

Swiss-PDB Viewer 4.0.4软件的使用 (How to use the Swiss-PDB Viewer 4.0.4)

组别：G03

组长：胡超

组员：郭小勇、乔洪宾、仝燕许

报告人：胡超

2012.6.10

General introduction

- Swiss-Pdb Viewer, 又叫DeepView, 是一个用于观察和分析蛋白质及核酸结构的交互式分子图像软件。
- 是一种界面友好, 基于计算机应用, 功能强大的三维图形软件工具。
- 科研人员可以通过网络免费下载使用。

Contents

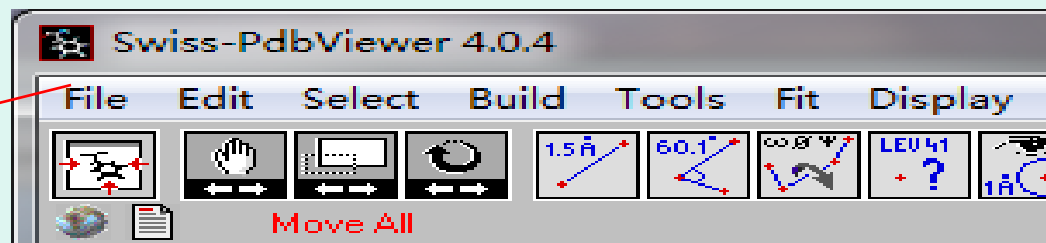
- 1、 Getting Started
- 2、 Windows and Help
- 3、 Manipulating the Model
- 4、 Selecting and Displaying
- 5、 Coloring Swiss-PdbViewer
- 6、 Measuring and Labeling
- 7、 Mutating and Changing Side-Chain Conformations

1、Getting Started

载入一个蛋白质分子的方法:

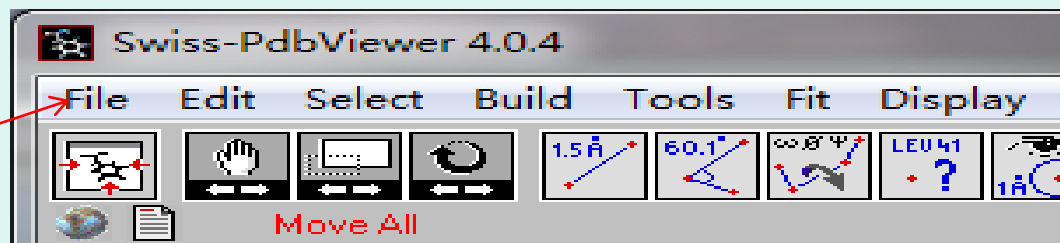
a.file→open PDB file;

open PDB file



b.pdb 文件直接拖进file中;

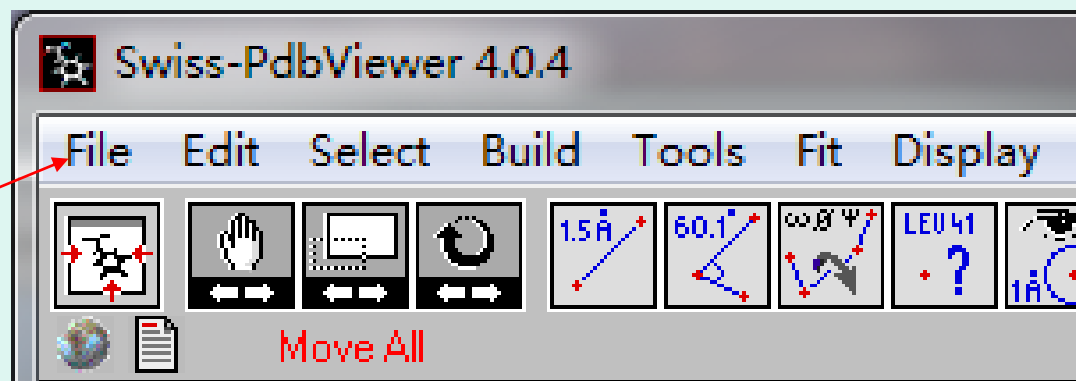
pdb 文件



c.快捷键 ctrl+o 打开 pdb 文件;

d. 菜单 file 最下面,最近使用的 pdb 文件中直接打开

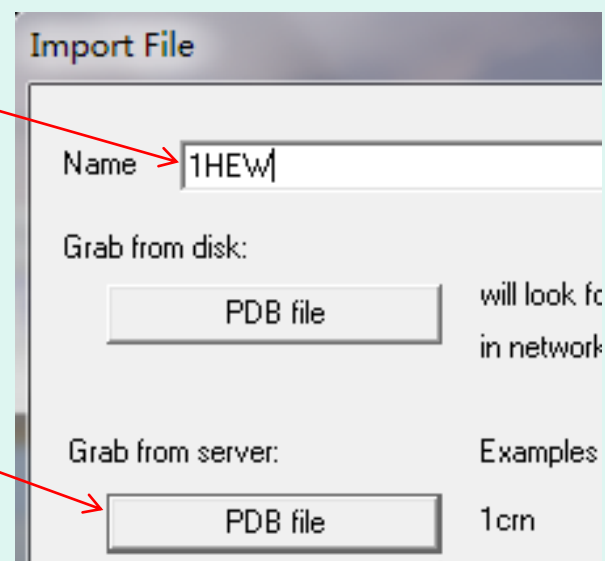
最近使用的
pdb文件



e. 在菜单 file 中点击 Import, 出现对话框, 在 Name 栏
中键入 PDB ID,

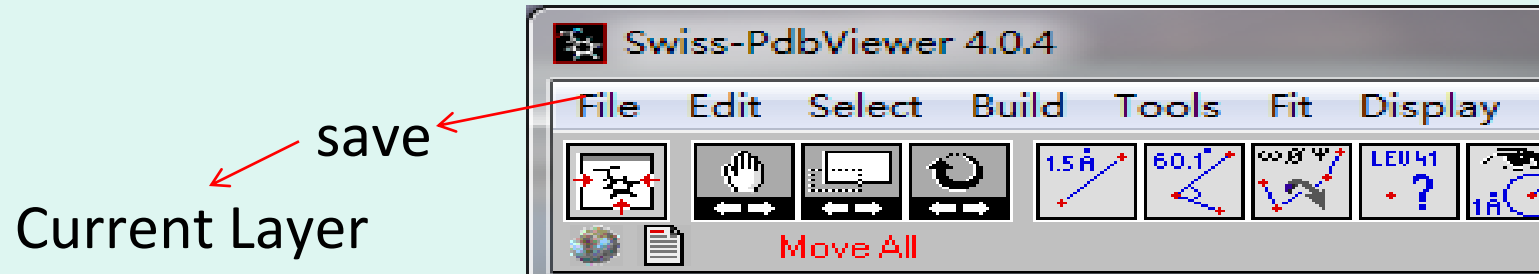
如输入 “1HEW”

然后点击 PDB File



保存 PDB 文件:

- a. file→Save→ Current Layer(Ctrl+S)保存在显示窗口活动的蛋白分子的 PDB 文件。



- b. Project(shift+ctrl+S)保存所有同时打开显示的蛋白质分子。
- c. Save selected residues of Current Layer 保存被选择的氨基酸残基。
- d. 还可以保存蛋白序列的 fasta 格式和当前蛋白质的图像。

2、wind选项卡的功能

(1)Control Panel

活动分子的 可见性和可移动性

氨基酸残基(show)

显示侧链(side)

标注残基(lable)

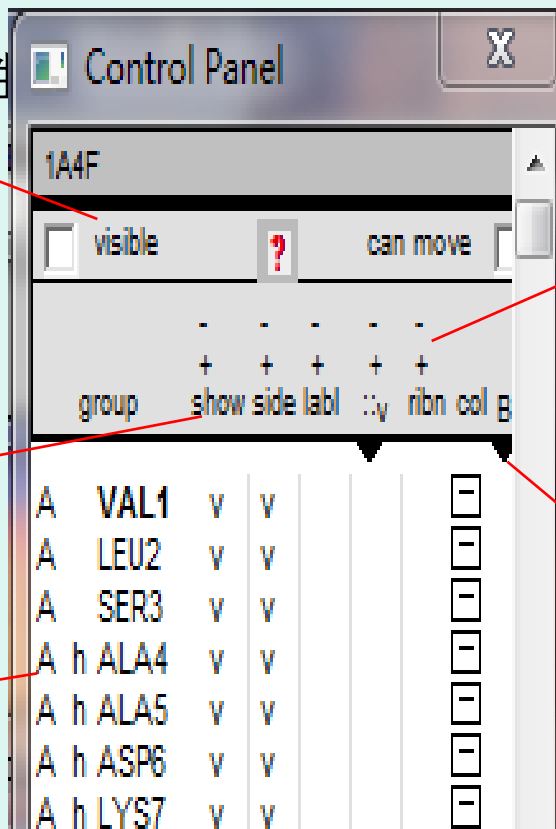
显示分子表面()

螺旋和折叠(ribbons)

颜色修饰(color)

蛋白质的主链: A.B 二级结构

氨基酸名称等



氨基酸的编号
“+” 或者 “-”
时, 显示或者隐藏
对应的氨基酸
侧链、标签、电
子云等。

后面两个黑色的箭头可以显示隐藏的菜单:

着色对象的类型—
Backbone+side(骨架和侧链)、
Backbone(骨架)、
sidechain(侧链)、
ribbon(条带)、
lable(标签)、
molecular surface(分子表面)。

wind选项卡的功能

(2) Layers infos

?Layer	taxon	sel	grp	vis	mov	axis	CA	O	H	Hbnd	Hd	st	side	HOH	cyc	Aln	W	mdl	SelGrp
1A4F	Anser indicus	v	1	v	v			v	v	v				v	v	v	*		0

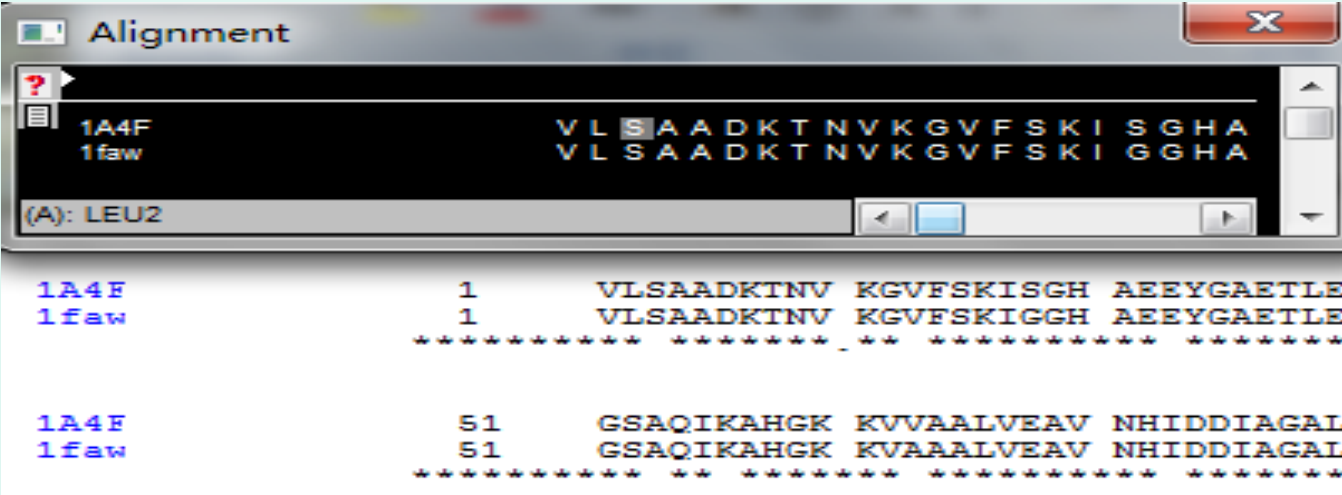
当前活动分子用红色表示 控制蛋白的可见性 移动性

- layers infos 通过操作控制各个蛋白质的显示情况，方便使用者跟据需要，清楚的观察各个空间结构。
- 点击问号标志，可针对 Layers Infos 寻求帮助。
- 可列出所有载入的分子，当前显示的分子用红色显示。
- Layers Info 一系列操作显示 axis CA，可简化模型，方便可视化空间结构重叠对比。

wind选项卡的功能

(3)Alignment

可以进行序列的比对，将斑头雁的氧合血红蛋白（1a4f）、灰雁的氧合血红蛋白（1faw）A、B链打开，用Alignment 进行序列比对。点击左侧的小图标可以以文本形式显示比对的结果。



The screenshot shows a window titled "Alignment" with a search bar containing "(A): LEU2". Below the search bar, two sequence alignments are displayed. The first alignment shows the first 50 residues of both sequences, which are identical: VLSAADKTNV KGVFVFSKISGHA. The second alignment shows residues 51-100, which are also identical: GSAQIKAHGK KVVAALVEAV NHIDDIAGAL. The alignment is visualized with asterisks indicating identity and a gap character (underscore) indicating a mismatch.

```
1A4F      1  VLSAADKTNV KGVFVFSKISGHA AEEYGAETLE
1faw      1  VLSAADKTNV KGVFVFSKIGGH AEEYGAETLE
***** _** *****

1A4F      51  GSAQIKAHGK KVVAALVEAV NHIDDIAGAL
1faw      51  GSAQIKAHGK KVAAALVEAV NHIDDIAGAL
***** ** *****
```

3、 Manipulating the Model

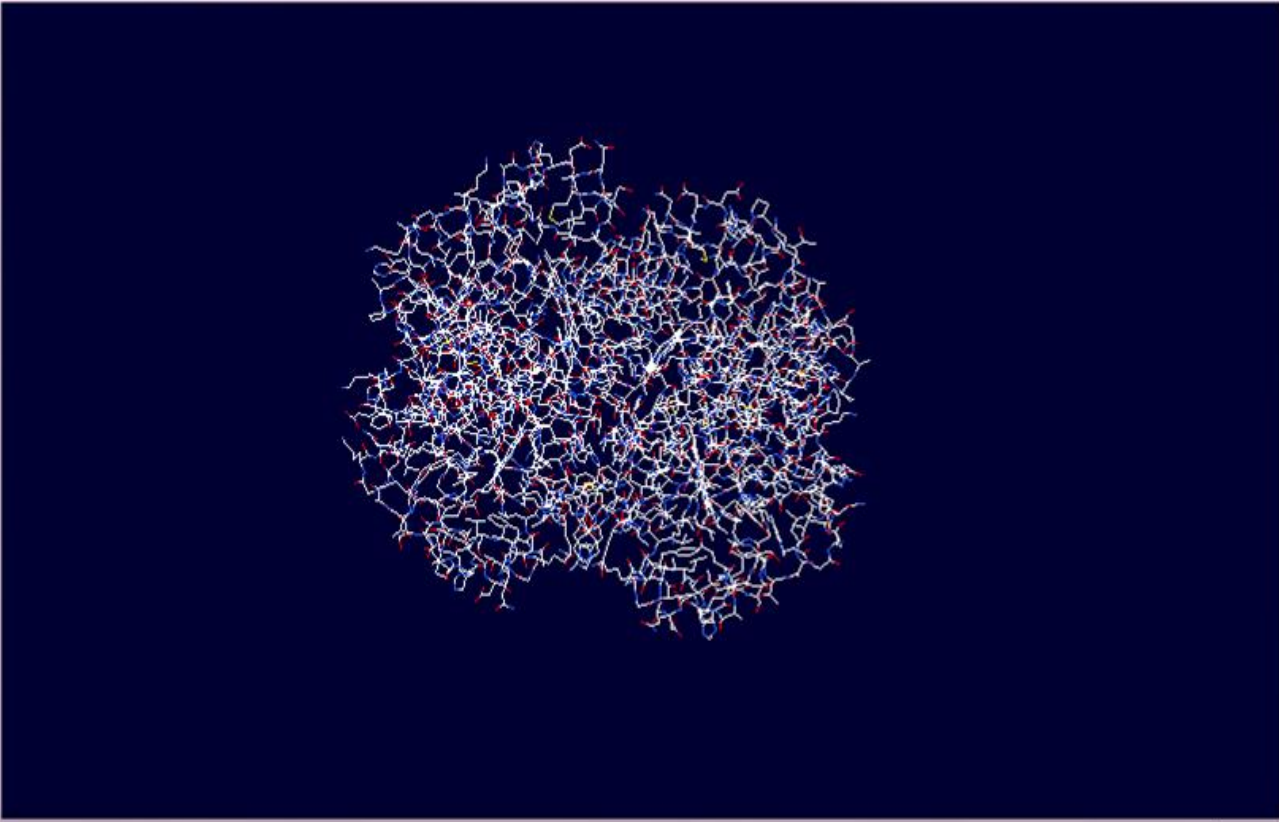
Swiss-PdbViewer 4.0.1

File Edit Select Build Tools Fit Display Color Prefs SwissModel Wind Help

15Å 60.1° 00.0° LEU41 ROTATE FORSDON ?

Move All

1A3N (809 x 476)



Control Panel

1A3N

visible ? can move

group	show	side	labl	rib	ool	B
A VAL1	v	v				<input type="checkbox"/>
A LEU2	v	v				<input type="checkbox"/>
A SER3	v	v				<input type="checkbox"/>
A h PRO4	v	v				<input type="checkbox"/>
A h ALA5	v	v				<input type="checkbox"/>
A h ASP6	v	v				<input type="checkbox"/>
A h LYS7	v	v				<input type="checkbox"/>
A h THR8	v	v				<input type="checkbox"/>
A h ASN9	v	v				<input type="checkbox"/>
A h VAL10	v	v				<input type="checkbox"/>
A h LYS11	v	v				<input type="checkbox"/>
A h ALA12	v	v				<input type="checkbox"/>
A h ALA13	v	v				<input type="checkbox"/>
A h TRP14	v	v				<input type="checkbox"/>
A h GLY15	v	v				<input type="checkbox"/>
A h LYS16	v	v				<input type="checkbox"/>
A VAL17	v	v				<input type="checkbox"/>
A GLY18	v	v				<input type="checkbox"/>
A ALA19	v	v				<input type="checkbox"/>
A h HIS20	v	v				<input type="checkbox"/>
A h ALA21	v	v				<input type="checkbox"/>
A h GLY22	v	v				<input type="checkbox"/>
A h GLU23	v	v				<input type="checkbox"/>
A h TYR24	v	v				<input type="checkbox"/>
A h GLY25	v	v				<input type="checkbox"/>
A h ALA26	v	v				<input type="checkbox"/>
A h GLU27	v	v				<input type="checkbox"/>
A h ALA28	v	v				<input type="checkbox"/>
A h LEU29	v	v				<input type="checkbox"/>
A h GLU30	v	v				<input type="checkbox"/>
A h ARG31	v	v				<input type="checkbox"/>
A h MET32	v	v				<input type="checkbox"/>
A h PHE33	v	v				<input type="checkbox"/>
A h LEU34	v	v				<input type="checkbox"/>
A SER35	v	v				<input type="checkbox"/>
A PHE36	v	v				<input type="checkbox"/>
A PRO37	v	v				<input type="checkbox"/>
A h THR38	v	v				<input type="checkbox"/>
A h THR39	v	v				<input type="checkbox"/>
A h LYS40	v	v				<input type="checkbox"/>
A h THR41	v	v				<input type="checkbox"/>
A TYR42	v	v				<input type="checkbox"/>

Layers Info

?Layer	taxon	sel	grp	vis	mov	axis	CA	O	H	Hbnd	Hdst	side	HOH	cyc	Aln	Wmdl	SelGrp
1A3N	Homo sapiens	v	1	v	v			v	v	v			v	v	v	+	0

控制菜单

Tools ←

→ **Menus**

PDB 文件图标: 单击显示当前活动层的 PDB 文件。

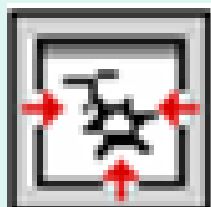
消息条: 提供工具使用的说明, 以及显示信息。

帮助图标: 单击, 得到关于工具条 (Toolbar) 的使用方法。

Toolbar: contains the menus and tools of the program.



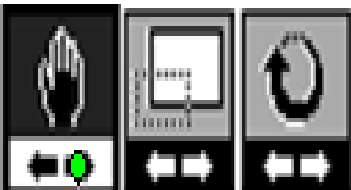
基本指令



→ 居中显示



→ 区分基团与原子



→ 平移、缩放、
旋转模型



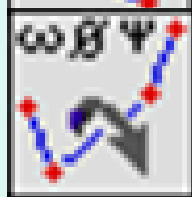
→ 显示/选择与已选原子
有特定距离的基团



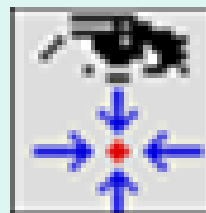
→ 测量原子间距离



→ 测量键角



→ 测量二面角



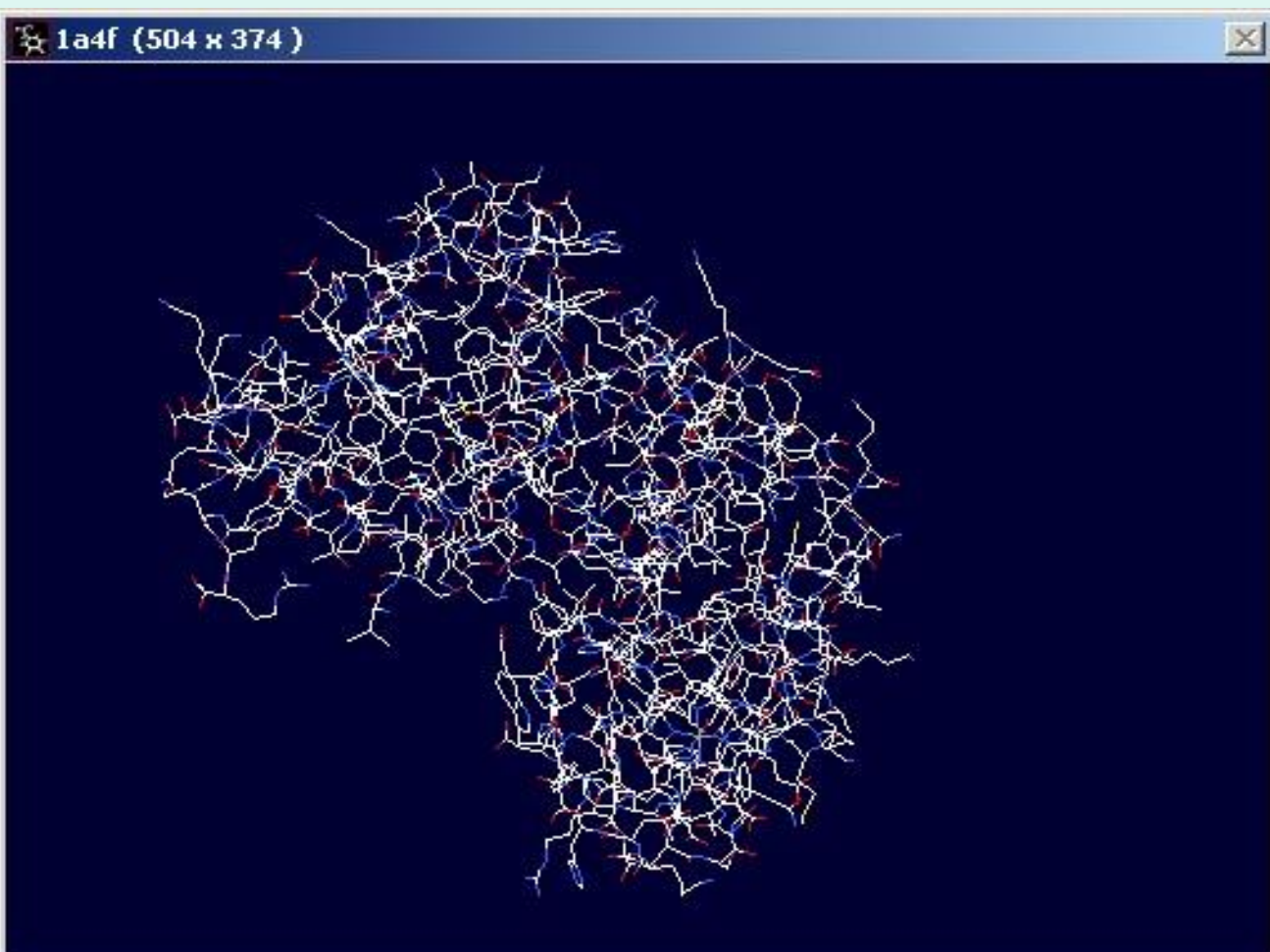
→ 以选中原子为中心使
模型居中

应用举例

- 进入PDB Protein Data Bank:
<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>
- 根据蛋白名称及PDB ID搜索所需蛋白，并下载pdb或fasta文件。
- 以PDB ID: 1A4F为例。
- 在控制菜单Wind中分别选择layer info 和control panel。

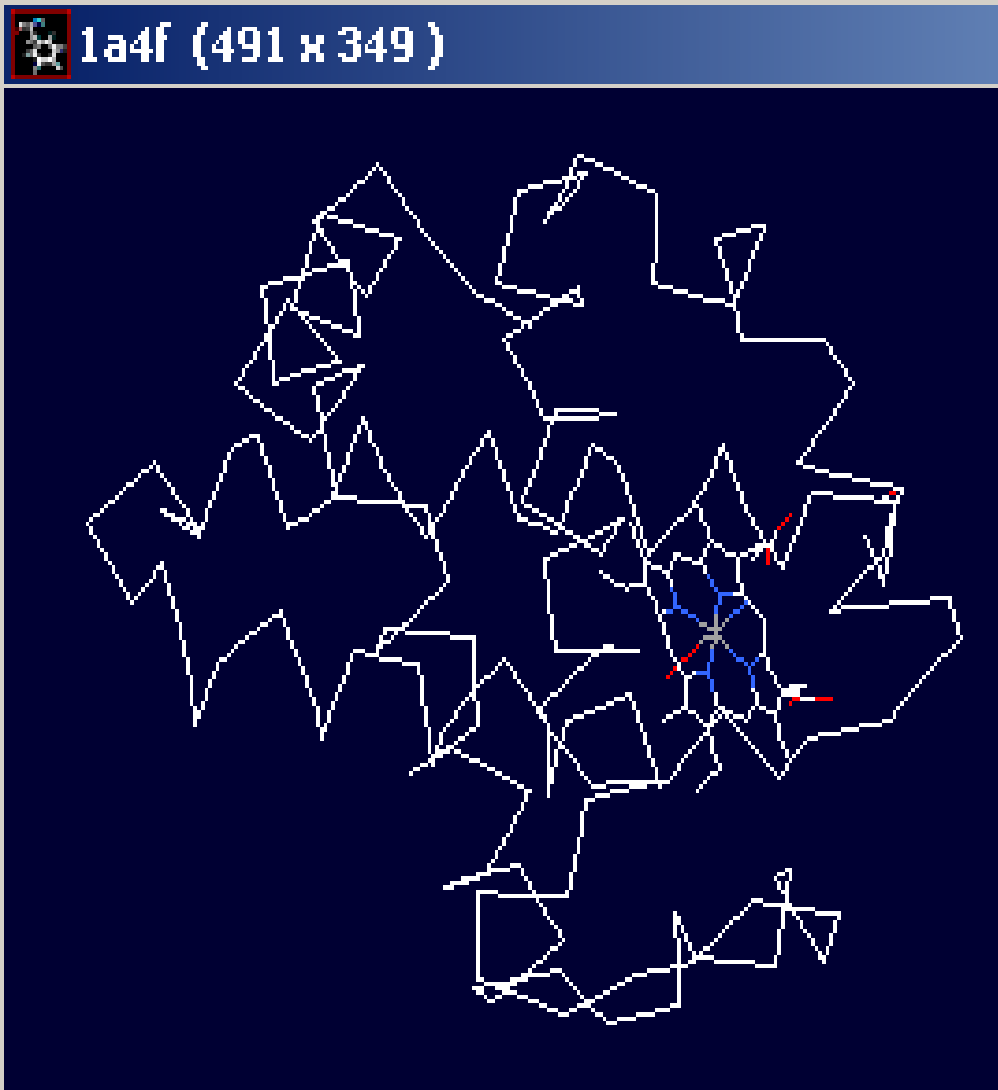
工作界面

Layers Info																	
Layer	taxon	sel	grp	vis	mov	axis	CA	O	H	Hbond	Hdst	side	HOH	cyc	Aln	Wmdl	SelGrp
1a4f	Anser indicus	v	1	v	v			v	v	v			v	v	v	*	0

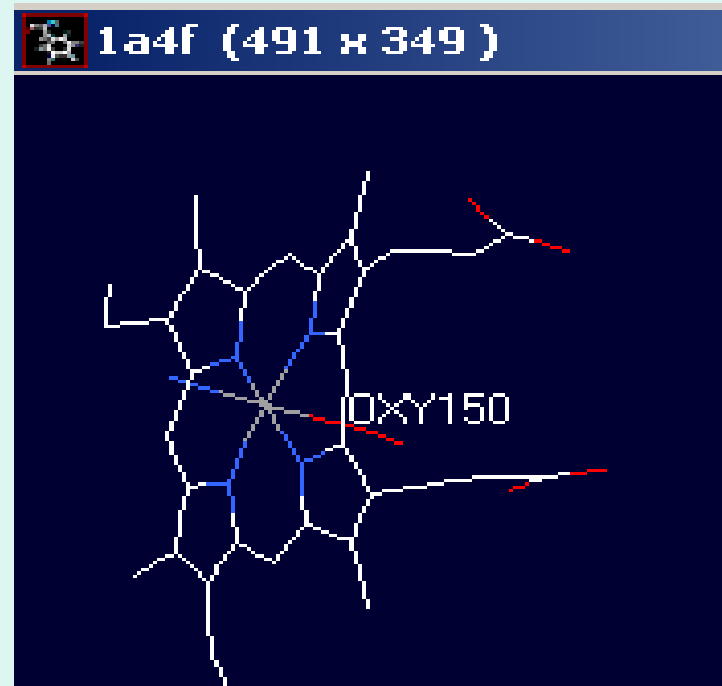


Control Panel									
1a4f									
<input checked="" type="checkbox"/>	visible	<input type="checkbox"/>	?	can move	<input checked="" type="checkbox"/>				
	+	-	+	-	+	-	+	-	+
group	show	side	labl	ay	ribn	col	g	s	
A	VAL1	v	v						
A	LEU2	v	v						
A	SER3	v	v						
A	h ALA4	v	v						
A	h ALA5	v	v						
A	h ASP6	v	v						
A	h LYS7	v	v						
A	h THR8	v	v						
A	h ASN9	v	v						
A	h VAL10	v	v						
A	h LYS11	v	v						
A	h GLY12	v	v						
A	h VAL13	v	v						
A	h PHE14	v	v						
A	h SER15	v	v						
A	h LYS16	v	v						
A	h ILE17	v	v						
A	h SER18	v	v						
A	h GLY19	v	v						
A	HIS20	v	v						
A	ALA21	v	v						
A	h GLU22	v	v						
A	h GLU23	v	v						
A	h TYR24	v	v						
A	h GLY25	v	v						
A	h ALA26	v	v						

只显示1a4f的A链的C_A



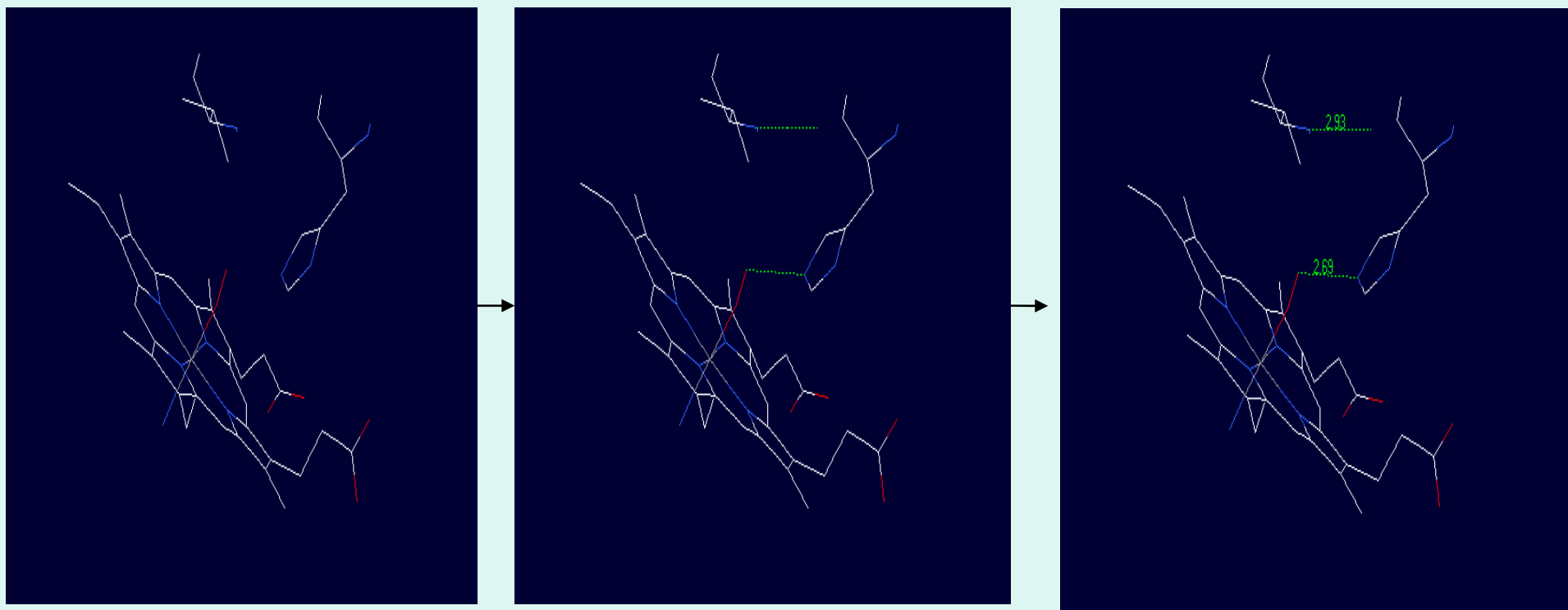
只显示并标记A链中结合氧原子的活性中心



4、Selecting and Displaying

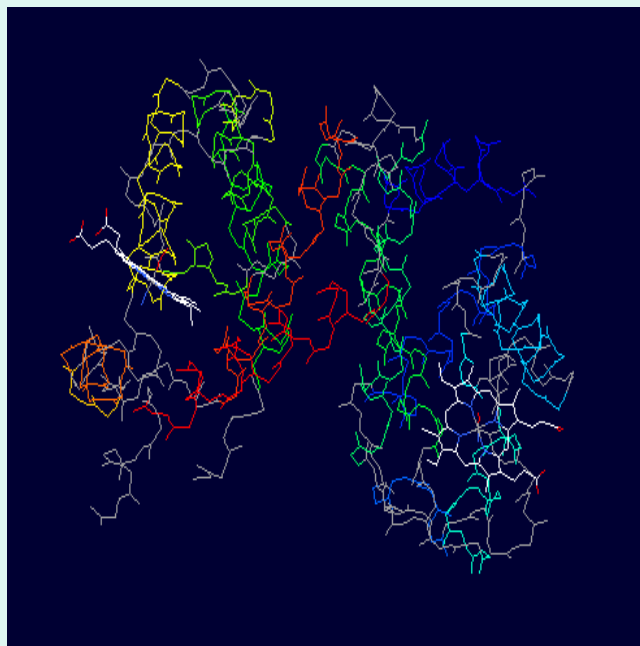
- **Select**选项：根据需要选择不同的结构或基团观察，如**Group Kind**、氨基酸性质、二级结构等方面的结构模型。
- **Display**选项：可显示或隐藏所选择的目标分子；多视角显示分子；设置或清除标签；**Render in 3D** 或者**Render in solid 3D** 。

- **氢键的显示及测距**：选择 Display→show H-bonds，或者先选择 Tool→Compute H-Bonds，再选择 Layers Info中的 Hbnd，氢键就会以绿色的形式表现出来。
- **氨基酸查看**：如查看Cys，Select→Group kind→Cys。
- **反向选择**：Select→Inverse selection，当前选中的部分变为未选中的部分；同时原来未选中的部分变为选中的部分。
- **氨基酸归类**：Select→Group Property 中有 4 个选项：Basic; Acidic; Polar; non Polar (它们分别是选择碱性、酸性、极性、非极性氨基酸)。



图示：氢键的显示及测距（1FAW）

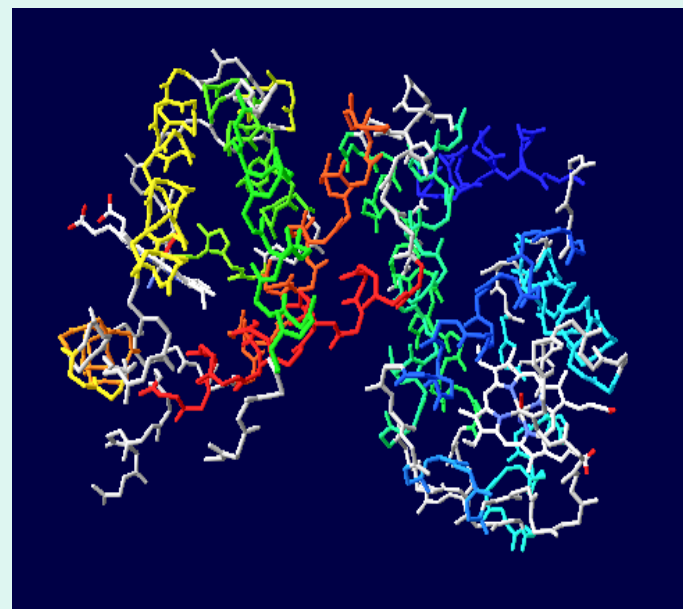
图示：1A4F



color→act on
ribbon→Secondary
Structure Succession



Render in 3D

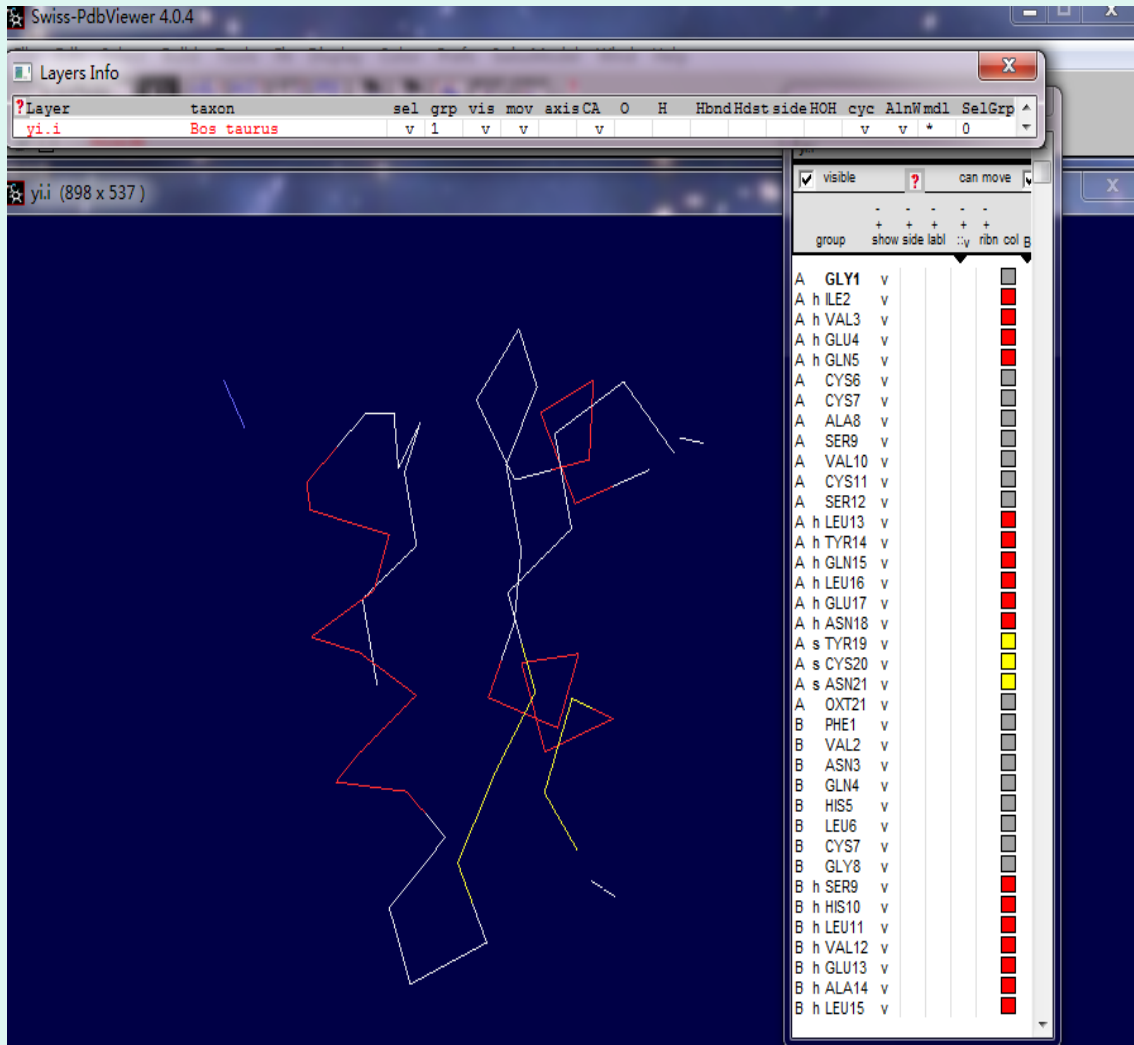


Render in solid 3D

5、Coloring Swiss-PdbViewer

- 上色（Color）指令：根据需要对所选择的部分上色。该指令能用不同的颜色区分不同的模型区块，更加生动地展示了分子结构、化学物理特征等。
- 下面以牛胰岛素（Insulin Bos Taurus, 4E7U）为例说明。

Color---Secondary Structure

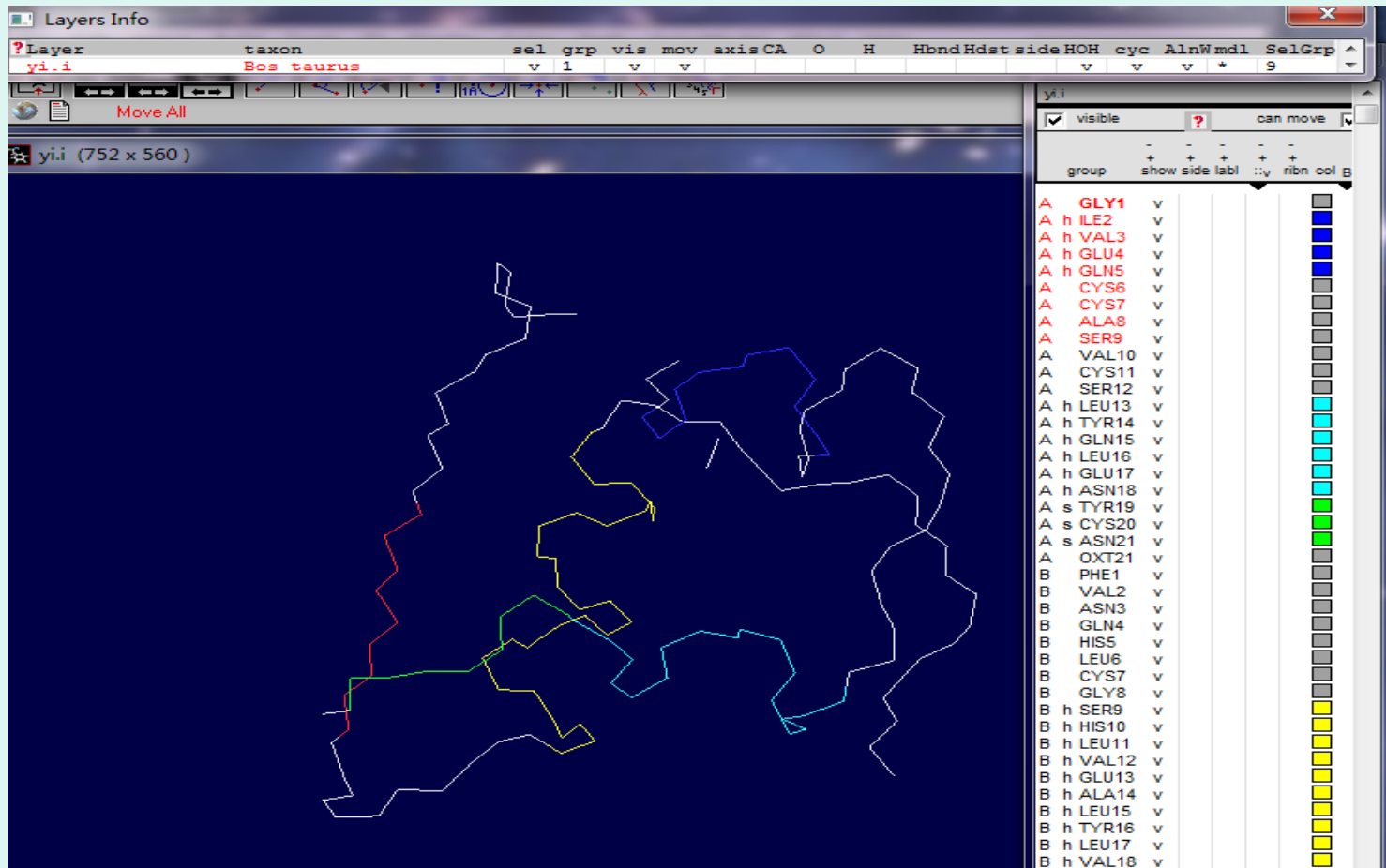


螺旋 (helix) — 红色

折叠 (strand) — 黄色

无规卷曲 (coil) — 灰色

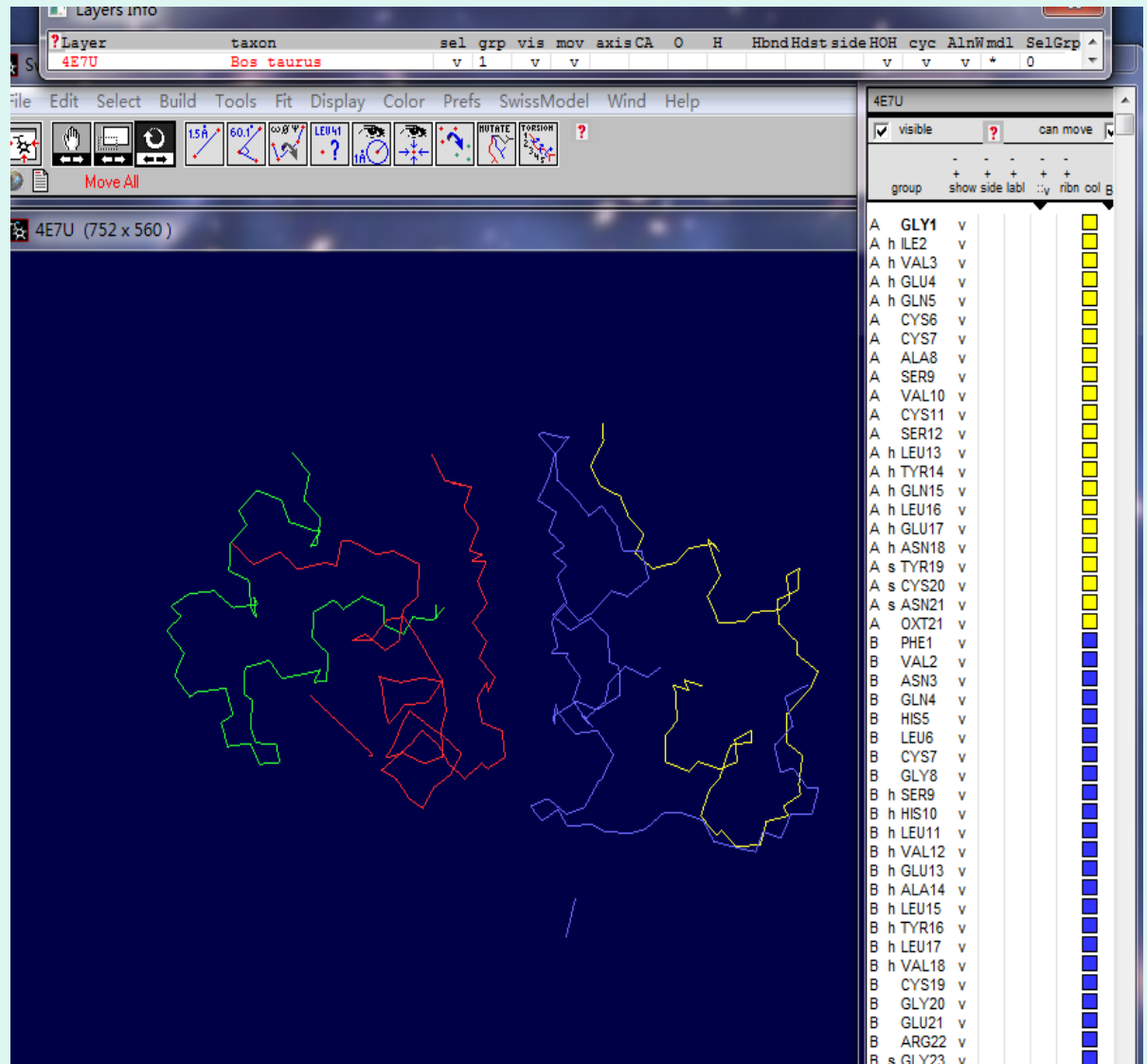
Color--- Secondary Structure Succession



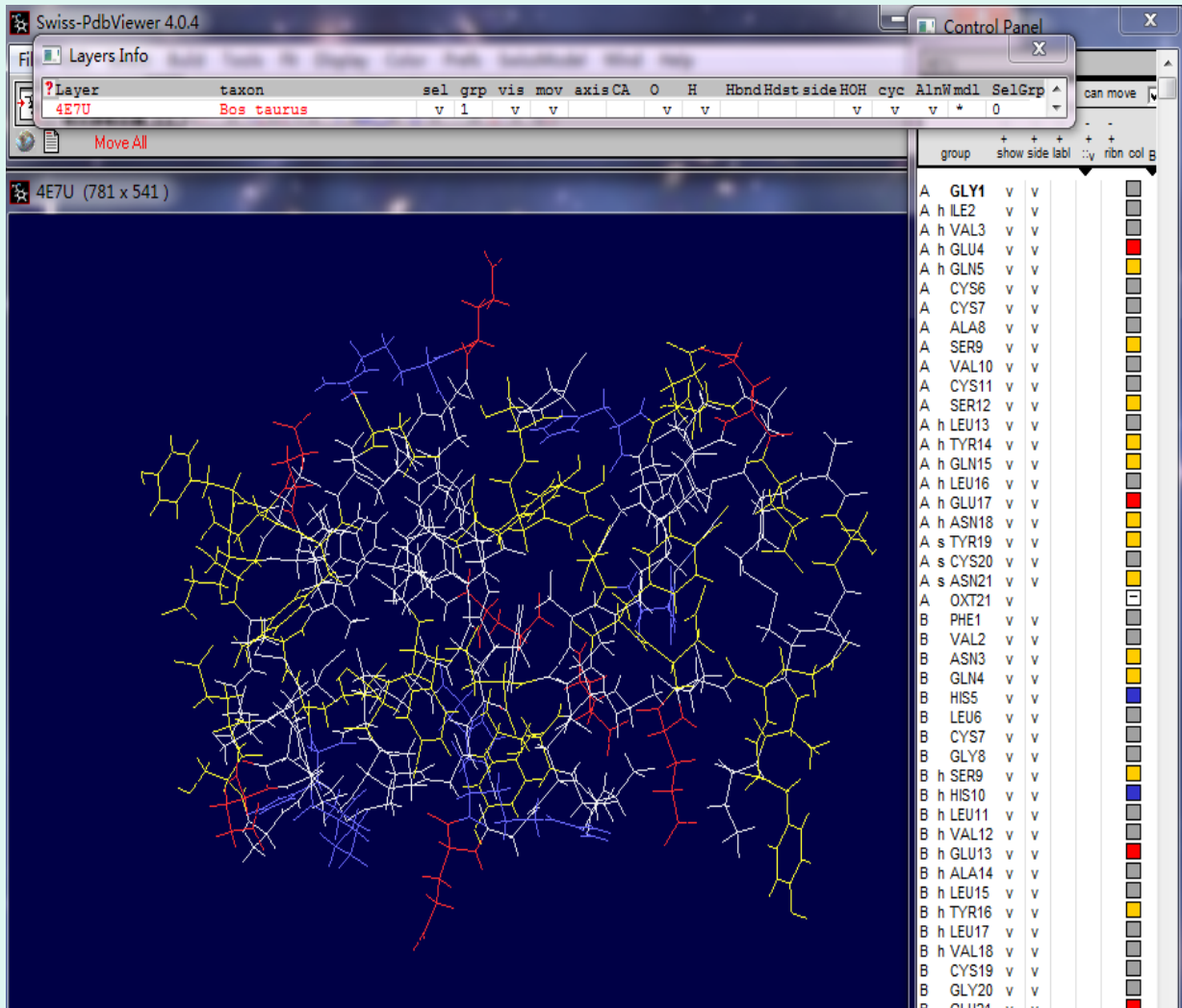
△能将整个序列的每个二级结构用不同的颜色显示出来。这样可以更清楚的看到从氨基端到羧基端二级结构间的顺序。

Color---by Chain

用于区分含有
多条链的结构，
不同的链用不
同的颜色表示
出来。(A链用黄
色表示、B链
蓝色、C链红
色、D链绿色)



Color---by Type



对结构模型染色的依据是残基的化学类型：

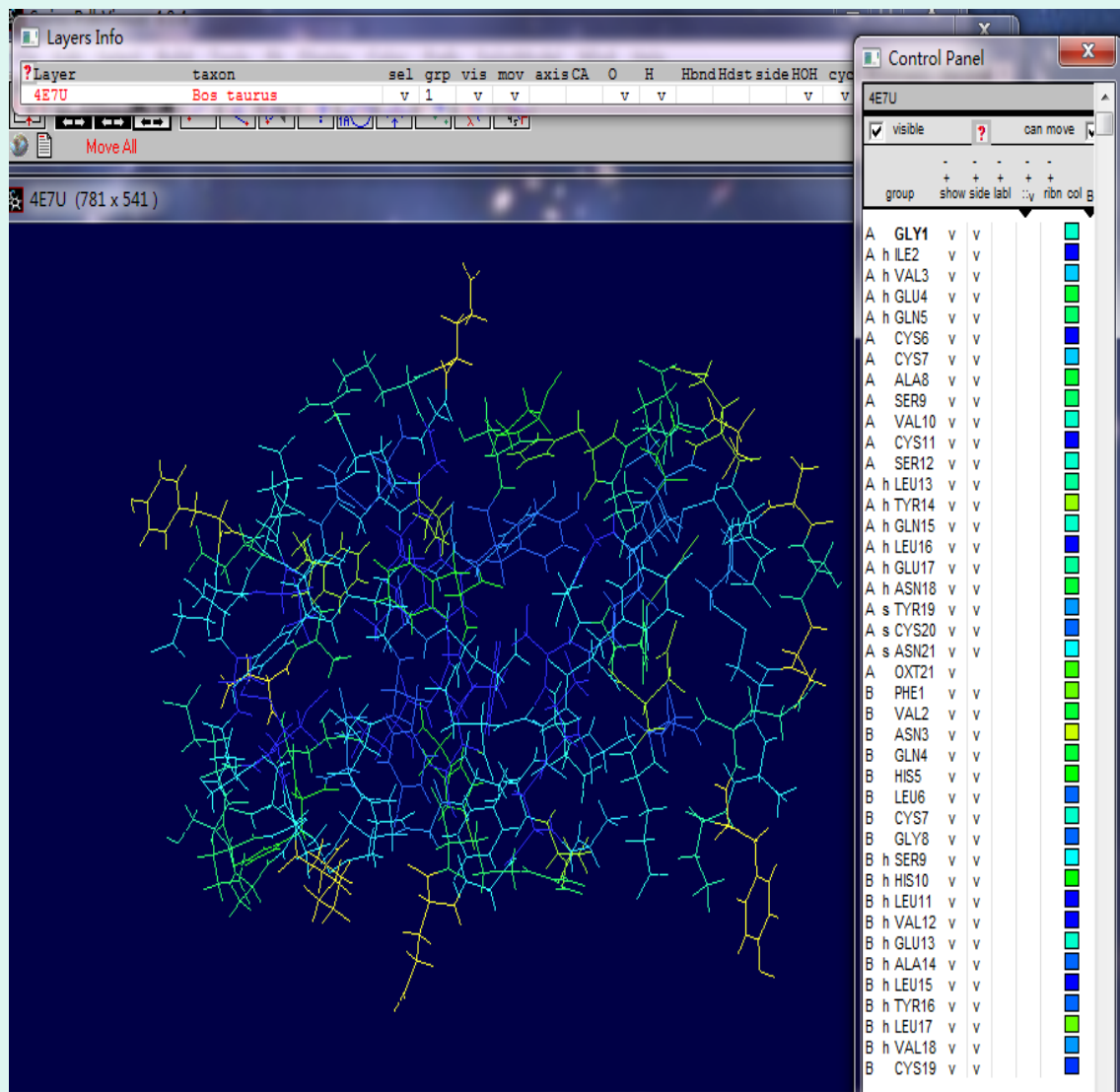
正电——蓝色；

负电——红色；

不带电——黄色；

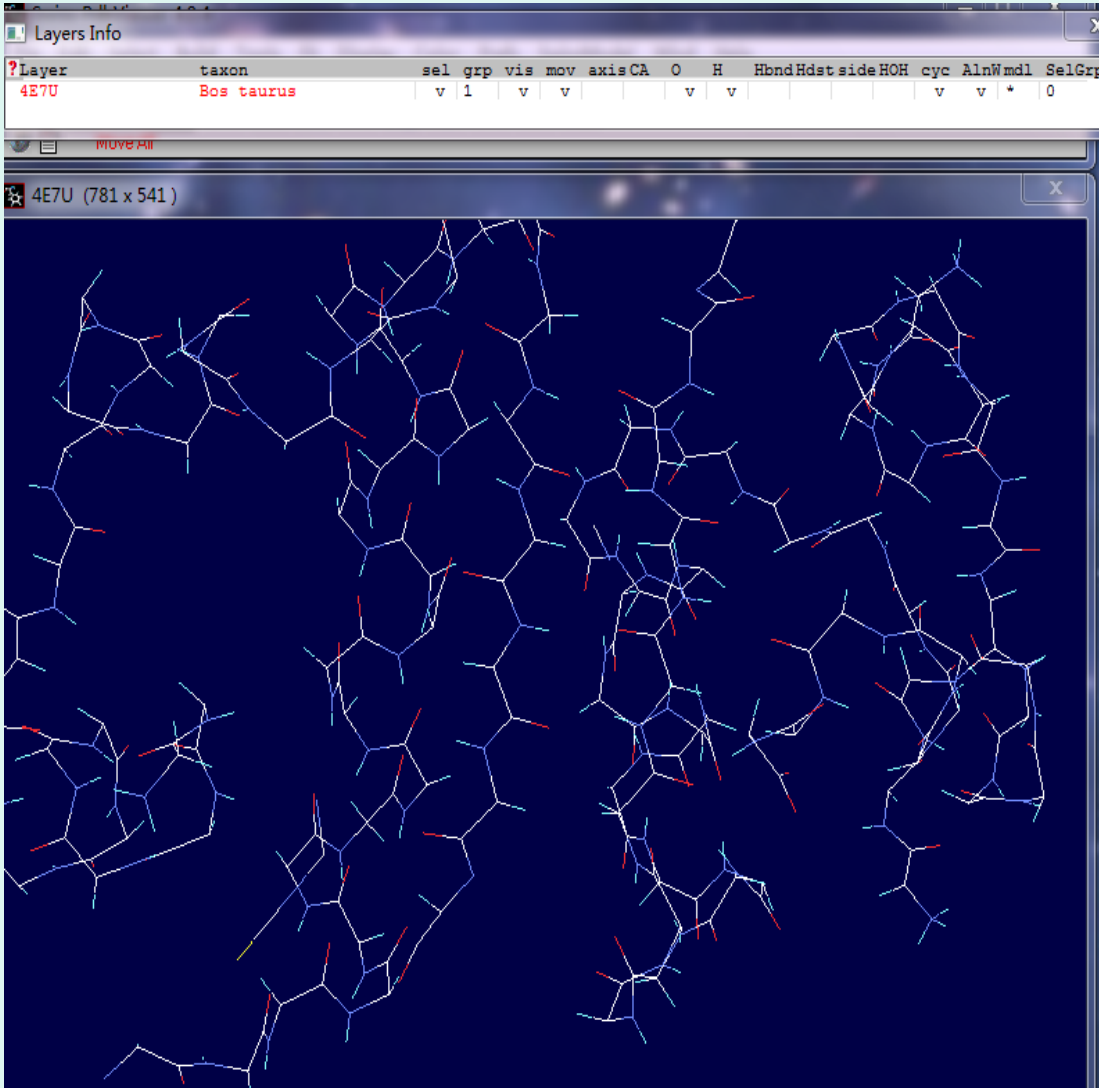
无极性——灰色。

Color---by Accessibility



结构中每个氨基酸残基与周围溶剂接触程度的多少决定了残基的颜色：
蓝色——表示与溶剂接触最少；
红色——表示完全暴露于分子表面；
蓝绿色——表示介于两者之间。

Color ---by CPK



能将有关基团的
颜色恢复到标
准状态:

C:白色;

N:蓝色;

O:红色;

S:黄色;

P:桔红色;

H:蓝绿色;

其它原子:灰色。

Color--- B Factor

- 模型中的颜色取决于 **B** 因子(或称之为温度因子)。
- **B Factor**: 对于一个原子来说, **B** 因子 指的是该原子在一般(平均化了的)模型的位置与在其他模型的位置间的平均距离, 可反映分子各部分的摇摆性或活动性。
- 因此, 可以利用 **B** 因子来判断其他模型与一般模型的一致性。若在所有测得的模型中该原子的位置变化不大, 是固定的, 则以深蓝色显示; 若在所有测得的模型中该原子的位置是不确定的或者说摇摆性很大, 则以红色表示。如下图:

Color--- B Factor

Swiss-PdbViewer 4.0.4

Layers Info

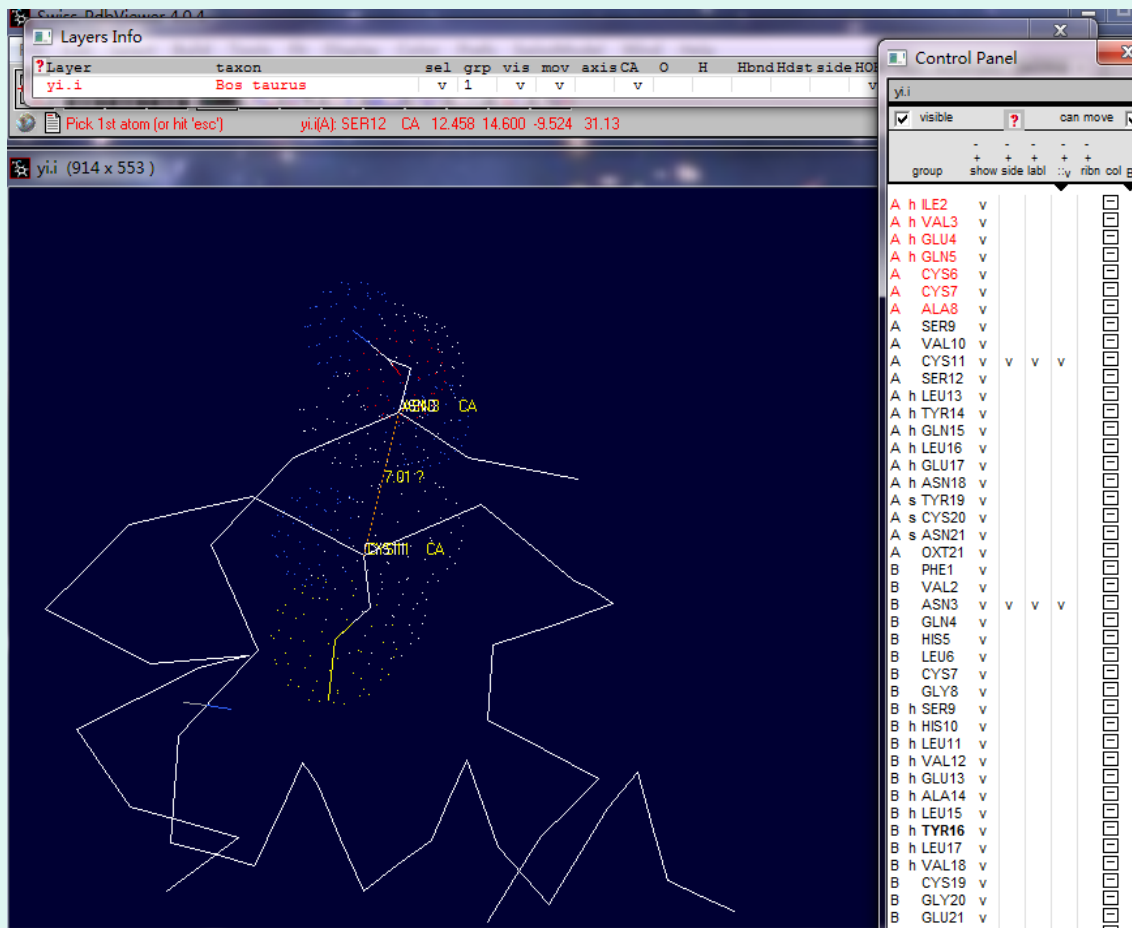
?Layer	taxon	sel	grp	vis	mov	axis	CA	O	H	Hbnd	Hdst	side	HOH	cyc	Aln	Wmdl	SelGrp
4E7U	Bos taurus	v	1	v	v			v	v					v	v	*	22


4E7U (781 x 541)

group	show	side	labl	ribn	ool	B
B h LEU11	v					■
B h VAL12	v					■
B h GLU13	v					■
B h ALA14	v					■
B h LEU15	v					■
B h TYR16	v					■
B h LEU17	v					■
B h VAL18	v					■
B CYS19	v					■
B GLY20	v					■
B GLU21	v					■
B ARG22	v					■
B s GLY23	v					■
B s PHE24	v					■
B s PHE25	v					■
B s TYR26	v					■
B THR27	v					■
B PRO28	v					■
B LYS29	v					■
B ALA30	v					■
B OXT30	v	v	v	v		■
C GLY1	v					■
C h ILE2	v					■
C h VAL3	v					■
C h GLU4	v					■
C h GLN5	v					■
C CYS6	v					■
C CYS7	v					■
C ALA8	v					■
C SER9	v					■
C VAL10	v					■
C CYS11	v					■
C SER12	v					■
C h LEU13	v					■
C h TYR14	v					■
C h GLN15	v					■
C h LEU16	v					■
C h GLU17	v					■
C h ASN18	v					■
C TYR19	v					■
C CYS20	v					■


6、 Measuring and Labeling

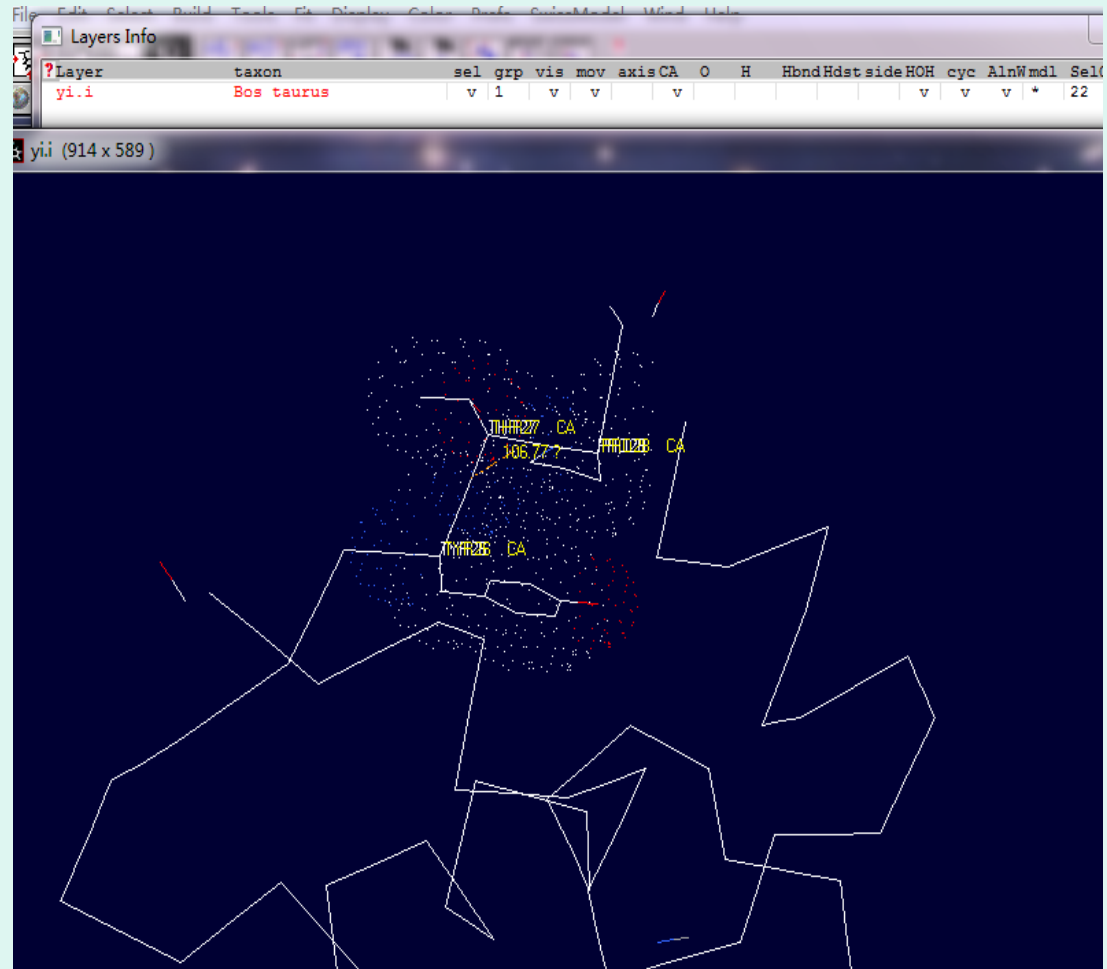
测量 2 点之间的距离：



点击图标 
选取任意两
点，即可测
得这两点间
的距离。

键角的测定:

点击图标 
先点击角的
顶点，再点
击余下两点，
即可测得夹
角值。



二面角的测定：




按钮用于测量二面角。

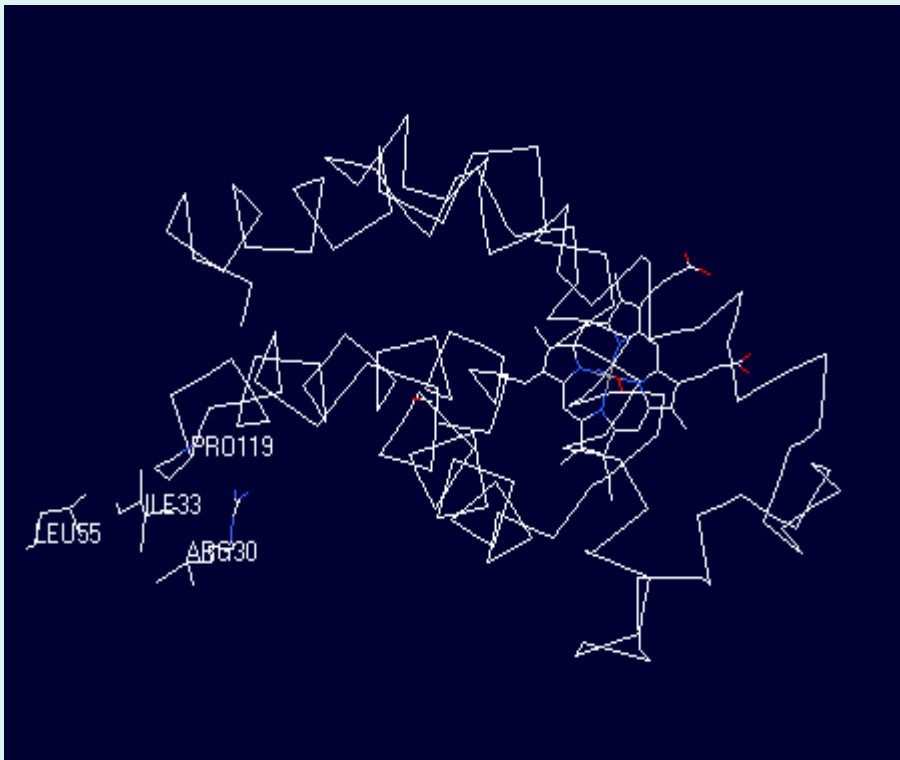
单击该按钮并选定一个原子，则该原子所处的氨基酸残基的 ω 、 Φ 、 ψ 角的值会依次显示在信息栏里。

注意：如果发现以上测量的数据不是你想要的，可以清除，重新测量。

选择：**Display**→**Labels**→**Clear User Labels**

7、Mutating and Changing Side-Chain Conformations

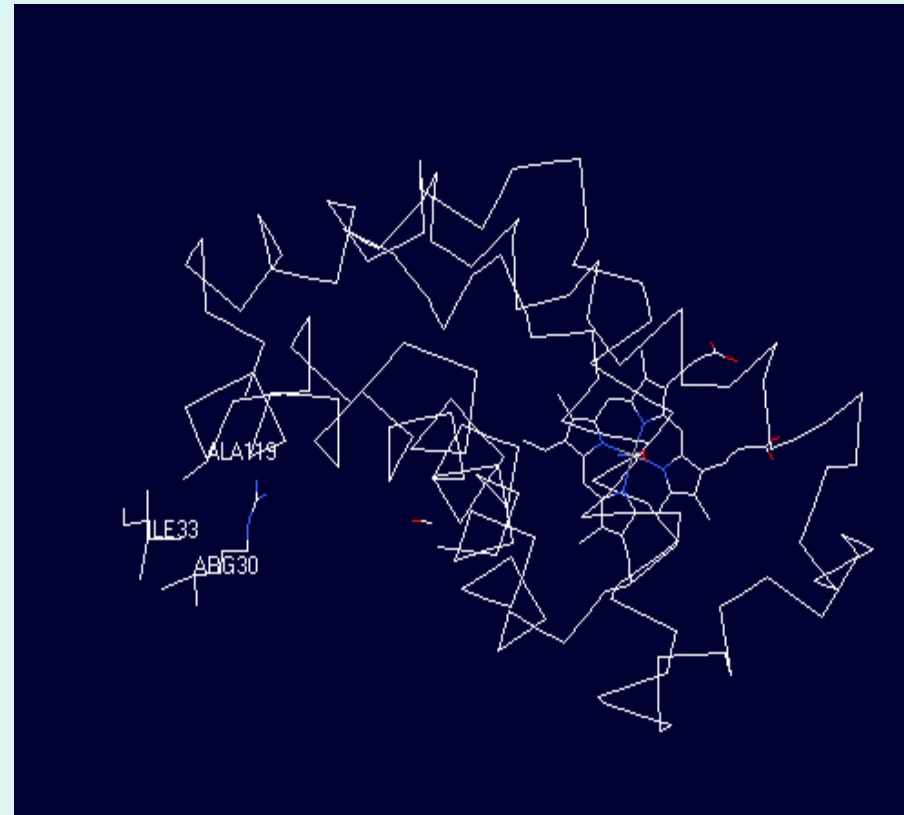
- 此项以灰雁氧合血红蛋白（1FAW），斑头雁氧合血红蛋白（1A4F）为例。
- 斑头雁携氧能力强于灰雁。
- 经氨基酸测序，灰雁第119位为Pro，斑头雁第119位为Ala。
- 点击工具栏中  将灰雁Pro119，替换成Ala119。



斑头雁：A链119位为Ala，其侧链CB与B链上小于4埃的残基共2两个，Arg30和Ile33。



灰雁：A链119位为pro，其侧链CB、CC、CD与B链上距离小于4埃得残基共3个，分别为Arg30、Ile33、Leu55。



谢谢

