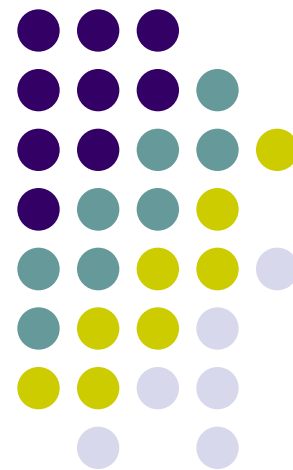


# Swiss-PdbViewer



第九组：朱曼璐、戴雄风、杨云、蒋洁琼



- Loading and saving
- Wind and Help
- Manipulating the Model
- Selecting and Displaying
- Coloring
- Fitting



# Loading and saving

## 载入蛋白分子

- 直接在菜单**File**→**Open PDB File**
- 打开**Swiss-PdbViewer**之后再直接把**pdb**文件拖进去即可
- 快捷键**ctrl+o**打开**pdb**文件
- 菜单**File**最下面的最近使用的**pdb**文件中直接打开



# Loading and saving

## 保存PDB文件

- File→Save→Layer(Ctrl+S)保存在显示窗口活动的蛋白分子的PDB文件
- Shift+Ctrl+S: 保存所有同时打开的蛋白质分子
- Save selected residues保存被选择的氨基酸残基



# Wind and Help

- 在Wind窗口下有Toolbar; Control Panel; Alignment; Layers Info等。如下图所示。以DctB-apo(PDB: 3E4Q)为例介绍这些功能。

Wind	Help
Toolbar	Alt+'
Control Panel	Alt+,
Alignment	Ctrl+L
Layers Info	Ctrl+I
<hr/>	
Ramachandran Plot	Ctrl+R
Electron Density and Potential Maps	
Cavities	
<hr/>	
<input checked="" type="checkbox"/> Link Tool and Graphic Windows	
<hr/>	
Text	Alt+\$

# Control Panel



当前显示的分子

Control Panel

DotBp- apo

visible  can move

group show side label ribbon color

A	s	THR293	v	v				
A	s	MET294	v	v				
A	s	VAL295	v	v				
A		PRO296	v	v				
A		SER297	v	v				
A		THR298	v	v				
A		ASN299	v	v				
A	s	TRP300	v	v				
A	s	ARG301	v	v				
A	s	LEU302	v	v				
A	s	GLU303	v	v				
A	s	GLN304	v	v				
A	s	LEU305	v	v				
A	s	SER306	v	v				
A		PRO307	v	v				
A		LEU308	v	v				
B		ALA55	v	v				
B		GLY56	v	v				
B	h	LEU57	v	v				
B	h	ALA58	v	v				
B	h	GLY59	v	v				
B	h	GLN60	v	v				
B	h	SER61	v	v				
B	h	ARG62	v	v				
B	h	ILE63	v	v				
B	h	ASP64	v	v				
B	h	ALA65	v	v				
B	h	SER66	v	v				

控制当前蛋白分子的可见性和移动性

Group 栏中主要显示以下信息：  
蛋白质中的链或亚基：A, B...  
二级结构：h (helix)  
                  s (strand)  
氨基酸名称：如THR、MET等  
氨基酸的编号

从左至右依次是：显示氨基酸残基(show)，显示侧链(side)，标注残基(label)，显示分子表面(ribbon)，以飘带形式显示螺旋和折叠(ribbon)，并且可以有选择的对各种氨基酸残基着色(color)。每一项上面的+标志，当点击“+”时，就会针对选中的氨基酸显示相应的侧链、标签、电子云等，点击“-”时，则不显示。

# Layers Info



?Layer	taxon	sel	grp	vis	mov	axis	CA	O	H	Hbnd	Hdst	side	HOH	cyc	Aln	Wmdl	SelGrp
DctBp- apo	Sinorhizobium meliloti	v	1	v	v	v		v	v			v	v	v	v	*	255
DctBp malonate b	Sinorhizobium meliloti	v	2		v			v	v	v		v	v	v	v		0

layers info可以同时显示多个蛋白质的信息，通过对layers info中选项的修改可以控制不同蛋白序列的显示状态。

vis 是用来控制这个蛋白质可见还是不可见

mov 是用来控制这个蛋白质是否可以移动

axis 给该图形加一个坐标轴，该坐标轴有三个方向，x, y, z

CA 用来控制是否只显示蛋白质的主链的碳原子

O, H 可以决定是否在图形中显示氢和氧原子

sel 是用来显示在control panel中所选择的氨基酸的残基数

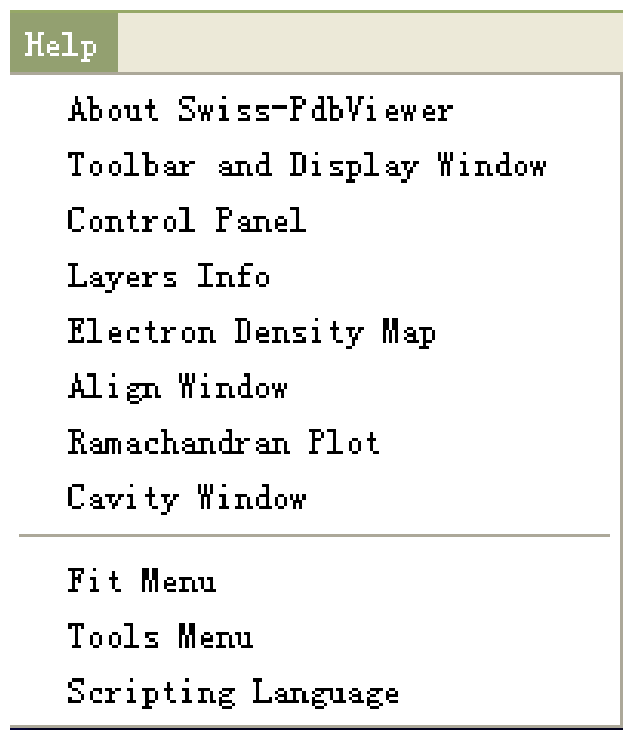
Hbnd 控制是否显示氢键

HOH 表示水分子或者是溶剂



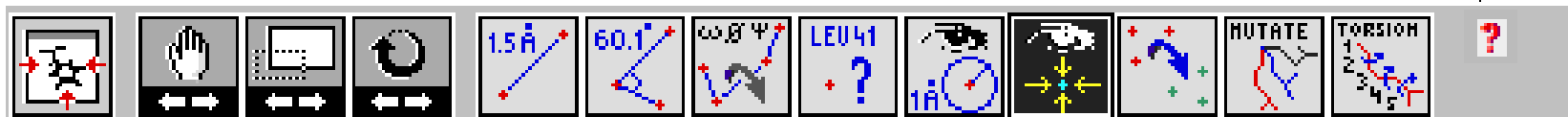
# Wind and Help

**Help** 窗口下包括了Swiss-pdbView中一些选项的功能介绍，如有需要可在其中查找。例如Fit Menu中介绍了Fit选项下各个子选项的功能。





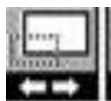
# Manipulating the Model



将在窗口中显示的蛋白质结构图形居中



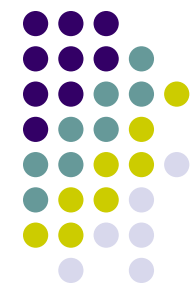
平行移动窗口中的模型



放大或缩小窗口中的模型



旋转蛋白质结构模型，从而可以从不同角度来观察蛋白模型




测量两个原子间的距离

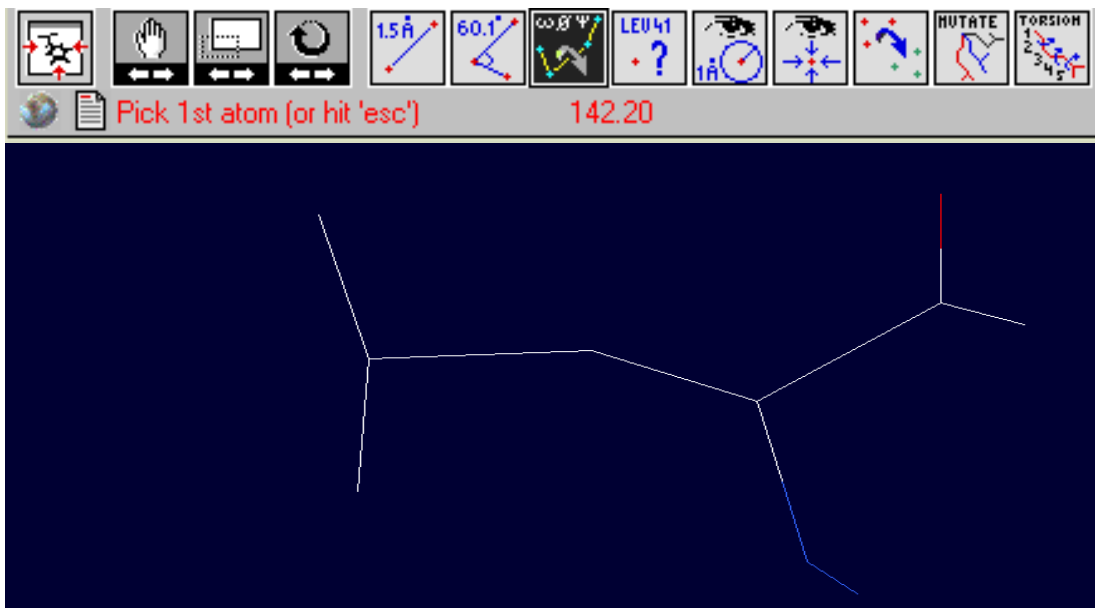


测量三个相邻原子的角度



测量相邻四个原子的二面角

Control +  ，然后选择相邻的四个原子。二面角为 $142.2^\circ$




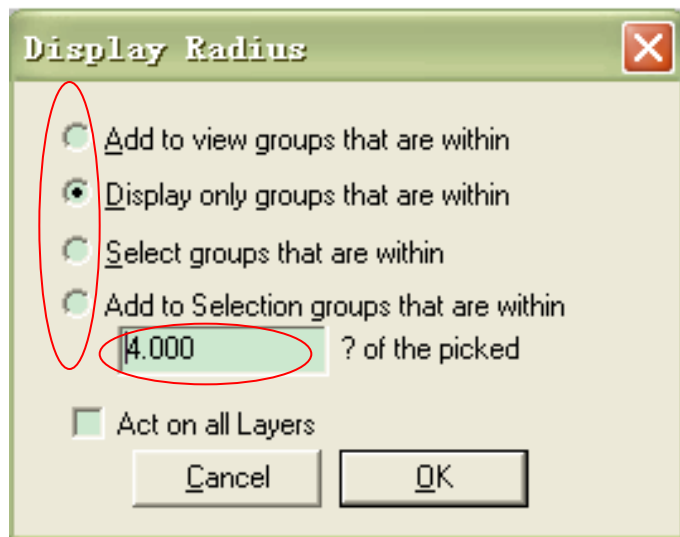


查看选中的氨基酸残基的名称，及其在蛋白质序列中的位置



以某个原子为中心，显示在一定范围内的所有氨基酸残基

点击  按钮，然后选择目标原子，之后设置参数即可





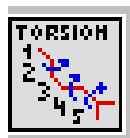
以选定的某个原子为中心



将一个分子叠加到另一个分子上；在这种情况下，可以点击相应分子中的三个原子来进行叠加



应用这个工具进行对某一点的定点突变



用来对所选的氨基酸残基的某一链进行旋转扭曲

# Selecting and Displaying

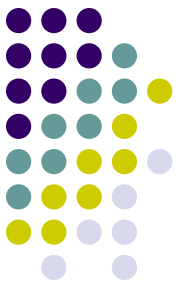


- **Displaying**

包括show H-bonds; show H-bonds Distances; show backbone as carbon alpha trace; Render in 3D etc. 以前两个为例介绍

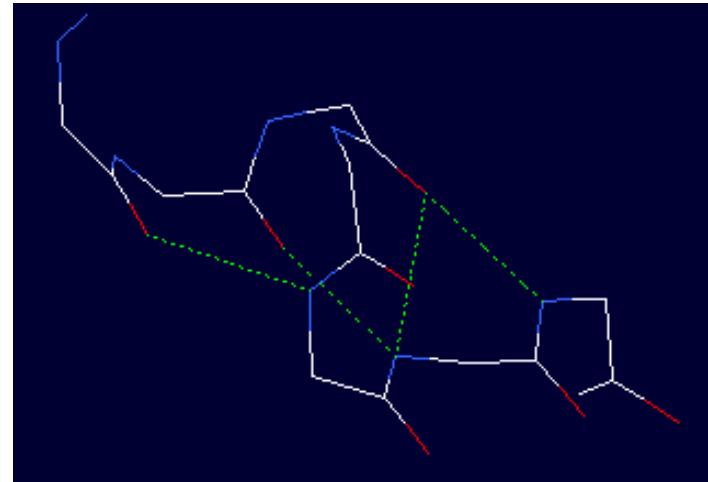
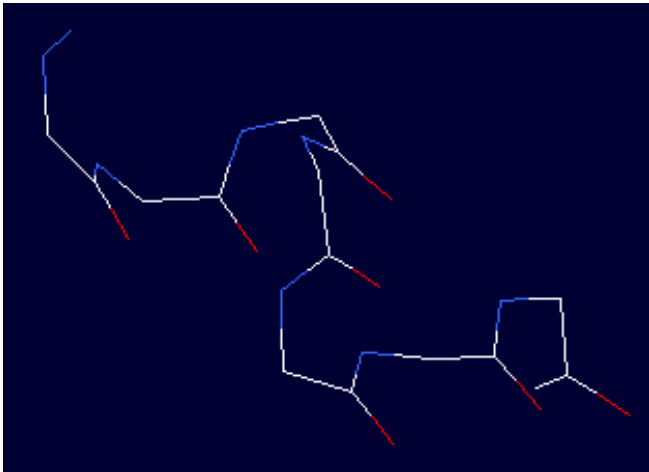
- **Selecting**

包括inverse selection; group kind; group property; secondary structure etc. 以前三个为例介绍



# Displaying

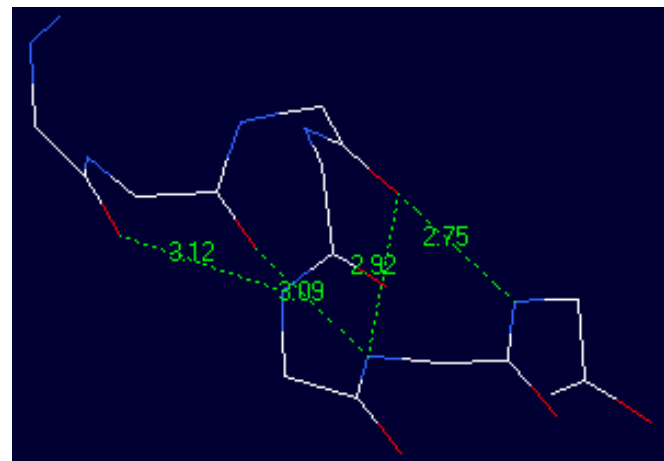
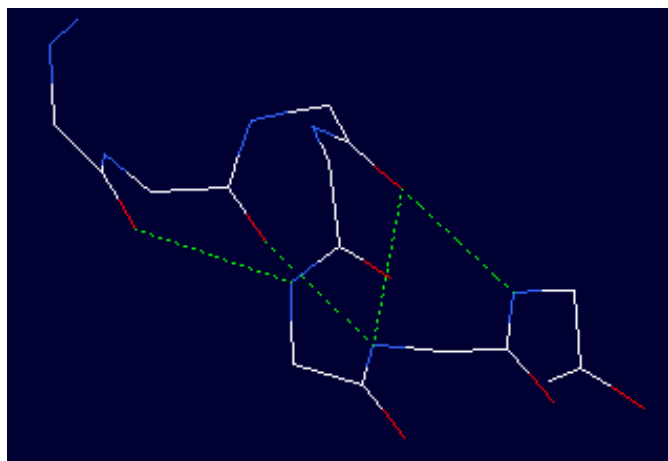
- Display---show H-bonds (或Layers Info中Hbnd, 或Tool---compute H-bounds), 可以显示蛋白结构模型中的氢键 (绿色虚线)



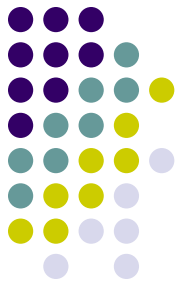


# Displaying

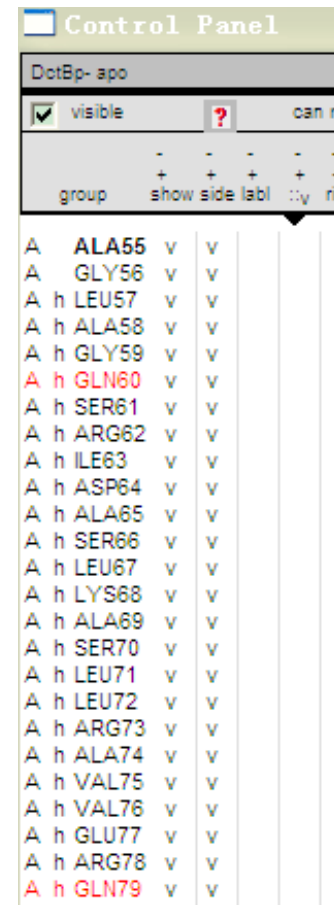
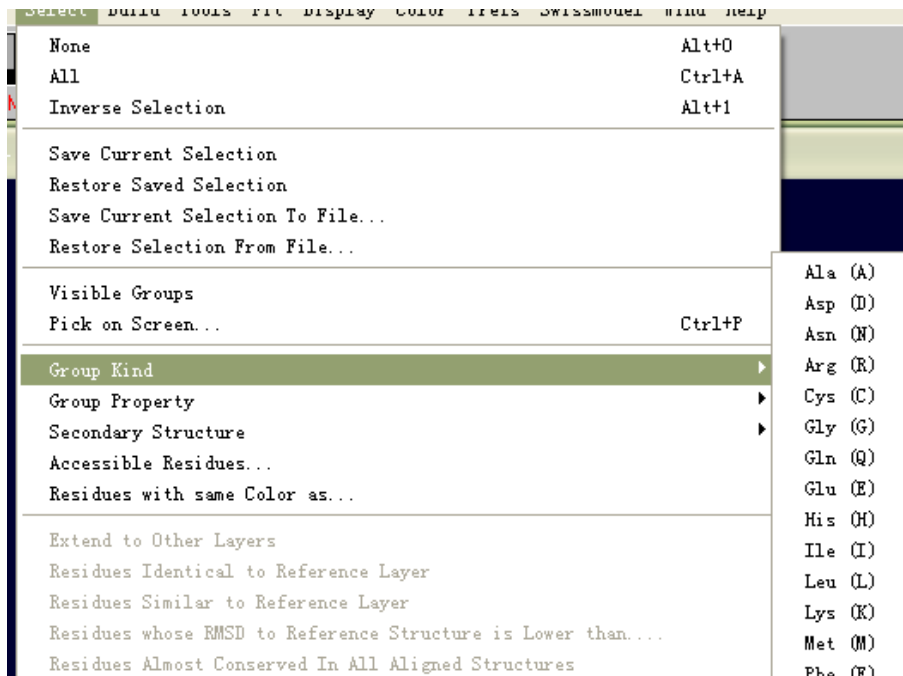
- Display---show H-bonds Distances (或选择Layers Info中的Hdst; 或或Tool--- compute H-bounds)可以显示氢键的键长



# Selecting



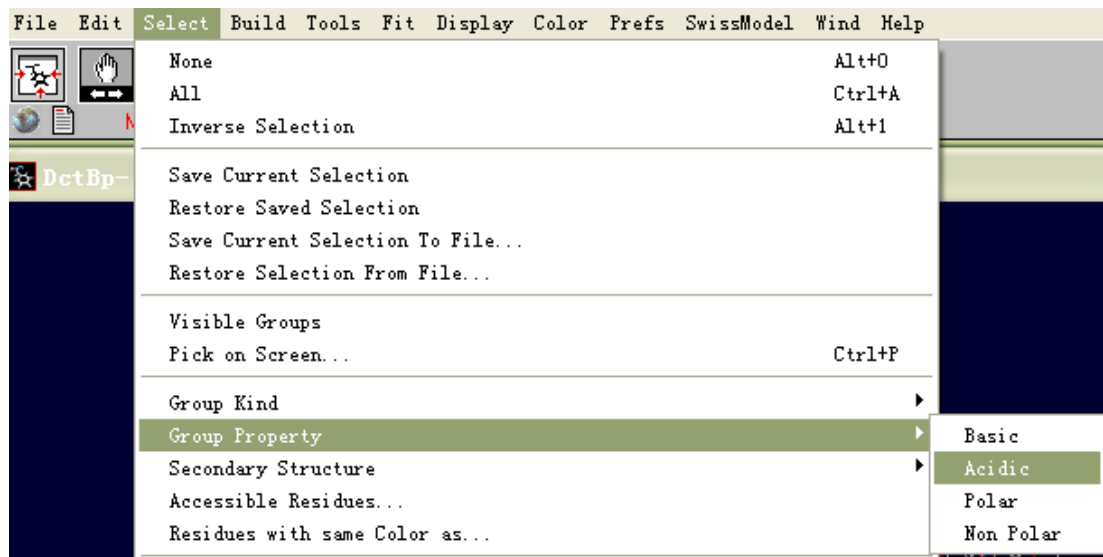
Select-- Group kind: 选择某一种氨基酸，以DctB-apo(PDB: 3E4Q)为例，选择其中的谷氨酰胺（Gln），结果在Control Panel中以红色显示





# Selecting

- **Select-- Group property:** 选择某类氨基酸，分为酸性、碱性、极性、非极性。以DctB-apo(PDB: 3E4Q)为例,选择其中的酸性氨基酸，选出的氨基酸在Control Panel中以红色显示



Control Panel

DotBp- apo

visible ? can move

group + + + + +  
show side label ribbon

A	ALA55	v	v
A	GLY56	v	v
A h	LEU57	v	v
A h	ALA58	v	v
A h	GLY59	v	v
A h	GLN60	v	v
A h	SER61	v	v
A h	ARG62	v	v
A h	ILE63	v	v
A h	<b>ASP64</b>	v	v
A h	ALA65	v	v
A h	SER66	v	v
A h	LEU67	v	v
A h	LYS68	v	v
A h	ALA69	v	v
A h	SER70	v	v
A h	LEU71	v	v
A h	LEU72	v	v
A h	ARG73	v	v
A h	ALA74	v	v
A h	VAL75	v	v
A h	VAL76	v	v
A h	<b>GLU77</b>	v	v
A h	ARG78	v	v
A h	GLN79	v	v
A h	ARG80	v	v



# Selecting



- **Select---inverse select** 反向选择

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

例如，点击了**inverse select** 选项后，原来选中的酸性氨基酸则不被选中，之前没有选中的氨基酸则被选中

# Coloring

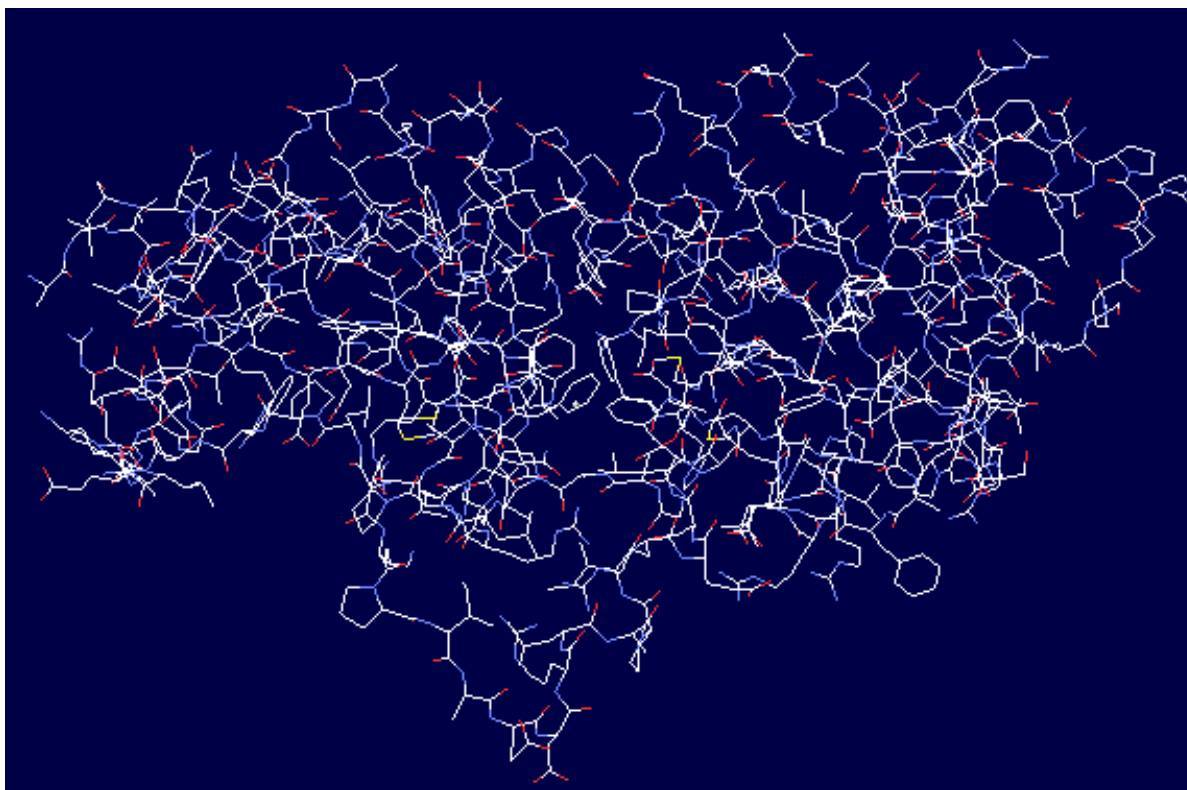


- **Swiss-PdbViewer**提供了多种对模型着色的方式，从而可以更好地观察蛋白结构模型。
- 以DctB-apo(PDB: 3E4Q)为例

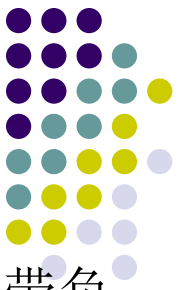


- **Color-----CPK**

- 默认的着色方案。C原子用白色；O原子用红色；N原子用蓝色；S原子用黄色；P原子用橘黄色；H原子用蓝绿色；其他用灰色

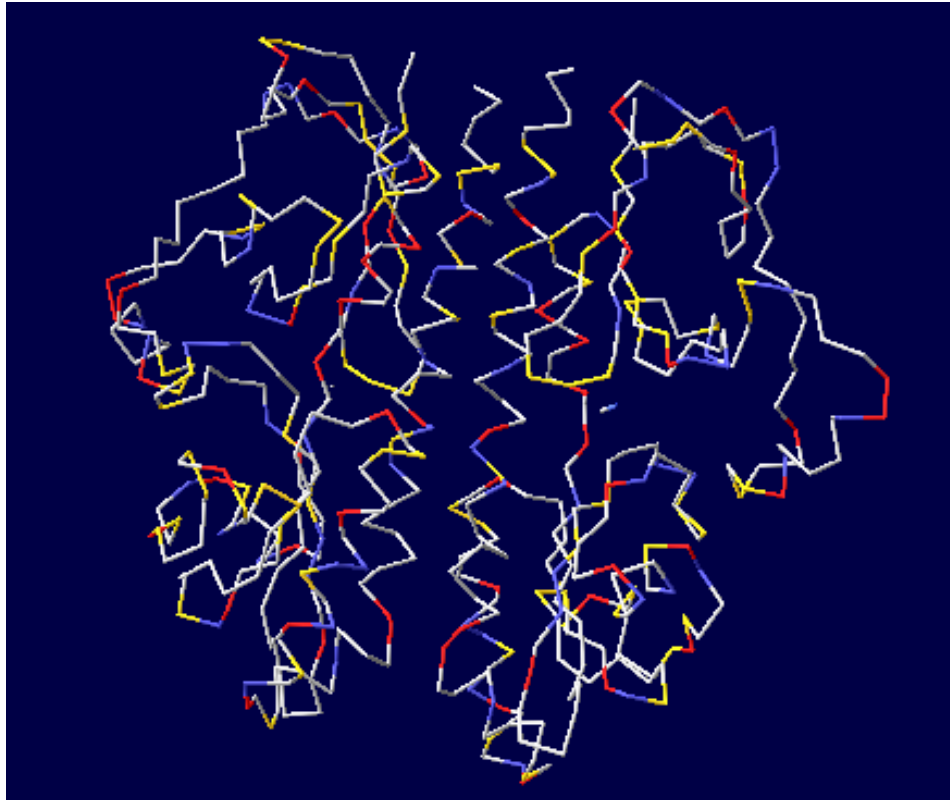


DctB-apo 单体



- **Color-----Type**

根据氨基酸的化学性质来对模型进行着色。带正电的用蓝色；带负电用红色；不带电的用黄色；无极性的用灰色

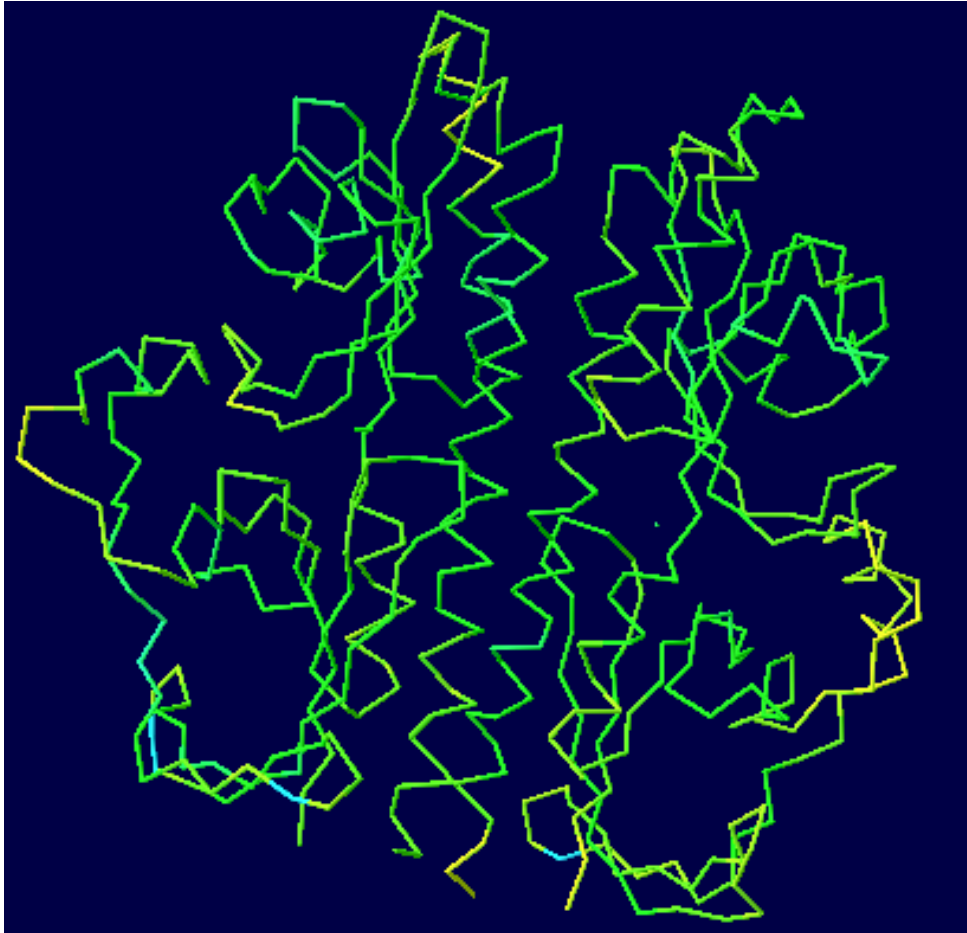


DctB-apo (3E4Q)

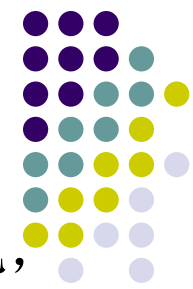


## ● Color----- B-factor

- **B**因子（或称为温度因子）。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）模型中的位置与在其他模型中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。
- 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。



DctB-apo (3E4Q)



# Color----- Secondary structure

将螺旋部分 (**helix**) 标记为红色, 折叠部分(**strands**)标记为黄色, 无规卷曲 (**coil**) 标记为灰色

Residue	Color
B s SER181 v	Yellow
B s ARG182 v	Yellow
B s ARG183 v	Yellow
B s VAL184 v	Yellow
B s ASP185 v	Yellow
B s GLY186 v	Yellow
B PRO187 v	Grey
B s GLY188 v	Yellow
B s GLY189 v	Yellow
B s PRO190 v	Yellow
B s LEU191 v	Yellow
B s GLY192 v	Yellow
B s VAL193 v	Yellow
B s ILE194 v	Yellow
B s VAL195 v	Yellow
B s ALA196 v	Yellow
B s LYS197 v	Yellow
B s LEU198 v	Yellow
B s GLU199 v	Grey
B PHE200 v	Grey
B h ASP201 v	Red
B h GLY202 v	Red
B h VAL203 v	Red
B h GLU204 v	Red
B h ALA205 v	Red
B h ASP206 v	Red
B h TRP207 v	Red
B h GLN208 v	Red
B h ALA209 v	Red
B s SER210 v	Grey
B s GLY211 v	Yellow
B s LYS212 v	Grey
B s PRO213 v	Grey
B s ALA214 v	Yellow

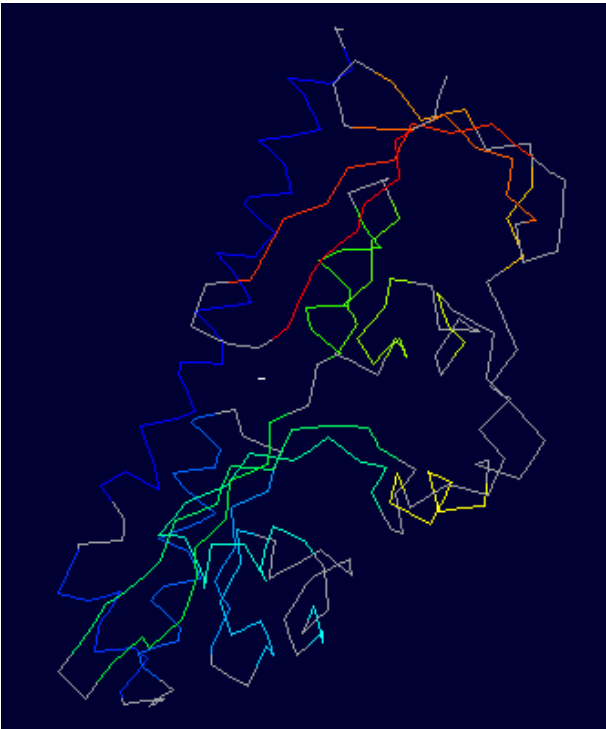
DctB-apo (3E4Q)





# ● Color--- Secondary Structure Succession

将整个序列的每个二级结构用不同的颜色显示出来，第一个二级结构用蓝色，最后一个用红色，中间的二级结构用在可见光谱（**400nm-700nm**）的各种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。

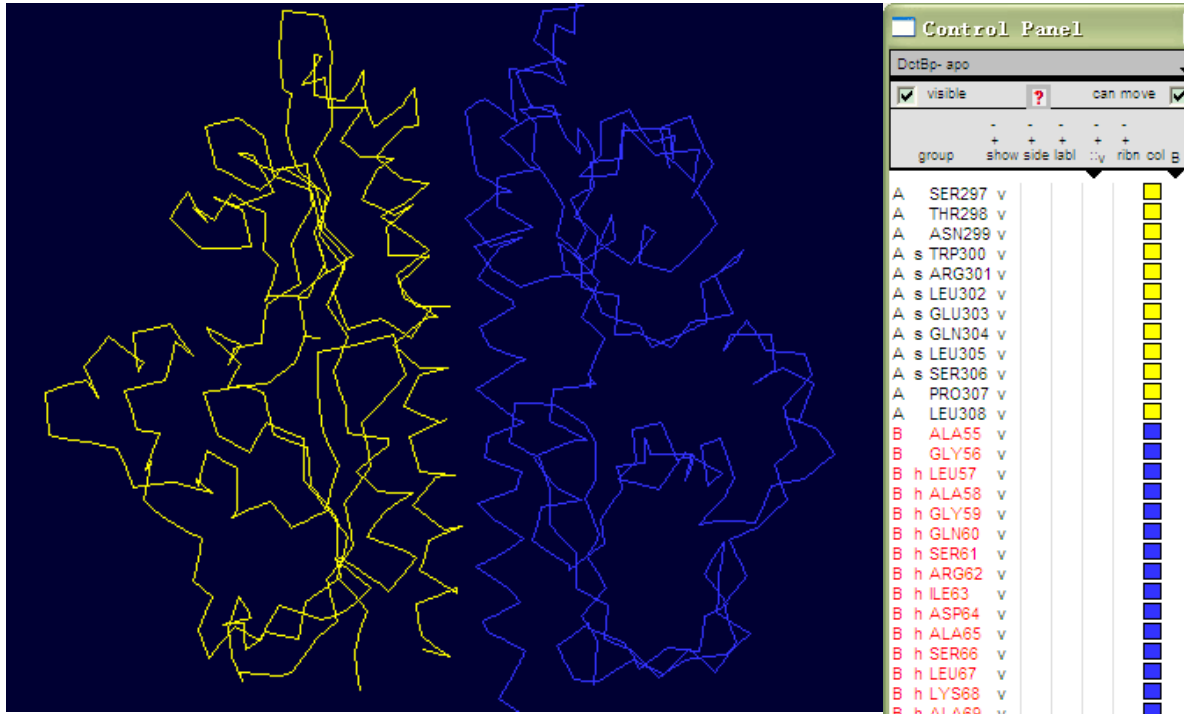


Control Panel	
DotB-App A	
<input checked="" type="checkbox"/> visible	<input checked="" type="checkbox"/> can move
group	show side label
A GLY211 v	<input type="checkbox"/>
A LYS212 v	<input type="checkbox"/>
A s PRO213 v	<input type="checkbox"/>
A s ALA214 v	<input type="checkbox"/>
A s TYR215 v	<input type="checkbox"/>
A s VAL216 v	<input type="checkbox"/>
A s THR217 v	<input type="checkbox"/>
A s ASP218 v	<input type="checkbox"/>
A ARG219 v	<input type="checkbox"/>
A ARG220 v	<input type="checkbox"/>
A s GLY221 v	<input type="checkbox"/>
A s ILE222 v	<input type="checkbox"/>
A s VAL223 v	<input type="checkbox"/>
A s LEU224 v	<input type="checkbox"/>
A s ILE225 v	<input type="checkbox"/>
A s THR226 v	<input type="checkbox"/>
A s SER227 v	<input type="checkbox"/>
A LEU228 v	<input type="checkbox"/>
A PRO229 v	<input type="checkbox"/>
A SER230 v	<input type="checkbox"/>
A TRP231 v	<input type="checkbox"/>
A ARG232 v	<input type="checkbox"/>
A PHE233 v	<input type="checkbox"/>
A s MET234 v	<input type="checkbox"/>
A s THR235 v	<input type="checkbox"/>
A s THR236 v	<input type="checkbox"/>
A LYS237 v	<input type="checkbox"/>
A PRO238 v	<input type="checkbox"/>
A ILE239 v	<input type="checkbox"/>
A ALA240 v	<input type="checkbox"/>
A GLU241 v	<input type="checkbox"/>
A ASP242 v	<input type="checkbox"/>
A ARG243 v	<input type="checkbox"/>
A LEU244 v	<input type="checkbox"/>



## ● Color---chain

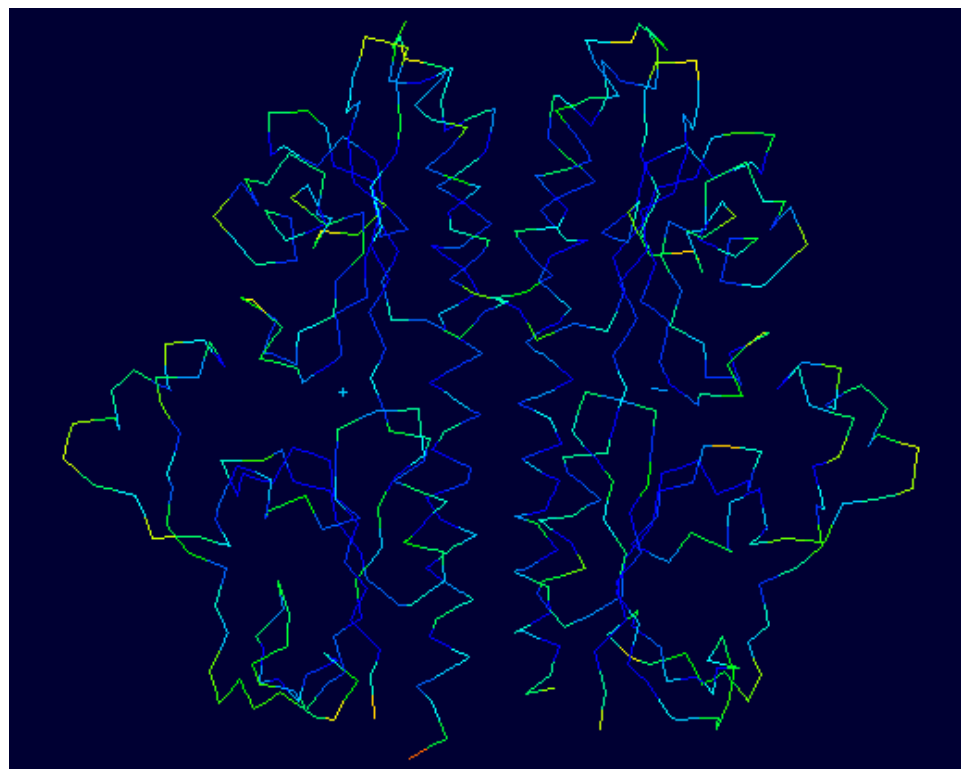
不同的链用不同的颜色显示，例如DctB-apo (3E4Q)中有A链和B链。黄色的表示A链，蓝色的表示B链





# ● Color-----Accessibility

- 根据结构中每个氨基酸残基与周围溶剂接触的程度来着色。与溶剂接触最少的用蓝色；完全露在分子表面的用红色；接触介于两者之间的，分别介于蓝色和红色中间的颜色表示。





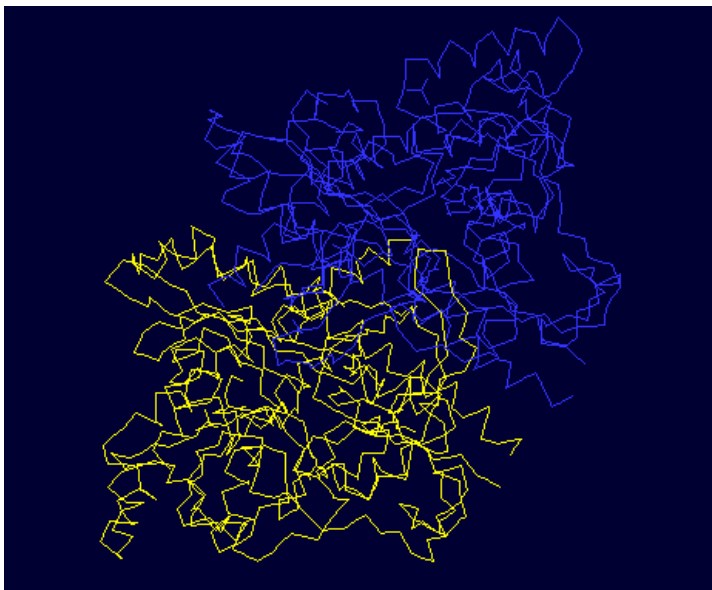
# Fitting

- Fit----Magic fit

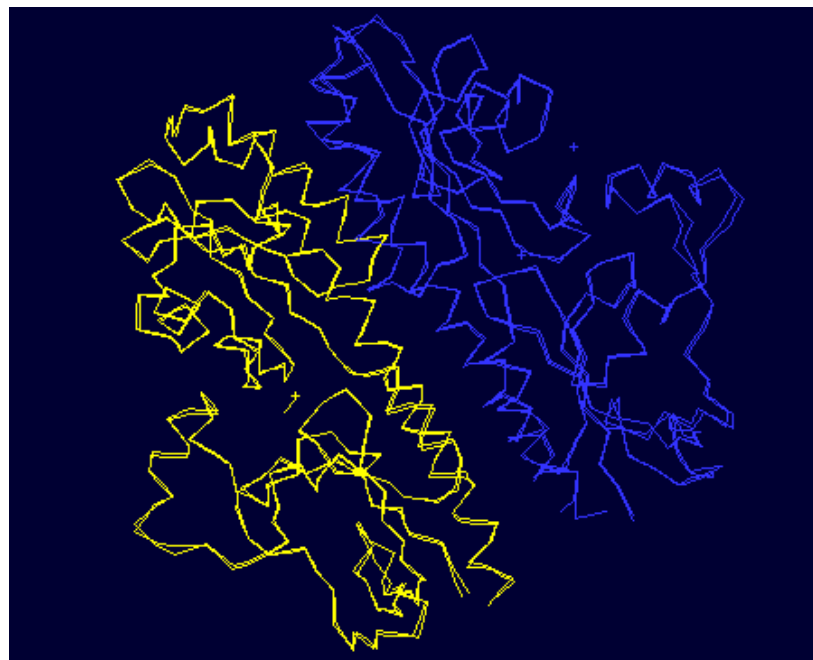
对两个蛋白结构模型进行叠合，比较两者之间的差异。然后通过 Fit----Calculate RMSD，可以计算两个结构叠合后的均方根误差。RMS值越小，则结构叠合得越好。

以DctBp结合和不结合信号分子的结构差异为例。DctBp-apo(3E4Q) 为不结合信号分子的DctBp； DctBp-malonate(3E4P) 为结合丙二酸的DctBp； DctBp- succinate(3E4O)为结合琥珀酸的DctBp。其中琥珀酸是DctB能识别的信号分子，而丙二酸不是。

3E4Q和3E4O比较结果， RMS: 28.12



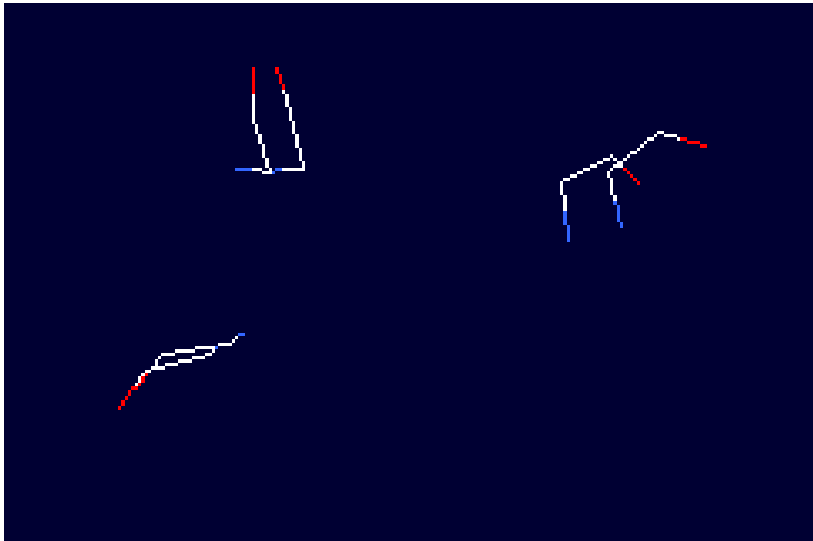
3E4P和3E4Q比较结果， RMS: 0.45





- **Fit---- Fit molecules(from selection)**

对选中的部分残基进行结构叠合。



癌胚抗原CEAM5 (2QSQ) A链和免疫球蛋白抗体分子高可变结构域 (1REI) A链中三对二硫键进行结构叠合



谢谢大家！