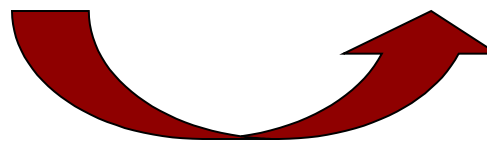
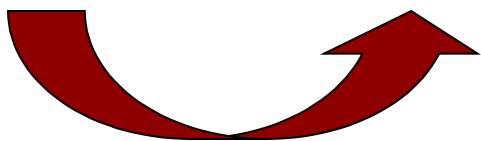
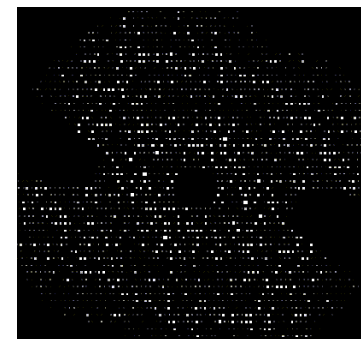
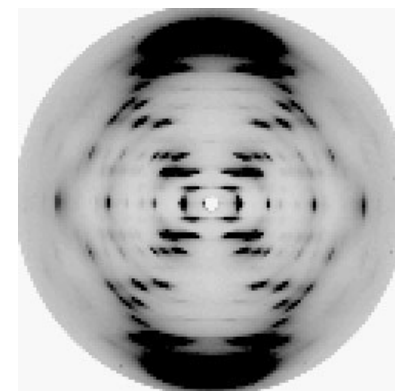
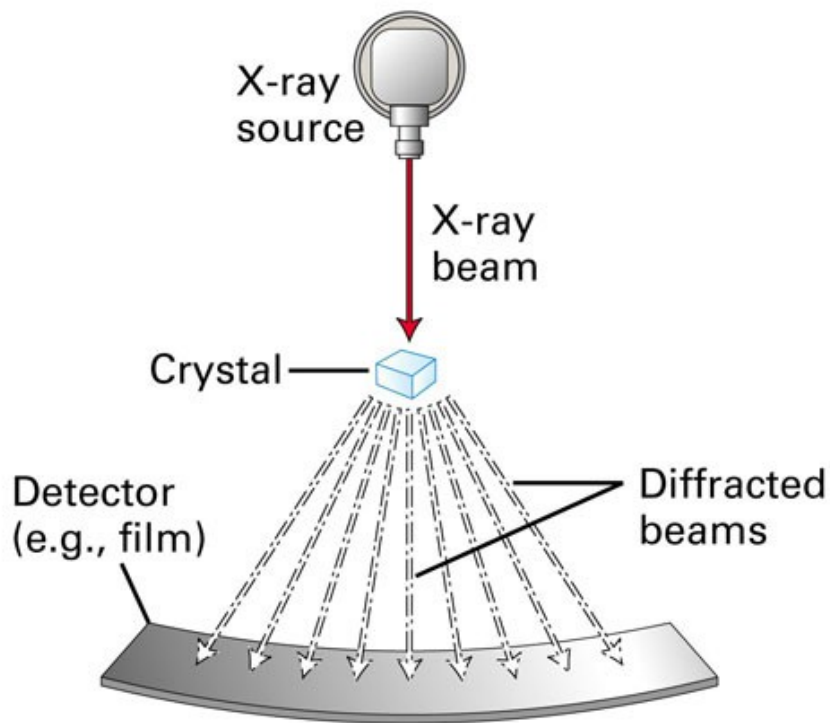
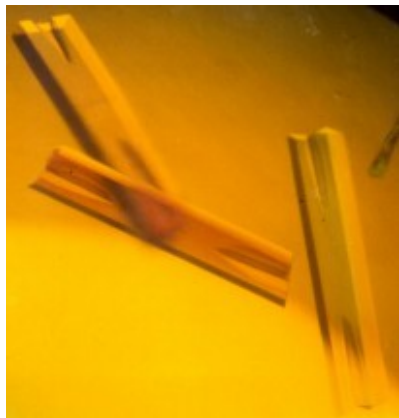
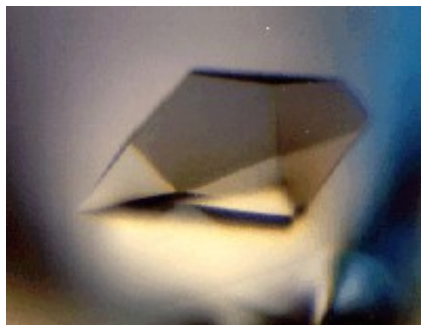


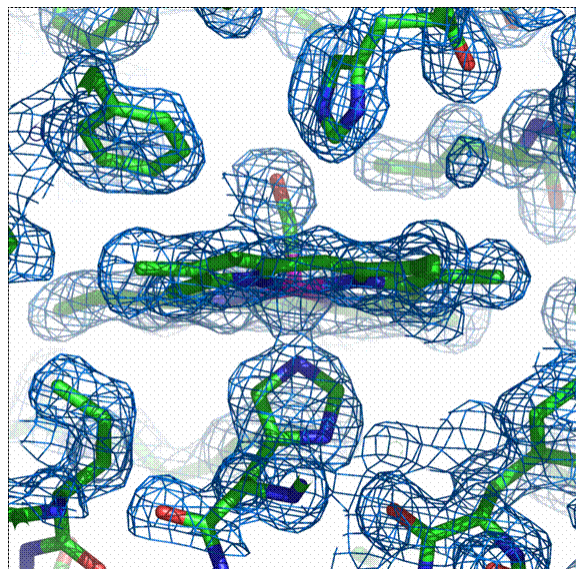
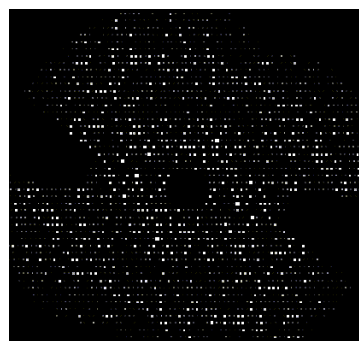
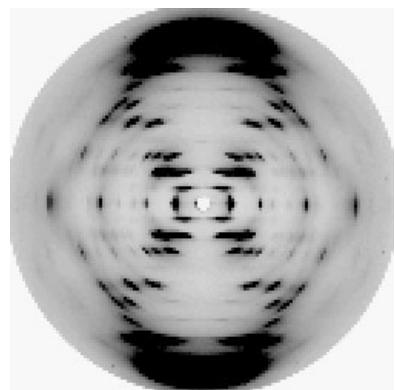
# Основные этапы расшифровки 3D-структуры

## I. Эксперимент

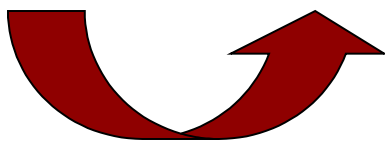


# Основные этапы расшифровки 3D-структуры

## II. Вычисления и моделирование



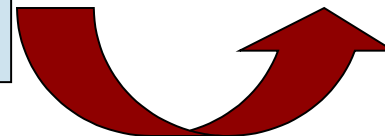
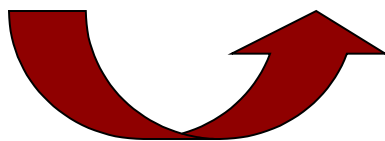
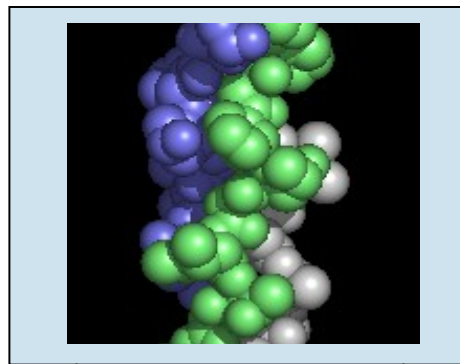
ATOM	188	N	LYS	A	27	-35.123	77.795	11.208
ATOM	189	CA	LYS	A	27	-35.949	78.814	11.849
ATOM	190	C	LYS	A	27	-36.907	78.113	12.808
ATOM	191	O	LYS	A	27	-37.292	76.978	12.588
ATOM	192	CB	LYS	A	27	-36.706	79.638	10.758
ATOM	193	CG	LYS	A	27	-37.635	80.765	11.277
ATOM	194	CD	LYS	A	27	-37.718	82.122	10.499
ATOM	195	CE	LYS	A	27	-38.234	82.152	9.034
ATOM	196	NZ	LYS	A	27	-38.418	83.510	8.535
ATOM	197	N	GLY	A	28	-37.102	78.672	13.993
ATOM	198	CA	GLY	A	28	-38.068	78.114	14.937
ATOM	199	C	GLY	A	28	-37.531	77.128	15.942
ATOM	200	O	GLY	A	28	-36.321	76.902	16.023
ATOM	201	N	LEU	A	29	-38.399	76.581	16.790
ATOM	202	CA	LEU	A	29	-38.000	75.559	17.744
ATOM	203	C	LEU	A	29	-37.661	74.380	16.879
ATOM	204	O	LEU	A	29	-38.320	74.195	15.864
ATOM	205	CB	LEU	A	29	-39.135	75.187	18.665
ATOM	206	CG	LEU	A	29	-38.918	75.630	20.108
ATOM	207	CD1	LEU	A	29	-40.273	75.849	20.760
ATOM	208	CD2	LEU	A	29	-38.051	74.608	20.847



# Основные этапы расшифровки 3D-структуры

## И наконец

ATOM	188	N	LYS	A	27	-35.123	77.795	11.208
ATOM	189	CA	LYS	A	27	-35.949	78.814	11.849
ATOM	190	C	LYS	A	27	-36.907	78.113	12.808
ATOM	191	O	LYS	A	27	-37.292	76.978	12.588
ATOM	192	CB	LYS	A	27	-36.706	79.638	10.758
ATOM	193	CG	LYS	A	27	-37.635	80.765	11.277
ATOM	194	CD	LYS	A	27	-37.718	82.122	10.499
ATOM	195	CE	LYS	A	27	-38.234	82.152	9.034
ATOM	196	NZ	LYS	A	27	-38.418	83.510	8.535
ATOM	197	N	GLY	A	28	-37.102	78.672	13.993
ATOM	198	CA	GLY	A	28	-38.068	78.114	14.937
ATOM	199	C	GLY	A	28	-37.531	77.128	15.942
ATOM	200	O	GLY	A	28	-36.321	76.902	16.023
ATOM	201	N	LEU	A	29	-38.399	76.581	16.790
ATOM	202	CA	LEU	A	29	-38.000	75.559	17.744
ATOM	203	C	LEU	A	29	-37.661	74.380	16.879
ATOM	204	O	LEU	A	29	-38.320	74.195	15.864
ATOM	205	CB	LEU	A	29	-39.135	75.187	18.665
ATOM	206	CG	LEU	A	29	-38.918	75.630	20.108
ATOM	207	CD1	LEU	A	29	-40.273	75.849	20.760
ATOM	208	CD2	LEU	A	29	-38.051	74.608	20.847



**Программы для визуализации и анализа 3D —  
RasMol, PyMol, SPDBViewer, WebMol, .....**

.....

# Брукгейвенский банк пространственных структур (PDB)

Home Search Structure

- Home
- Tutorial About This Site
- Getting Started
- Download Files
- Deposit and Validate
- Structural Genomics
- Dictionaries & File Formats
- Software Tools
- Educational Resources
- BioSync
- General Information
- Acknowledgements
- Frequently Asked Questions
- Known Problems
- Report Bugs/Comments

## Welcome to the RCSB PDB

The RCSB PDB provides a variety of tools and resources for studying the structures of biological macromolecules and their relationships to sequence, function, and disease.

The RCSB is a member of the wwPDB whose mission is to ensure that the PDB archive remains an international resource with uniform data.

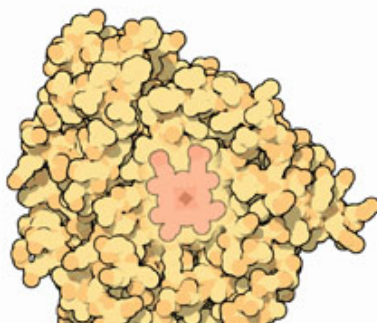
This site offers tools for browsing, searching, and reporting that utilize the data resulting from ongoing efforts to create a more consistent and comprehensive archive.

Information about compatible browsers can be found [here](#).

A [narrated tutorial](#) illustrates how to search, navigate, browse, generate reports and visualize structure on our new site. [This requires the Macromedia Flash player download.]

Comments? [info@rcsb.org](mailto:info@rcsb.org)

### Molecule of the Month: Cytochrome p450



If you have a headache and take a drug to block the pain, you'll notice that the effects of the drug wear off in a few hours. This happens because you have a powerful detoxification system that finds unusual chemicals, like drugs, and flushes them out of your body. This system fights all sorts of unpleasant chemicals that we eat, including drugs, poisonous compounds in plants, carcinogens formed during cooking, and environmental pollutants. The cytochrome p450 enzymes are our first line of defense in this chemical battle.

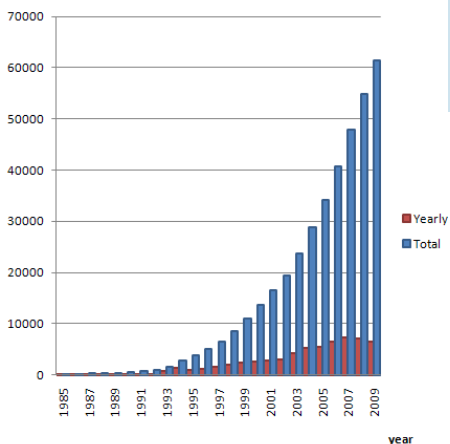
[More](#)

# Protein Data Bank

- Одна запись (документ) соответствует одному эксперименту по определению пространственной структуры макромолекулы или комплекса молекул
- Архивный банк – за содержание записи отвечают авторы соответствующей работы
- Совместно поддерживается университетом Rutgers (штат Нью-Джерси); EBI (Англия) и BIRD (Institute for Bioinformatics Research and Development, Япония)
- Адреса в Интернете: <http://www.rcsb.org/pdb>, <http://www.ebi.ac.uk/msd/> , <http://www.pdbj.org/> .
- Сайты снабжены поисковыми системами
- Все записи открыты для копирования через FTP



Yearly Growth of Total Structures



# Что хранится в PDB?



## An Information Portal to Biological Macromolecular Structures

As of Tuesday Nov 10, 2009 at 4 PM PST there are 61418 Structures | [PDB Statistics](#)

[WHAT'S NEW](#) | [HELP](#) | [PRINT](#)

PDB ID or keyword

- [Home](#)
- [News & Publications](#)
- [Policies](#)
- [FAQ](#)
- [Contact](#)
- [Feedback](#)
- [About Us](#)

### Deposition

- [Deposit Services](#)
- [Electron Microscopy](#)
- [PDB-REDO](#)
- [Validation Server](#)
- [Sync Beamline](#)
- [Related Tools](#)

## PDB Current Holdings Breakdown

	Proteins	Nucleic Acids	Protein/NA Complexes	Other	Total
X-ray	49409	1176	2289	17	52891
NMR	7082	874	150	6	8112
Exp. Method	Electron Microscopy	175	16	0	257
	Hybrid	18	1	1	21
	Other	116	4	4	137
<b>Total</b>	<b>56800</b>	<b>2071</b>	<b>2510</b>	<b>37</b>	<b>61418</b>

# Для сравнения

Объект	Банк	Всего последовательностей	Не совпадающих последовательностей
3D-структуры белков	PDB	<b>56 800</b>	<b>35 361</b>
аминокислотные последовательности	UniProt	<b>9 696 103</b>	<b>2 429 533</b>
нуклеотидные последовательности	EMBL	<b>62 093 719</b>	<b>4 105 954</b>



# Запись PDB

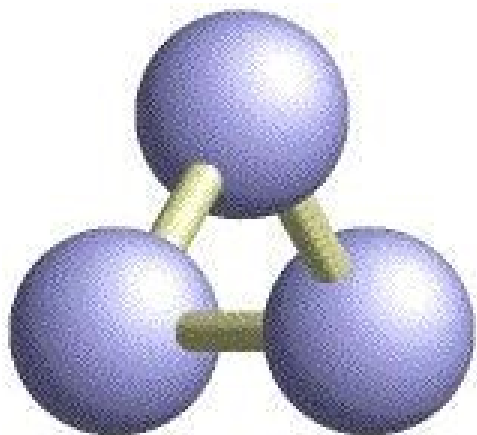
- Идентификатор записи (PDB ID, PDB-код) вида 1XYZ (цифра и три буквы/цифры) например: 1B8I, 9ANT, 10MH
- Каждая запись содержит координаты центров атомов (в некоторой произвольной системе координат) и сопровождающую информацию
- Каждая запись есть текстовый файл специального формата (PDB-формат)

# Формат PDB-файла

```
HEADER      COMPLEX (DNA-BINDING PROTEIN/DNA)          27-APR-97      1WET
TITLE      STRUCTURE OF THE PURR-GUANINE-PURF OPERATOR COMPLEX
COMPND     MOL_ID: 1;
COMPND     2 MOLECULE: PURINE REPRESSOR-GUANINE-PURF-OPERATOR;
COMPND     3 CHAIN: A;
COMPND     4 MOL_ID: 2;
COMPND     5 MOLECULE: DNA (AACGAAAACGTTTTTCGT);
COMPND     6 CHAIN: B;
COMPND     7 ENGINEERED: YES;
COMPND     8 BIOLOGICAL_UNIT: HOMODIMER
SOURCE     MOL_ID: 1;
SOURCE     2 ORGANISM_SCIENTIFIC: ESCHERICHIA COLI;
SOURCE     3 MOL_ID: 2;
```

# Формат PDB-файла

ATOM	1	N	THR	A	3	16.514	-2.279	12.062	1.00	43.86	N
ATOM	2	CA	THR	A	3	17.180	-2.102	13.371	1.00	45.43	C
ATOM	3	C	THR	A	3	16.995	-0.675	13.903	1.00	48.26	C
ATOM	4	O	THR	A	3	16.888	-0.476	15.109	1.00	56.27	O
ATOM	5	CB	THR	A	3	18.658	-2.818	13.510	1.00	61.61	C
ATOM	6	OG1	THR	A	3	18.953	-3.305	14.848	1.00	40.35	O
ATOM	7	CG2	THR	A	3	19.796	-1.970	12.934	1.00	66.69	C
ATOM	8	N	ILE	A	4	16.880	0.318	13.028	1.00	35.25	N
ATOM	9	CA	ILE	A	4	16.614	1.653	13.545	1.00	31.81	C
ATOM	10	C	ILE	A	4	15.180	1.537	14.149	1.00	36.74	C
ATOM	11	O	ILE	A	4	14.824	2.204	15.125	1.00	23.77	O
ATOM	12	CB	ILE	A	4	16.557	2.686	12.441	1.00	32.25	C
ATOM	13	CG1	ILE	A	4	16.613	4.069	13.040	1.00	32.26	C
ATOM	14	CG2	ILE	A	4	15.242	2.611	11.664	1.00	22.31	C
ATOM	15	CD1	ILE	A	4	16.468	5.127	11.966	1.00	56.11	C
ATOM	16	N	LYS	A	5	14.363	0.675	13.544	1.00	41.48	N
ATOM	17	CA	LYS	A	5	13.005	0.429	14.018	1.00	40.63	C
ATOM	18	C	LYS	A	5	13.126	-0.115	15.426	1.00	43.60	C
ATOM	19	O	LYS	A	5	12.360	0.211	16.357	1.00	45.74	O
ATOM	20	CB	LYS	A	5	12.399	-0.681	13.198	1.00	41.30	C
ATOM	21	CG	LYS	A	5	11.236	-0.268	12.361	1.00	61.61	C
ATOM	22	CD	LYS	A	5	11.427	-0.757	10.930	1.00	66.72	C
ATOM	23	CE	LYS	A	5	10.112	-0.760	10.137	1.00	90.19	C
ATOM	24	NZ	LYS	A	5	10.059	-1.825	9.080	1.00	69.42	N
ATOM	25	N	ASP	A	6	14.102	-0.973	15.597	1.00	38.66	N



# RasMol

## *ab initio*

<http://www.rasmol.org/>



```
RasMol Command Line
RasMol Molecular Renderer
Roger Sayle, August 1995
Copyright (C) Roger Sayle 1992-1999
Version 2.7.3 February 2005
Copyright (C) Herbert J. Bernstein 1996-2005
*** See "help notice" for further notices ***
Unable to find RasMol help file!
RasMol>
Atom: CD2 1952 Group: LEU 249 Chain: A
RasMol> select CA
10 atoms selected!
RasMol> spacefill
RasMol> color green
RasMol> █
```

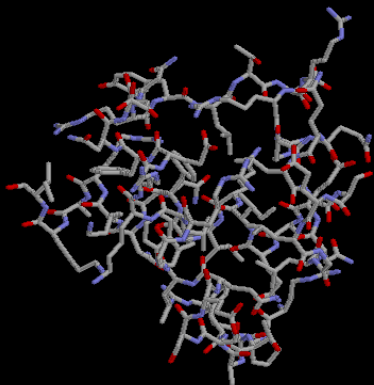
# Программы работы с 3D-структурами

- **RasMol** (визуализация, подготовка изображений и простейший анализ)
- **PyMol** (визуализация, качественная подготовка изображений, больше средств анализа)
- **SwissPDBviewer** или DeepView (анализ и сравнение структур; визуализация уступает RasMol и PyMOL)

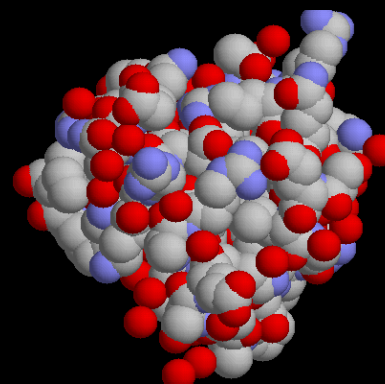
# RasmoL

- Удовлетворительная визуализация; достаточный для большинства потребностей спектр средств анализа
- Последняя версия 2.7.4.2
- Несложен для освоения, обладает хорошей внутренней логикой
- Доступен на сайте <http://www.openrasmol.org>

# Визуализация молекулы белка



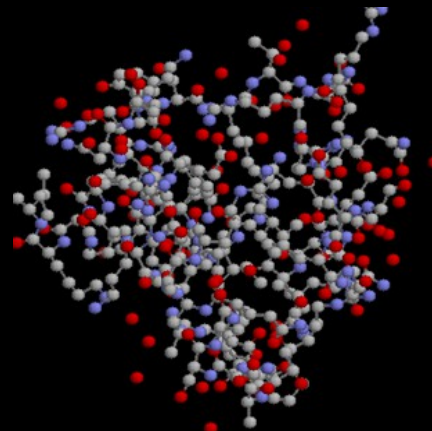
Проволочная модель



Шариковая модель



Остовная модель



Шарнирная модель

(наложение проволочной и шариковой)

- **Проволочная модель** – ковалентные связи между атомами изображаются линиями, соединяющими их центры.
- **Шариковая модель** – атомы изображаются шариками, по умолчанию радиусы шариков пропорциональны радиусам Ван-дер-Ваальса атомов.
- **Остовная модель** – изображаются условные линии, соединяющие  $\alpha$ -атомы.



# RasMol: основные принципы

- Работа идёт в двух окнах: графическом и командном.
- В каждый момент работы имеется некоторое **выделенное** множество атомов. Все действия производятся с этим множеством.
- Каждому действию соответствует команда, набираемая в командном окне

# Команды для изменения изображения

`backbone <число>` – остовная модель

`wireframe <число>` – проволочная модель

`spacefill <число>` – шариковая модель

`ribbons <число>` – ленточная модель

`color <цвет>` – *цвет задается словом (red) или RGB-кодом [255,0,0]*

`background <цвет>` – цвет фона

***Любая команда относится***

***только ко множеству выделенных атомов!***

## Синтаксис обращения к атомам (atom expressions)

- ser70:A.CA** – **С $\alpha$  атом серина 70 в цепи A**
- ser70:A.C? – все атомы углерода в Ser70 цепи A
- \*.CA – С $\alpha$  атомы всех остатков
- ser:A – все атомы всех серинов в цепи A
- Ser – все атомы всех серинов
- \*A – все атомы цепи A

### **Предопределенные множества атомов:**

*all, protein, dna, rna, water, oxygen, nitrogen, carbon, hydrogen, sulfur, iron, phosphorus .....*

# Основные команды обращения ко множествам атомов

**select** <множество> – выделить множество  
(и ничего не делать с графическим окном)  
(примеры: `select ser70:A,`  
`select 70,27,156,`  
`select 10-27)`

**restrict** <множество> – ограничиться множеством  
(=выделить и стереть всё остальное из графич. окна)  
(примеры: `restrict ser70:A,`  
`restrict 10-27,`  
`restrict none)`

**define** <имя> <выражение> – создание нового множества, к которому можно обратиться по имени  
(пример: `define importantAAs 124:A, 178:A, 235:A`  
`select importantAA`  
`color red )`

# Операции над множествами

## 1. Логические операторы AND, OR, NOT

Операция OR может быть записана как ",".

Упражнение

Документ PDB содержит описание структуры, состоящей из белка, фрагмента ДНК и молекул воды. Что получится, если задать следующие команды ?

- *select protein or dna*
- *select protein and dna*
- *select not water*

## 2. Оператор WITHIN(...)

- *select within(3.5, his)*
- *select within(3.5, his) and water*

# Создание подписей и ластики

***Команда относится***

***только ко всему множеству выделенных атомов!***

**label {<string>},**

*по умолчанию <string>=%n%r:%c.%a,*

*где %n - имя остатка, %r - номер остатка, %c -идентификатор цепи,*

*%a - имя атома.*

***label off***

***backbone off***

***.....***

# Ввод данных и сохранение результатов

**zap** – *начать все заново*

**load <filename>** – *загрузить файл с координатами атомов*

**save <filename>** – *сохранить список выделенных атомов в формате PDB*

пример: `save h:\rasmol\my.pdb`

**write <filename>** – *сохранить картинку в формате GIF*

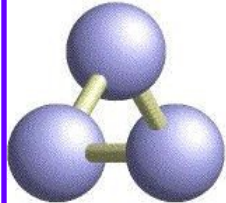
пример: `write h:\rasmol\picture.gif`

**write script <filename>** – *создать скрипт-файл,*

*к сожалению, такие скрипты неудобны в работе, впрочем, можете попробовать...*

**script <filename>** – *ввод команд RasMol из текстового файла*





Лучшие подсказки см.  
в самой программе!!

