

## Základy práce s programem PyMOL

1. Web programu PyMOL: <http://pymol.org>
2. Soubory je možné nalézt v adresáři: `/home/kulhanek/Documents/C2150/structures`

### 3. Spuštění programu

Spouštíme z terminálu. Nahrajeme příslušný modul: `module add pymol` a pak spustíme: `pymol`.

### 4. Načtení molekuly

Do svého adresáře si zkopírujte soubor s molekulou myoglobinu `mbco.pdb`. Načtěte molekulu `Menu: File / Open`. V grafickém okně se zobrazí načtená molekula.

### 5. Manipulace s molekulou – rotace, translace, změna velikosti

Ovládání myši je následující:

- rotace – levé tlačítko slouží k rotaci kolem os ležících v rovině obrazovky, nachází-li se myš na okraji okna probíhá rotace kolem předo-zadní osy.
- translace – prostřední tlačítko myši slouží k translaci v rovině obrazovky.
- změna velikosti – pravé tlačítko myši mění velikost molekuly při vertikálním pohybu.

Obnovení výchozí polohy docílíme tlačítkem `Reset` v okně s menu.

### 6. Výběr atomů

Levým tlačítkem myši klikáme na jednotlivé atomy. Při výchozím nastavení se označují celá residua. To můžeme změnit kliknutím na červený nápis `Residues` v pravé dolní části okna.

Opakovaným klikáním na tento nápis volíme režim označování: `Residues`, `Chains`, `Segments`, `Objects`, `Molecules`, `C-alphas`, `Atoms`.

Pokud klikneme na označený atom dojde k zrušení jeho označení. Zrušení označení všech atomů dosáhneme kliknutím na oblast mimo molekulu.

Označení skupiny atomů: `<Shift>` + táhneme levým tlačítkem myši přes skupinu atomů.

Pomocí `<Shift>` a prostředního tlačítka myši zrušíme označení atomů ve vybrané oblasti.

### 7. Výběr atomů pomocí sekvence

Klikneme na písmeno `S` v pravém dolním rohu okna. V horní části okna se zobrazí sekvence.

Tažením myši přes úsek sekvence označíme příslušná residua. Držíme-li `<Shift>` označí se residua mezi předchozím a posledním kliknutím.

### 8. Grafické reprezentace molekuly

Grafické reprezentace můžeme měnit v seznamu molekul v pravé horní části okna. Tlačítka `S` (show) slouží k zobrazení a `H` (hide) ke skrytí jednotlivých reprezentací. Je možné vizualizovat molekuly v reprezentacích: `lines`, `sticks`, `cartoon`, `ribbon`, `dots`, `spheres`, `surface` a `mesh`. Reprezentace je možné kombinovat. Chceme-li použít pouze jednu reprezentaci nastavíme ji přes položku `as` (ostatní se skryjí). Chceme-li nastavit reprezentaci jen pro označené atomy, provedeme nastavení u položky (sele).

Celý protein zobrazte jako `cartoon` a vyberte pomocí zobrazení sekvence HEM a CO a zobrazte je jako `Sticks`. Vodu nezobrazujte.

### 9. Popisky

Pobobně jako různé prezentace, můžeme přes tlačítko `L` (label) přidávat každému objektu popisky. Přidejte popisek residu HEM.

### 10. Obarvení

Pobobně jako prezentace a popisky, můžeme přes tlačítko `C` (color) měnit každému objektu barvu.

### 11. Další akce

Přes tlačítko `A` (action) u každého objektu můžeme provádět další akce. Nepoužívanější jsou `zoom`, `remove atoms`, `copy to/extract object`, `hydrogens`. Kliknutím na názvy objektů je můžete skrýt nebo zobrazit. Odstaňte všechny samostatné atomy kyslíku (vody). Z HEM a CO vytvořte nový objekt.

## 12. Měření

Měření provádíme přes *Menu: Wizard / Measurement*. Změřte vzdálenost mezi železem z HEM a uhlíkem z CO. V pravé dolní části okna klikněte na *Distances* a vyberte *Angles* a Změřte úhel mezi železem z HEM, uhlíkem a kyslíkem z CO.

## 13. Renderování molekuly

Renderování molekuly provádíme pomocí tlačítka *Ray* v okně s menu. Následně je možné obrázek uložit do souboru pomocí *Menu: File / Save Image As / PNG*. Uložte obrázek celého proteinu do souboru.

## 14. Scény

Scény slouží pro ukládání konkrétního zobrazení molekuly. Provede se pomocí *Menu: Scene / Store*. Takto uloženou scénou je možné opětovně vyvolat pomocí *Menu: Scene / Recall* (případně klávesová zkratka F1–F12). Uložte si několik rozdílných zobrazení a pak je vyvolejte.

## 15. Ukládání sezení (session)

Stav načtených molekul a jejich zobrazení lze uložit do souboru pomocí *Menu: Save Session*. Soubor má koncovku *.pse*.

## 16. Další nastavení

Barvu pozadí můžeme měnit pomocí *Menu: Display / Background*. Další nastavení je možné pomocí *Menu: Setting*. Změňte pozadí na bílou barvu. Zobrazte povrch proteinu a nastavte mu průhlednost.