

## Nápověda a instalace

1. **Nápověda**  
[http://pymolwiki.org/index.php/Main\\_Page](http://pymolwiki.org/index.php/Main_Page)
2. **Instalace**  
<http://pymolwiki.org/index.php/Category:Installation>
  - a. **Windows** – Neoficiální kompilace <http://www.lfd.uci.edu/~gohlke/pythonlibs/>
  - b. **Linux** – Najdete ve správci software na mnoha distribucích.
  - c. **Mac** – HomeBrew  
[http://www.pymolwiki.org/index.php/MAC\\_Install#Installing\\_PyMOL\\_with\\_Homebrew](http://www.pymolwiki.org/index.php/MAC_Install#Installing_PyMOL_with_Homebrew)

## Základy práce s programem PyMOL

1. **Spuštění programu**  

```
$ module add pymol  
$ pymol
```
2. **Načtení molekuly**  
(Do svého adresáře si zkopírujte soubor s molekulou myoglobinu z */home/martinp/C2150/structs/mbco.pdb*.)  
Načtěte molekulu *Externí rozhraní / Hlavní menu: File / Open ...* Vyberte molekulu a načtěte.
3. **Manipulace s molekulou**  
Celá manipulace s molekulou se provádí pomocí myši a kombinací se stisknutým tlačítkem (Ctrl, Shift). Levým tlačítkem s molekulou můžeme rotovat, při stisku kolečka můžeme s molekulou posouvat a pravým tlačítkem molekulu přibližujeme/oddalujeme. Zobrazení můžeme resetovat do původní podoby pomocí tlačítka *Externí rozhraní / Reset*.
4. **Výběr**  
Kliknutím na *Selecting* pod panelem s objekty můžeme měnit chování výběru prvků. Prvky vybíráme jednoduše pomocí kliknutí levým tlačítkem nebo pomocí držení Shift + levé tlačítko myši a přetažením oblasti. Odebrat prvek můžeme kliknutím nebo pomocí držení Shift + kolečka myši a přetažením oblasti. Dále můžeme výběr provádět přes sekvenci, kterou si zobrazíme pomocí tlačítka **S** v pravém dolním rohu.
5. **Výpis informace o atomu/residuu/proteinu**  
Dvojklikem pomocí kolečka na atom. Informace pak naleznete vypsány v textovém výstupu na externím rozhraní.
6. **Změna reprezentace**  
Různé reprezentace můžeme zapínat a vypínat přes tlačítka **S** (show) a **H** (hide) vedle každého objektu. PyMOL umožňuje vizualizovat molekuly a proteiny v těchto reprezentacích: *lines, sticks, cartoon, ribbon, dots, spheres, surface* a *mesh*. Přes položku *as* nastavíme výhradně danou reprezentaci, ostatní se skryjí. Reprezentace je možné kombinovat. Celý protein zobrazte jako *cartoon* a vyberte pomocí zobrazení sekvence HEM a CO zobrazte jej jako *sticks*. Vodu nezobrazujte.
7. **Popisky**  
Pobobně jako různé prezentace, můžeme přes tlačítko **L** (label) přidávat každému objektu popisky. Přidejte popisku HEM a CO.

8. **Obarvení**  
Pobobně jako různé prezentace a popisky, můžeme přes tlačítko **C** (color) měnit každému objektu barvu.
9. **Další akce**  
Přes tlačítko **A** (action) u každého objektu můžeme provádět další akce. Nepoužívanější jsou *zoom*, *remove atoms*, *copy to/extract object*, *hydrogens*. Odstaňte všechny atomy samostatné atomy kyslíku (vody). Z HEM a CO vytvořte nový objekt.
10. **Měření**  
Měření provádíme přes *Externí rozhraní / Hlavní menu: Wizard / Measurement*. Změřte vzdálenost mezi železem z HEM a uhlíkem z CO. Změřte úhel mezi železem z HEM, uhlíkem a kyslíkem z CO.
11. **Renderování molekuly**  
Renderování provádíme přes tlačítko *Externí rozhraní / Ray*. Následně je možné obrázek uložit do souboru přes *Externí rozhraní / Hlavní menu: File / Save Image As ... / PNG*. Uložte obrázek celého proteinu do souboru.
12. **Scény**  
Slouží pro ukládání konkrétního zobrazení (*Externí rozhraní / Hlavní menu: Scene / Store*). Takto uložená scénou je možnou opětovně vyvolat (*Externí rozhraní / Hlavní menu: Scene / Recall*; případně klávesová zkratka F1–F12). Uložte si několik rozdílných zobrazení a pak je vyvolejte.
13. **Další nastavení**  
Barvu pozadí můžeme měnit přes *Externí rozhraní / Hlavní menu: Display / Background*. Další nastavení je možné měnit menu *Externí rozhraní / Hlavní menu: Setting*. Změňte pozadí na bílou barvu. Zobrazte povrch proteinu a nastavte mu průhlednost.
14. **Pluginy**  
V rámci PyMOLu je možné psát a používat vlastní pluginy. Seznam naleznete na wiki.  
**PDB Loader Service**  
Tento plugin umožňuje stáhnout pomocí čtyřmístného kódu protein z PDB databáze. Najdete ho zde: *Externí rozhraní / Hlavní menu: Plugin / PDB Loader Service*.

### Úkol 1:

Stáhněte protein **2PWS** z PDB databáze a připravte několik scén. Z každé scény uložte obrázek (nezapomeňte jej vyrenderovat pomocí *ray*), celou *session* uložte (*Externí rozhraní / Hlavní menu: File / Save session*) a vše nahrajte do odevzdávacího.

První scéna bude obsahovat strukturu zobrazenou pomocí *sticks*, druhá scéna pomocí *cartoon*. Ve třetí scéně zobrazte protein pomocí *mesh* a ligand (ibuprofen) pomocí *sticks*. Čtvrtá scéna bude obsahovat přiřazený ligand. V pátém skryjte *mesh* (nechejte pouze *cartoon*) a zobrazte 69. aminokyselinu (X69) jako *sticks* a přidejte C-alfa atomu popisek *residue name* a zobrazte celý protein.

Volitelná šestá scéna může obsahovat: přidané vodíky, naznačenou vodíkovou vazbu mezi X69 (vodík z dusíku) a ibuprofenem (jeden z kyslíků) a detail X69 a ibuprofenu.