых вошли в выделенное множество. Для выделения остатков целиком используйте команду select within(group, neib). Добавьте изображение остова всей цепочки тонкими линиями (backbone 0.1 или trace 0.1).

Скрипт (он же сценарий) — это текстовый файл с командами, который можно запустить на исполнение командой script <имя файла>.   
В начале скрипта напишите команду load =YYYY, где YYYY – PDB код. Знак “=” указывает, что файл надо загрузить из PDB. Затем полезно написать команду, стирающую всё: restrict none После неё — команды, выделяющие нужные множества и показывающие их.

*5. Создайте скрипт, изображающий водородные связи, поддерживающие элементы вторичной струтуры.*

Множество всех остовных атомов называется backbone (не путать с одноимённой командой, рисующей остов!) . Вариант отображения: cpk 0.5 и wireframe 0.2

Для того, чтобы показать водородные связи между остовными атомами, надо расcчитать водородные связи командой hbonds calculate и показать их командой hbonds 0.2

*Информация про запас.* Если потребуется изобразить все водородные связи, а не только остовные, надо исполнить сначала команду set hbondsRASMOL FALSE, а потом – всё так же.