

Cvičení 1: Grafické rozhraní programu TRITON

1. Spustíte program TRITON z okna terminálu:
/home/martinp/bin/triton
2. Z PDB databáze stáhněte PDB soubor struktury s PDB ID: *2DHC*. Z menu programu TRITON vyberte Menu: Structure/ Load a načtěte tuto strukturu
3. **Manipulace s 3D modelem struktury pomocí myši** (pro nápovědu klikněte na otazník v pravém horním rohu okna s 3D modelem struktury).
Vyzkoušejte rotaci (pravé tlačítko myši), pohyb v rovině obrazovky (prostřední tlačítko); zoom (skrolovací kolečko nebo pravé+prostřední tlačítko), centrování a autozoom (dvojitě kliknutí pravým tl.), rotaci kolem osy z (<Ctrl>+pravé tlačítko); vyzkoušejte také ovládání pomocí klávesnice (kurzorové klávesy a PgUp, PgDown klávesy ve spojení s <Ctrl> a/nebo <Shift>)
4. **Měření vzdáleností**
Klikejte na jednotlivé atomy – atomy se označují oranžovým kolečkem a nazývají se *current atom*; sledujte vzdálenosti a úhly na informační liště (najeďte také myší na jednotlivá políčka lišty pro zobrazení podrobností)
5. **Označování atomů v 3D modelu**
Označujte jednotlivé atomy (<Ctrl>+levé tlačítko myši), residua (Menu: Select/Residues); označte více atomů najednou pomocí obdélníku nebo lasa (<Ctrl>+levé tlačítko a táhneme); zrušte označení atomů (dvojkliknutí v prostoru kde nejsou žádné atomy); vyzkoušejte funkci Undo / Redo
6. **Nastavení centra rotace**
Nastavte centrum rotace na skupinu atomů (stiskněte levé tlačítko a táhněte přes skupinu atomů); nastavte centrum rotace na implicitní hodnotu (dvojklik pravým tlačítkem)
7. **Schovávání a zobrazení atomů**
Vyzkoušejte zobrazit pouze atomy peptidické páteře: Menu: Select / Select backbone, Menu: Display / Hide Unselected Atoms; zobrazte opět všechny atomy (Menu: Display / Show All Atoms)
8. **Seznam residuí**
Zobrazte seznam residuí (Menu: View / Residues); klikejte na jednotlivá residua v seznamu a 3D modelu; vyzkoušejte označování residuí, sekvencí a celé struktury; vyzkoušejte schovávání residuí (sekvencí, struktury) a opětné zobrazení. Pro nápovědu klikněte na otazník v pravém horním rohu okna se seznamem residuí.
9. **Zdrojový soubor**
Zobrazte text zdrojového souboru (Menu: View / Residues); klikejte na jednotlivé atomy v seznamu a 3D modelu; vyzkoušejte označování atomů; vyzkoušejte schovávání a opětné zobrazení atomů
10. **Kontextové menu**
Vyzkoušejte kontextové menu v seznamu residuí, textu zdrojového souboru a 3D modelu (zobrazí se pravým tlačítkem myši na atomu, residuu, sekvenci; v 3D modelu je potřeba učinit atom aktuálním tj. kliknout levým tlačítkem a pak pravé tlačítko podržet 1 s); vyzkoušejte změnu barev, modelů, změnu centra rotace (v záhlaví menu vždy nastavte, zda-li se to má aplikovat na atom / residuum / sekvenci / strukturu / vše)
11. **Popisky atomů a residuí**
Zobrazte popisky atomů (Menu: Display / Atom Labels) a residuí (Menu: Display / Residue Labels); vyzkoušejte, že pokud přivýběru položky v menu držíte <Ctrl> zobrazí se popisky pouze u označených atomů; zkuste zobrazit popisky pomocí kontextových menu (např. pro jednotlivá residua); schovejte všechny popisky (Menu: Display / Hide Labels)
12. **Zkoumání specifického místa** (např. aktivního nebo vazebného centra)
Zvolte Menu: Select / Select Neighbourhood; specifikujte jeden ze dvou uhlíkových atomů substrátu DCE jako centrum zkoumaného prostoru (specifikujte pomocí <Shift>+levé tlačítko); Nastavte vzdálenost na 8 Å a stiskněte Apply. Potom schovejte neoznačené atomy (Menu: Display/ Hide Unselected Atoms).

13. Editace atomů

Zvolte Menu: Structure / Editation tools; označte atomy kyslíku patřící vodám a smažte je; označte atomy residua DCE a přidejte na ně vodíky tlačítkem *Add H on Selected Atoms*

14. Přidávání vodíků na protein

Zvolte Menu: Structure / Add Hydrogens Tools; přidejte vodíky na strukturu proteinu

15. Uložení struktury

Uložte strukturu do souboru v PDB formátu (Menu: Structure / Write)

16. Načtení více struktur

Otevřete znovu soubor se strukturou *2DHC* a potom otevřete strukturu *Dh1A_CBT.pdb*, který najdete ve složce */home/martinp/C2150/structs/* (Menu: Structure / Load, na pravé straně dialogového okna specifikujte Add To: Structure)

17. Manipulace s více strukturami

K manipulaci se strukturami použijte nástroj Menu: Structure / Manipulate nebo položku na začátku informační lišty; vyzkoušejte schovávání / zobrazování, vynětí z manipulace myši, označování, změnu barvy a modelu

18. Zobrazení souhrnných informací o struktuře

Zvolte Menu: Structure / Information a nechte si zobrazit informace pro jednotlivé struktury

19. Pro vyzkoušení práce s proteiny obsahujícími více řetězců použijte strukturu lektinu *IGZT* (její PDB soubor stáhněte z PDB databáze)

20. **Další funkce** (v některých případech s omezenou funkčností)

Pojmenované skupiny atomů, tzv subsets (Menu: Structure / Subsets) – používejte poze na jedné samostatně otevřené struktuře

Seznam residuí podle vzdáleností – v seznamu residuí klikněte pravým tlačítkem na oblast mimo popisky residuí a vyberte v menu Distance View, specifikujte atomy centra pomocí <Shift> a levého tlačítka v 3D modelu; ze seznamu vyberte pořadovanou akci a přemíst'ujte posuvníky do různých pozic

Superpozice struktur (Menu: Structure / Superimpose) – funguje pouze na strukturách se stejným pořadím atomů nebo stejnými jmény atomů/residuí (použijte struktury *fucl.pdb* a *fucl2.pdb* ve složce */home/martinp/C2150/structs/*)

Předdefinovaná zobrazení struktury (Menu: Structure / Preconfigurations)

Animace (Menu: Structure / Animations)

Nastavení parciálních nábojů na atomech (Menu: Structure / Protein Charges nebo Gasteiger Charges)

Práce s alternativními pozicemi postranních řetězců v PDB souborech (Menu: Structure / Alternate Locations)

Úloha 1:

Načtete strukturu *2DHC* a zobrazte všechna residua v okolí substrátu DCE do vzdálenosti 8 Angstrom, ostatní residua budou skryta. Na atomy aplikujte model *Sticks* a na substrát DCE model *Ball and Stricks*. Substrát obarvete fialovou barvou.

Úloha 2:

Postupujte podle bodů 13, 14 a 15 a výslednou struktury uložte do samostatného souboru.

Úloha 3:

Načtete struktury *2DHC* a *Dh1A_CBT.pdb* (bod 16.). Struktury posuňte tak aby se první nacházela v levé části obrazovky a druká v pravé. První stuktura bude mít modrou barvu, druhá fialovou.

Úloha 4:

Načtete strukturu *IGZT*. Každý řetězec označte jinou barvou. Molekuly ligandů fukózy (FUC) budou zobrazeny modelem Ball and Stick, ostatní atomy modelem Wire. Molekuly vody nebudou zobrazeny.

U úloh 1, 3 a 4 sejměte vždy obrázek z obrazovky (pomocí klávesy Print Screen) a uložte do souboru. Soubory uložte do odevzdávací předměti. Z úlohy 2 odevzdejte vytvořený PDB soubor (opět uložte do odevzdávací).