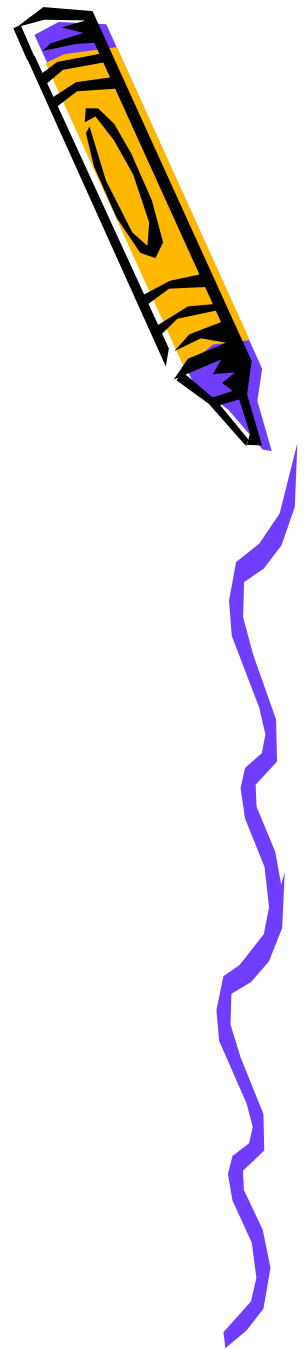


Swiss-PdbViewer

A Guide for Users of
Macromolecular Models

李伟 范晓娟 葛红云 刘钰莹 孟画诗

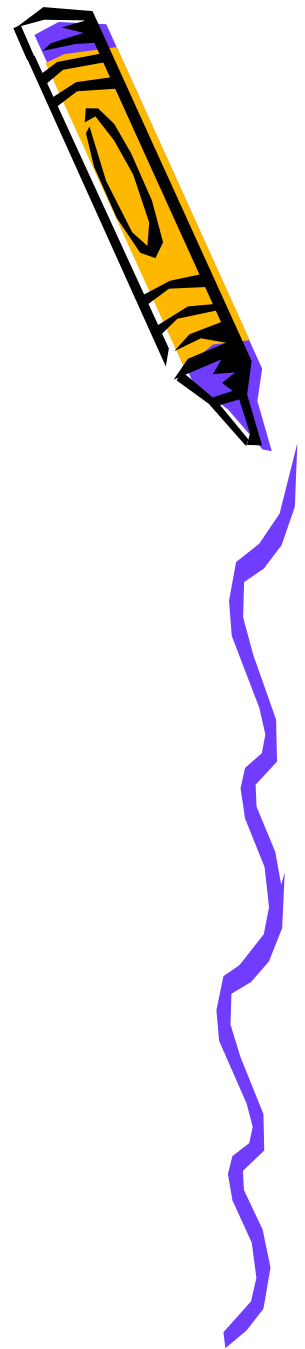




- 1. Get Started
- 2. Windows and help
- 3. Manipulating the Model
- 4. Selecting and Displaying
- 5. Color
- 6. Measuring and Labeling



- 7. Mutating and Changing Side-Chain Conformations
- 8. Ramachandran Plot
- 9. Working with Oligomeric Proteins
- 10. Comparing Proteins: Hemoglobins

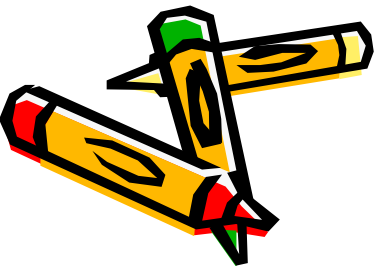


1. Get Started

- 首先下载并安装SPDB-Viewer软件.
- 进入PDB主页

<http://www.rcsb.org/pdb/cgi/explore.cgi?>,
以斑头雁血红蛋白1A4F的3D结构为例，输入
1A4F, 点击site search，就会出现以下界面。

- 点击download图标，下载1a4f.pdb文件到电脑上。



Are you missing data updates? The PDB archive has moved to <ftp://ftp.wwpdb.org>.
For more information click [here](#).

[Help](#) [Structure Summary](#) [Biology & Chemistry](#) [Materials & Methods](#) [Sequence Details](#) [Geometry](#)

1a4f

DOI [10.2210/pdb1a4f/pdb](https://doi.org/10.2210/pdb1a4f/pdb)

Red - Derived information

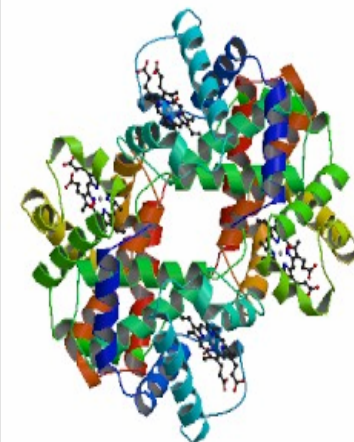
Title BAR-HEADED GOOSE HEMOGLOBIN (OXY FORM)**Authors** Zhang, J., Gu, X.

Primary Citation Zhang, J., Hua, Z., Tame, J.R., Lu, G., Zhang, R., Gu, X. (1996) The crystal structure of a high oxygen affinity species of haemoglobin (bar-headed goose haemoglobin in the oxy form). *J.Mol.Biol.* 255: 484-493

[\[Abstract\]](#) **History** Deposition 1998-01-29 Release 1998-04-29**Experimental Method** Type X-RAY DIFFRACTION Data N/A

Parameters	Resolution[Å]	R-Value	R-Free	Space Group
	2.00	0.198 (work)	n/a	P 4 ₂ 2 ₁ 2

Images and Visualization

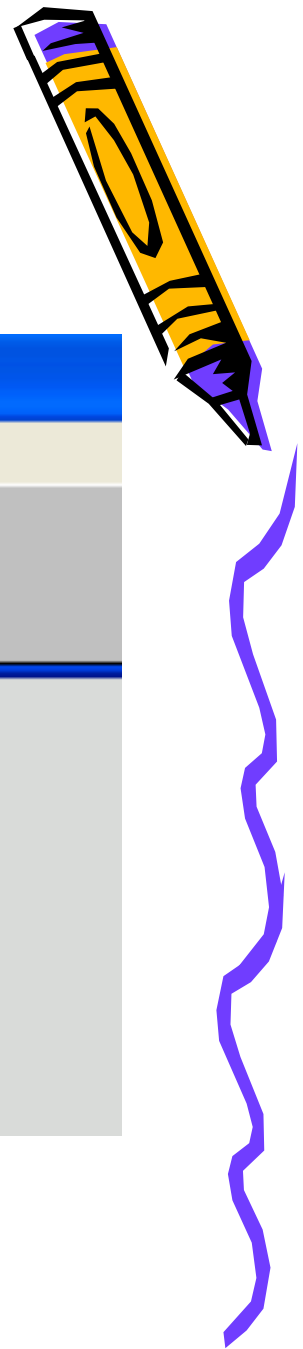
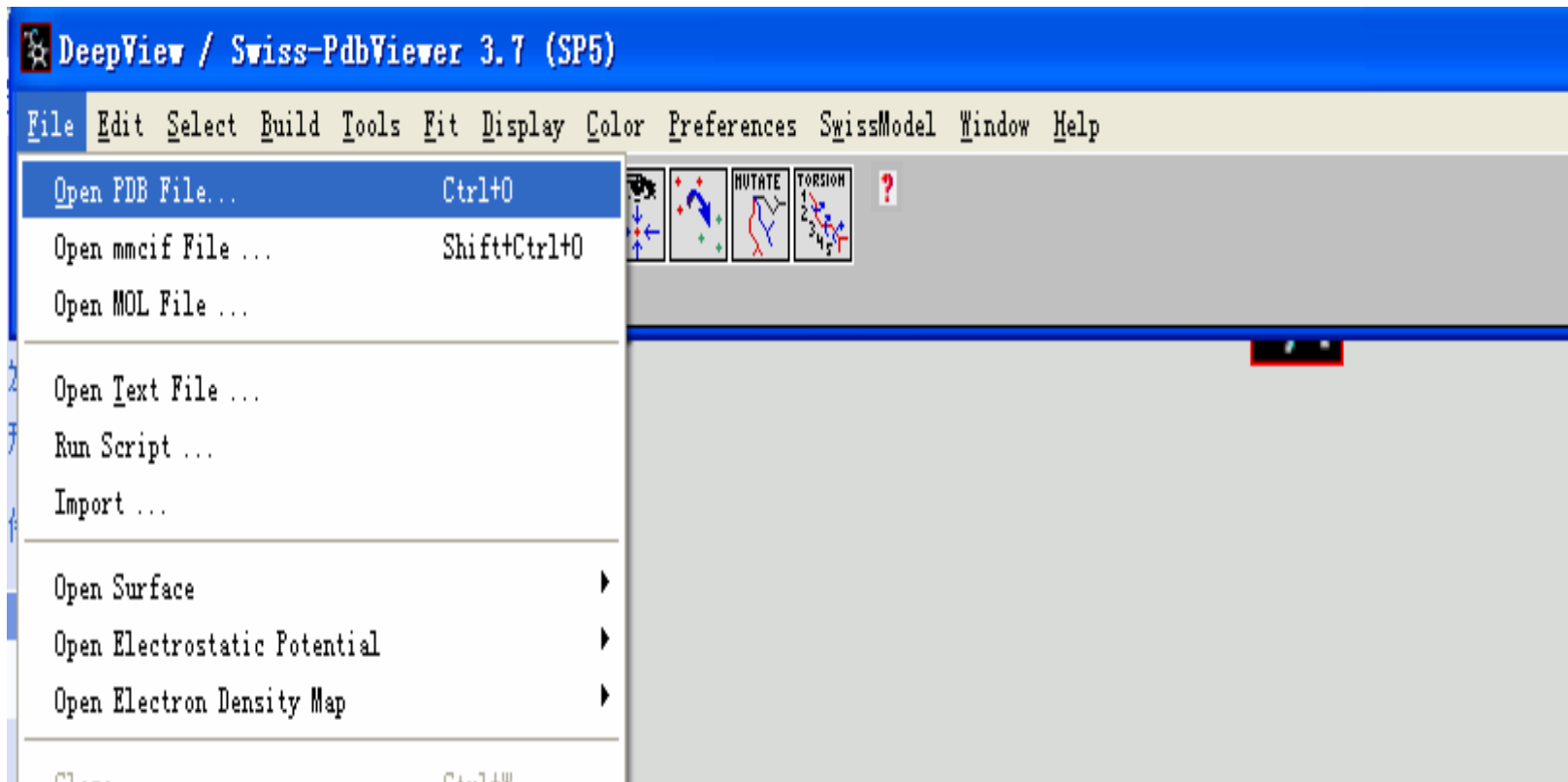


Display Options

[KiNG](#)[Jmol](#)[WebMol](#)[MBT SimpleViewer*](#)[MBT Protein Workshop](#)[QuickPDB](#)

When exploring a structure, select *Structure Analysis* and then *Geometry* from the left menu to view a Ramachandran Plot.

- 打开PDB-Viewer软件，
点击file→open PDB file



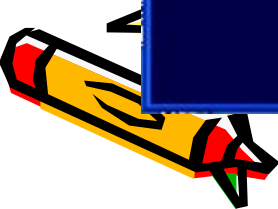
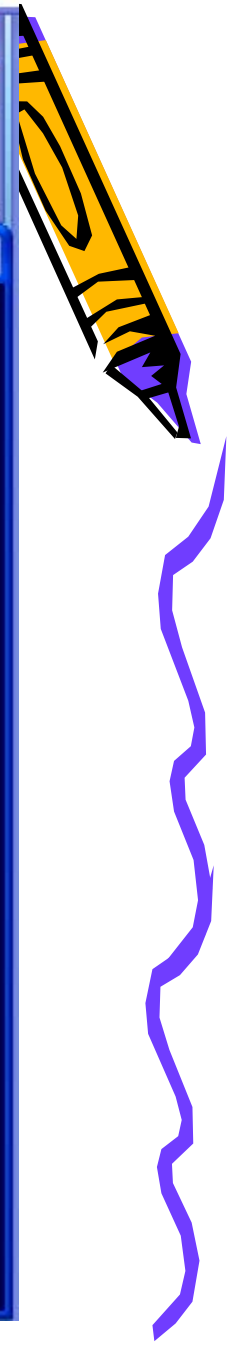
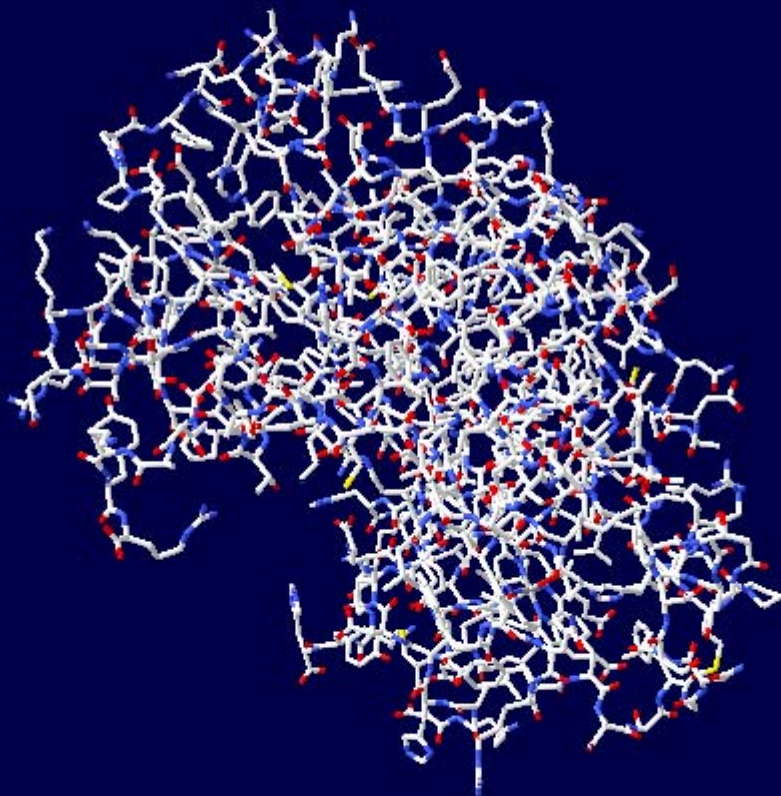
Swiss PDB Viewer 3.7 (b2)

文件 编辑 选择 建立 工具 装配 显示 颜色 参数选择 SwissModel (SWISS-PROT模型) 窗口 帮助



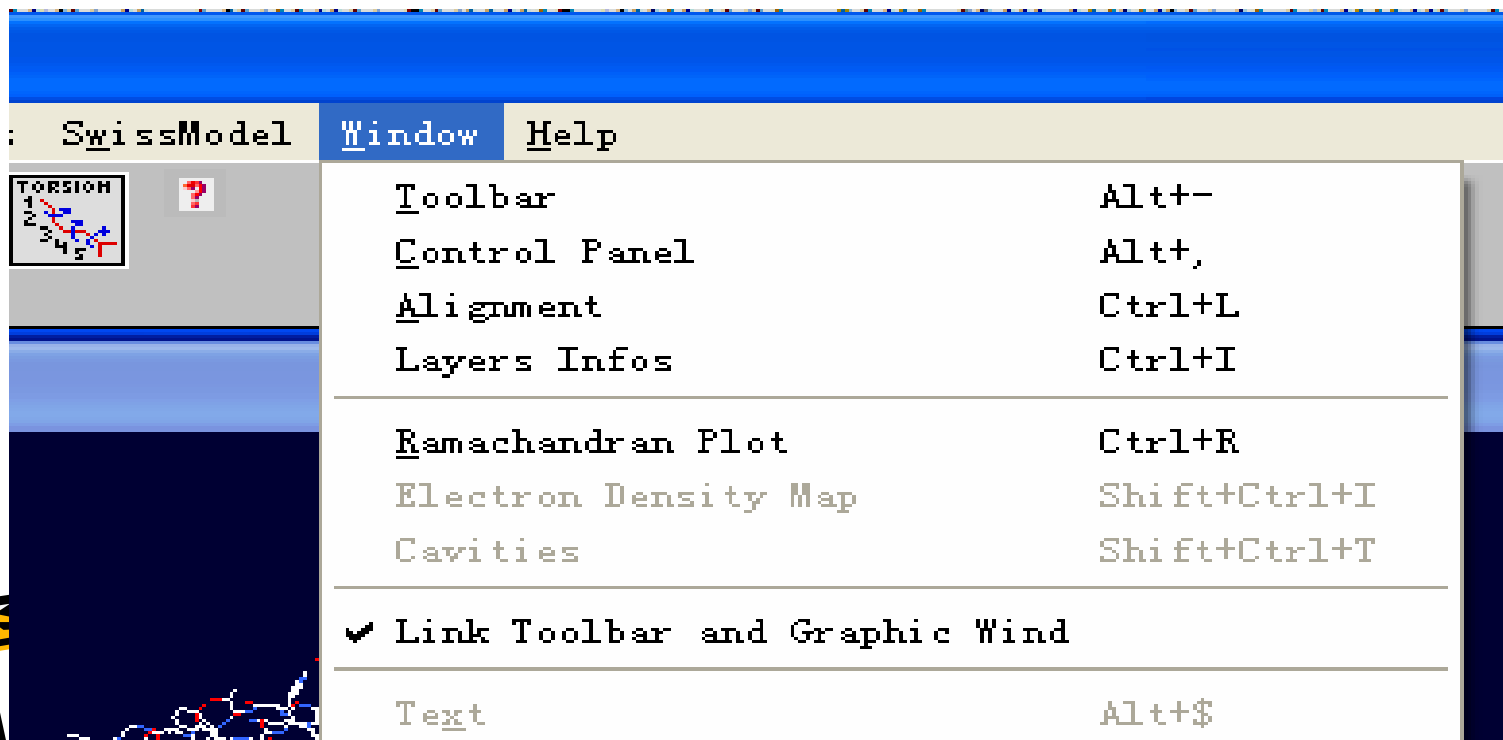
Move All

1A4F (764 x 513)

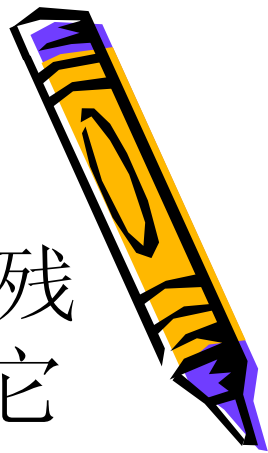


2.Windows and help

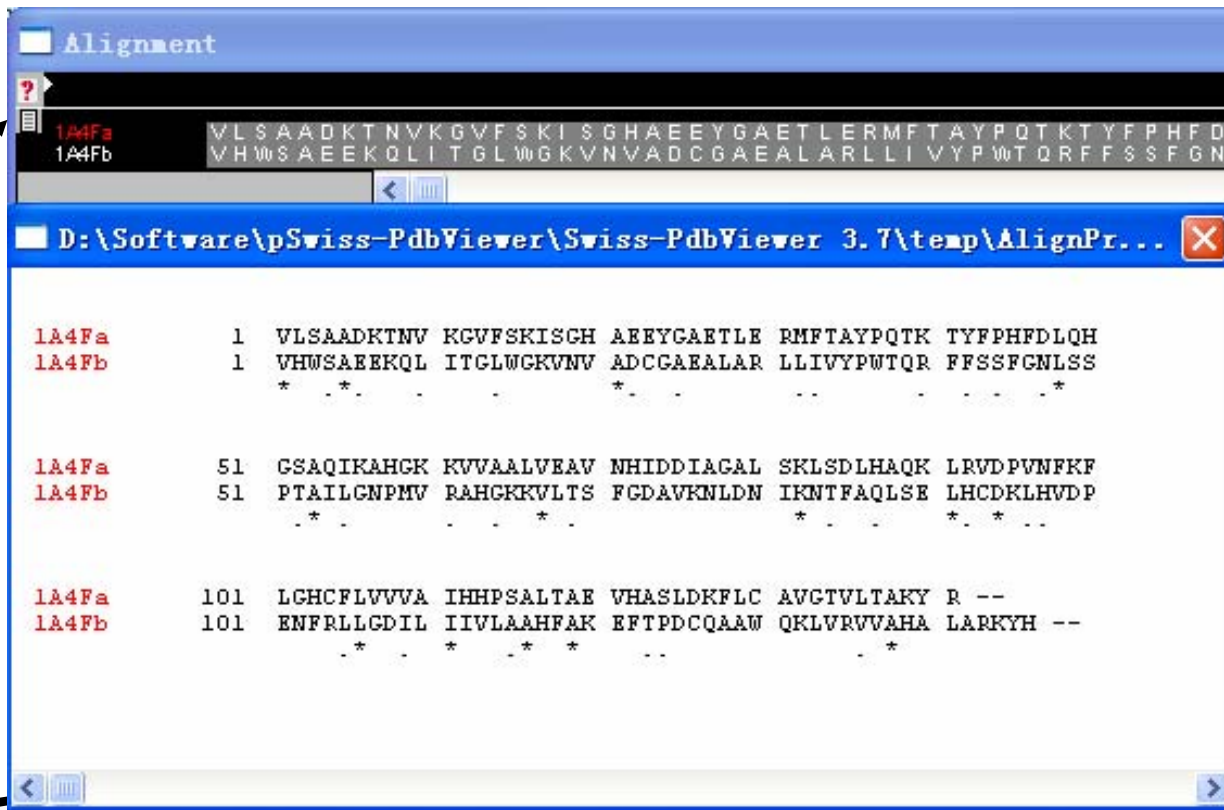
- 注意对话框上面的文字工具栏，其中 **windows** 选项卡下面有如下内容



- **Control panel** 显示3D结构的氨基酸残基和PDB文件的内容。我们可以利用它来选择残基、标记残基、确定展示的内容和对残基进行染色。
- **Tool bar** 位于图形窗口上面，我们可以利用**tool bar**来观看、操纵和测量模型。

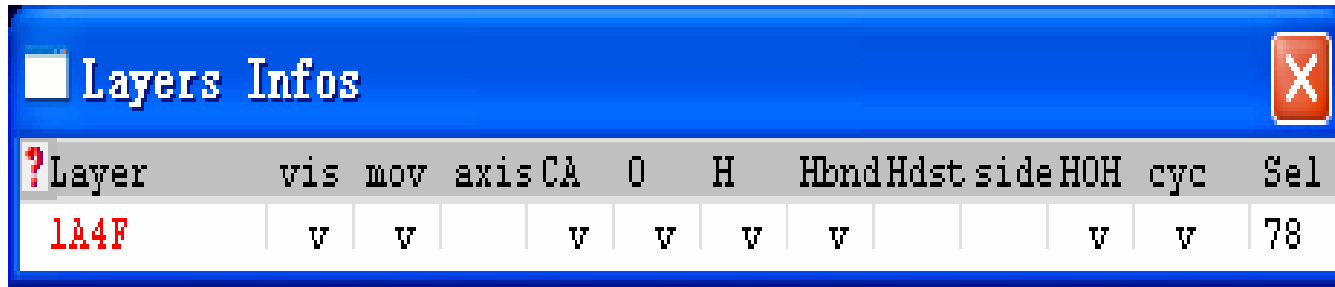


- **Window → Alignment** 可以提供序列比对功能，当点击时会在图形对话框下面出现条状对话框，里面显示了蛋白序列，如果输入两个序列，点击最左面的文档样小方框，就会把序列比对的详细信息列出



- **Wind: Layer Infos**

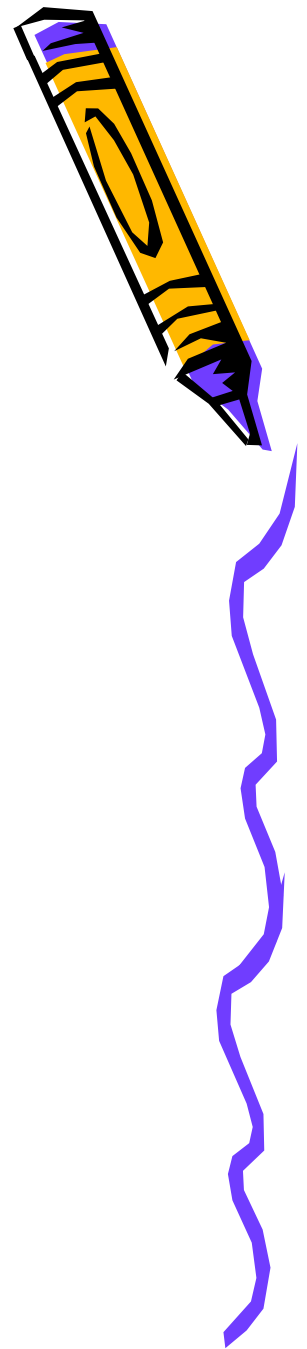
图层信息窗口，让你能够方便地控制显示和性能的多层。如下图所示



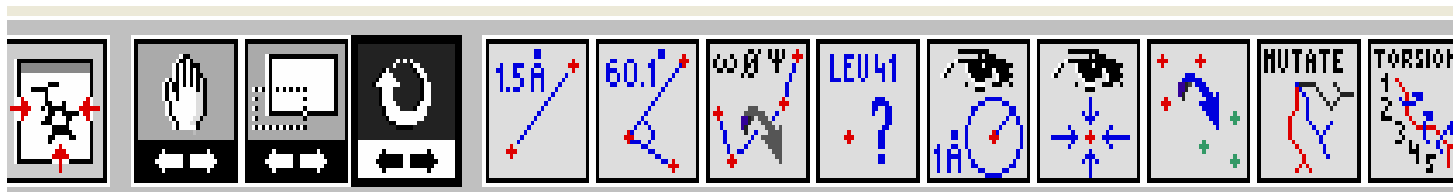
?Layer	vis	mov	axis	CA	O	H	Hbnd	Hd	st	side	HOH	cyc	Sel
1A4F	v	v		v	v	v	v				v	v	78





- 其中 **mov** 控制图形的运动， **axis** 表示坐标轴， **CA** 控制是否只显示主链 **C** 原子， **O** 和 **H** 控制是否显示这两种原子， **Hbnd** 控制是否显示 **H**-键， **HOH** 表示水分子或者是溶剂， **sel** 表示选择的残基数。

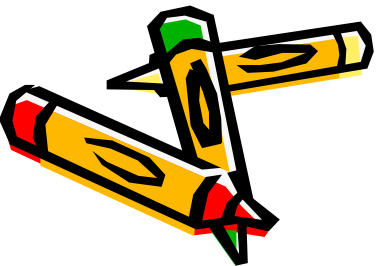


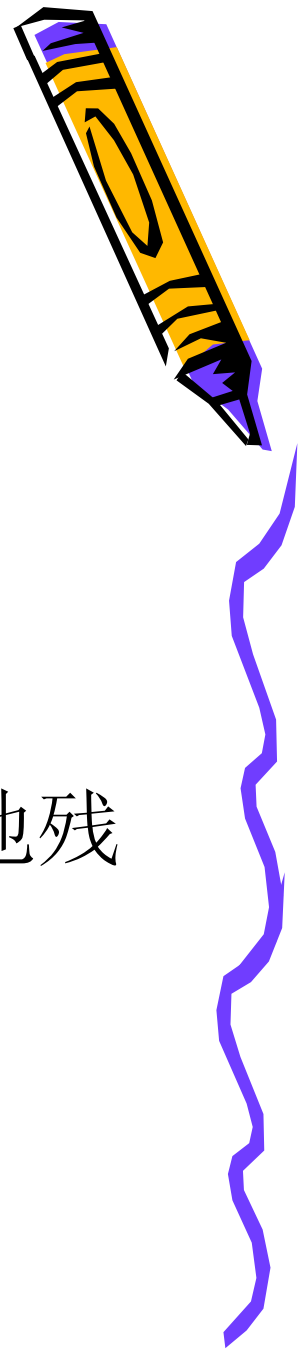








3. Manipulating the Model

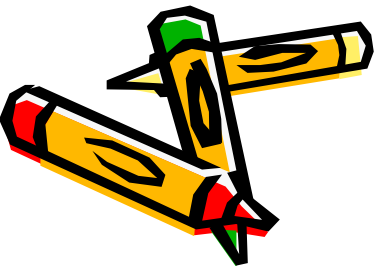


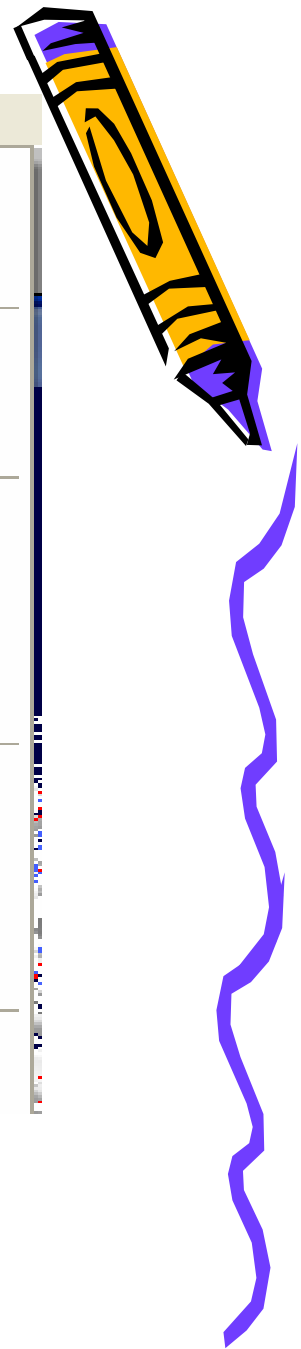
-  可以显示模型的一般页面
-  可以平移模型
-  放大缩小所选模型
-  可以使模型进行旋转





-  测量两个原子之间的距离
-  测量测量三个点之间的角度
-  测量两个残基之间的二面角
-  点击可以知道该残基的一般信息
-  得到距离中心原子几埃之类的其他残基或原子
-  将所选原子处于窗口的中心位置





<u>D</u> isplay	<u>C</u> olor	<u>P</u> references	<u>S</u> wissModel	<u>W</u> indow	<u>H</u> elp
Views					▼
View <u>F</u> rom					▼
Label <u>K</u> ind					▼
<u>S</u> lab				Alt+/ Ctrl+T	
<u>S</u> tereo View					
Show Axis					
Show CA <u>T</u> race Only					
<input checked="" type="checkbox"/> Show Backbone <u>O</u> xygens					
Show <u>S</u> idechains even when Backbone is Hidden					
<input checked="" type="checkbox"/> Show <u>D</u> ots Surface					
Show Forces					
<input checked="" type="checkbox"/> Show <u>H</u> ydrogens				Ctrl+H	
<input checked="" type="checkbox"/> Show H- <u>b</u> onds				Ctrl+B	
Show H-bonds <u>d</u> istances					
Show <u>O</u> nly H-bonds from selection					
Show <u>O</u> nly groups with <u>v</u> isible H-bonds					
<input checked="" type="checkbox"/> Use Open <u>G</u> L Rendering				Shift+Ctrl+3	
Render in solid <u>3</u> D				Ctrl+3	





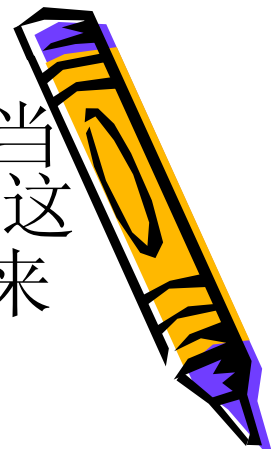
- 是将一个分子叠加到另一个分子上（仅仅当有两个或更多的分子被下载时可以利用），在这种情况下，你可以点击三个相应的分子中原子来叠加。



- 是突变按钮，使用它时，单击一个原子，然后将它变为你想变为的其他原子。



- 是扭曲工具，这个可以旋转侧链原子；首先单击这个按钮，然后挑选任何你想要修饰的氨基酸，通过按住从**1到5**的一个关键点任何侧链键可以被旋转，这是当你在左右点击和移动鼠标的时候。



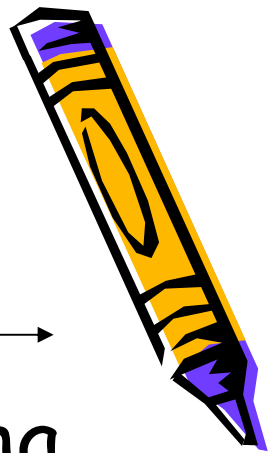


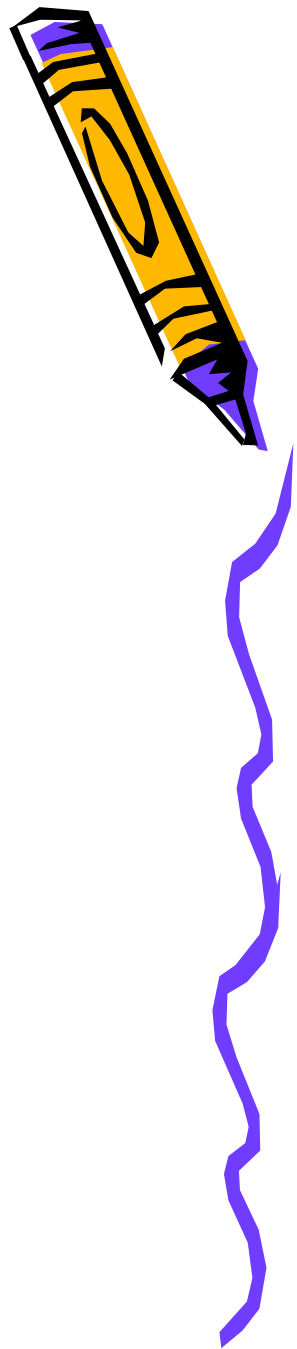
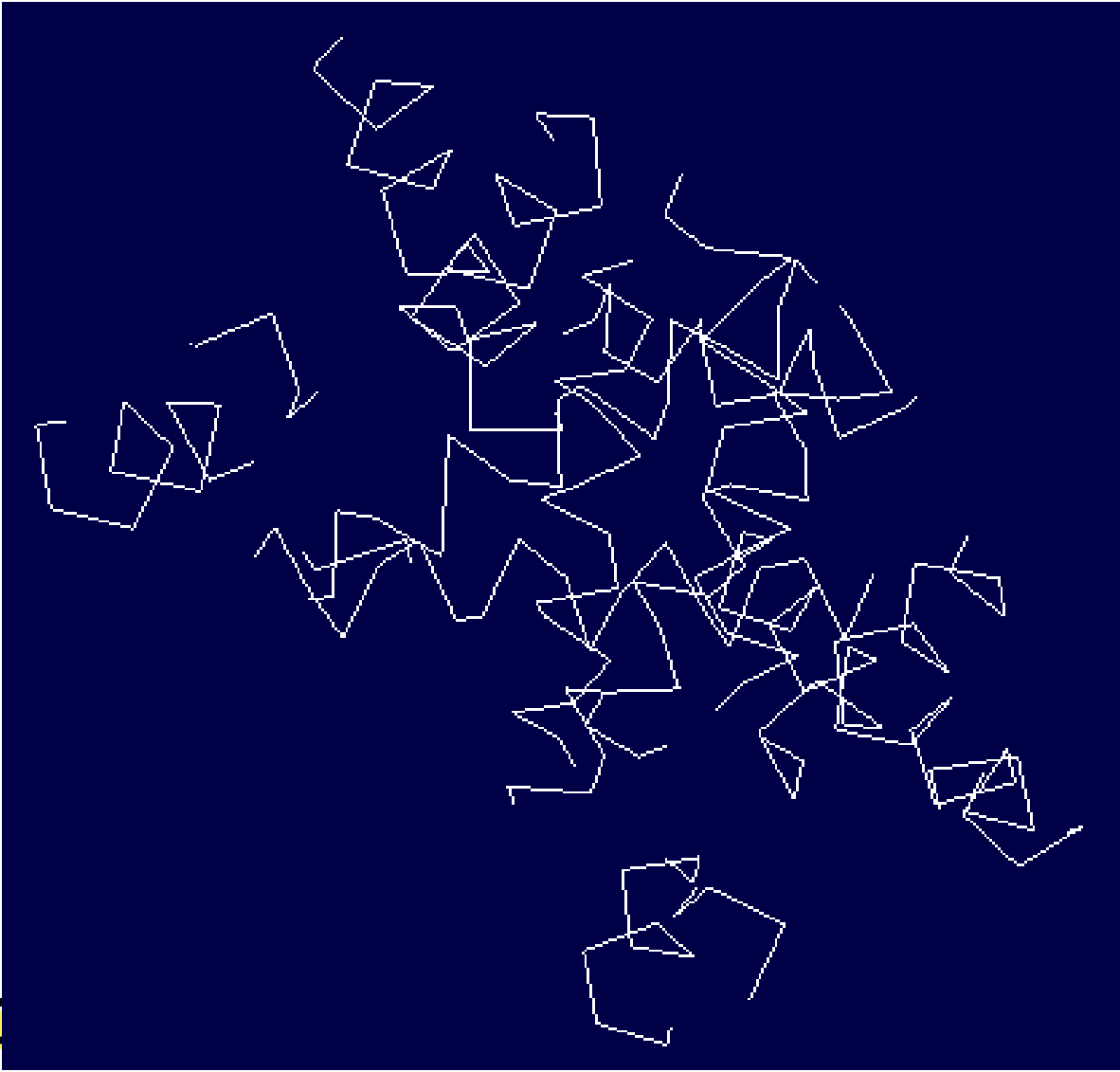
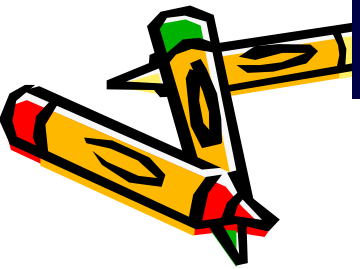
4. Selecting and Displaying

- 在**control panel**中选择一个残基，然后拖动鼠标至要选择的范围松开鼠标，就会发现被选择的部分变成红色，接下来的操作只针对这些残基。**Side**会显示侧链，**label**会显示残基名称，**surface**会以点的形式显示蛋白表面。
- 在**tools**下拉框中选择**Compute H Bonds**，**H键**会以绿色的形式显示出来。

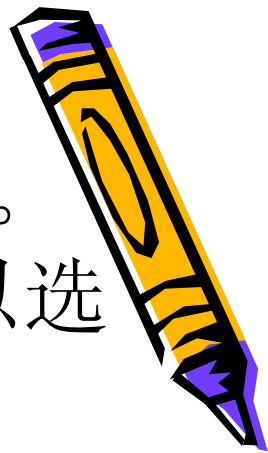
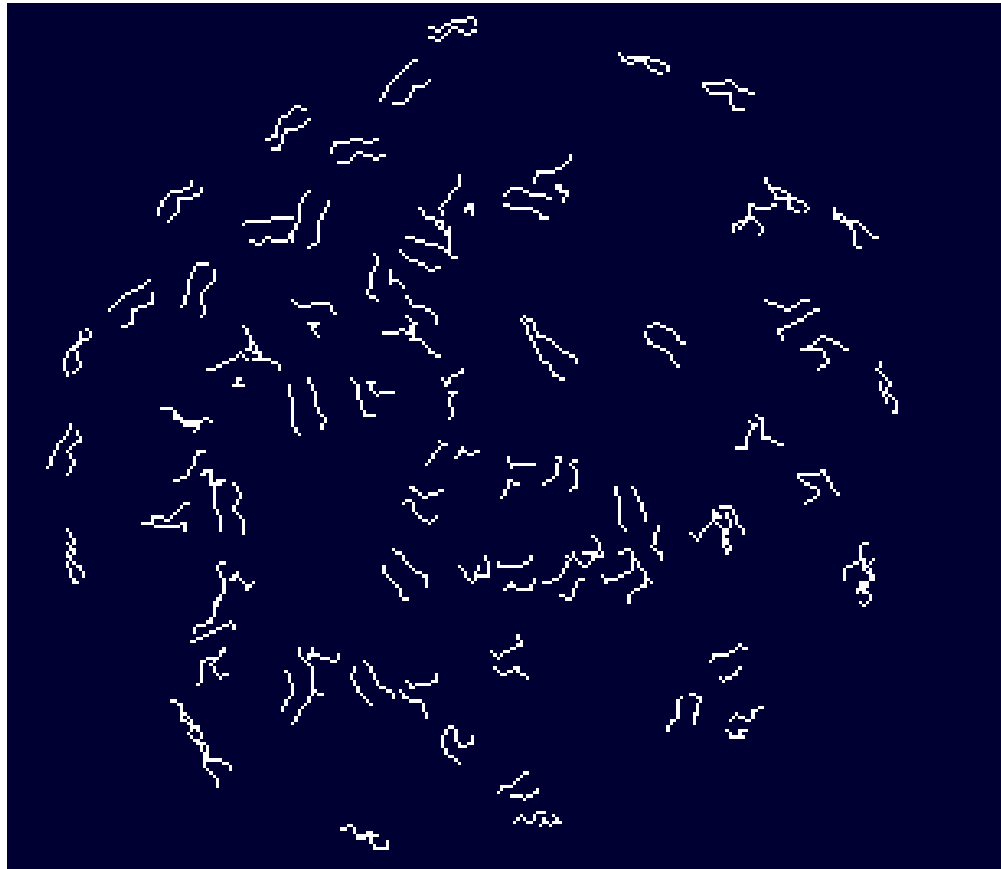


- **Select** → **Secondary Structure** → **Helices**, 我们将会只看到蛋白的alpha螺旋区域在**control bar**中去掉侧链 (**side**)，在**layer info**中选择**CA**，确定看到的只是alpha螺旋。以斑头雁血红蛋白**1A4H**为例，所得到的结构如下图所示:

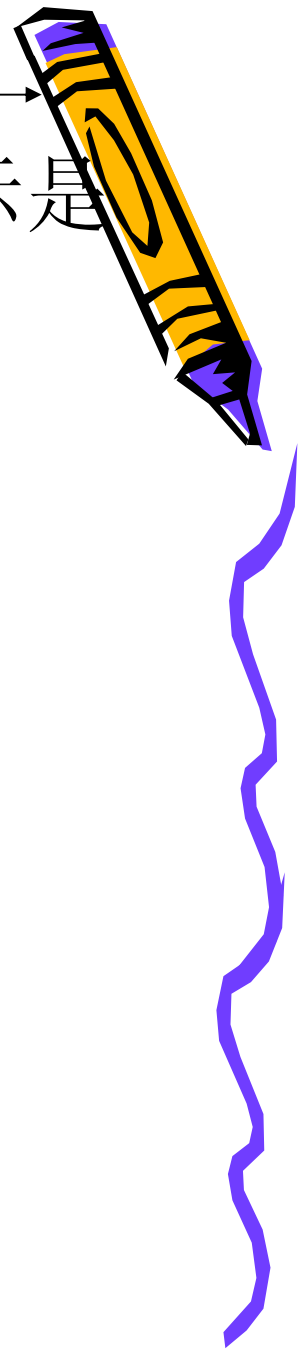
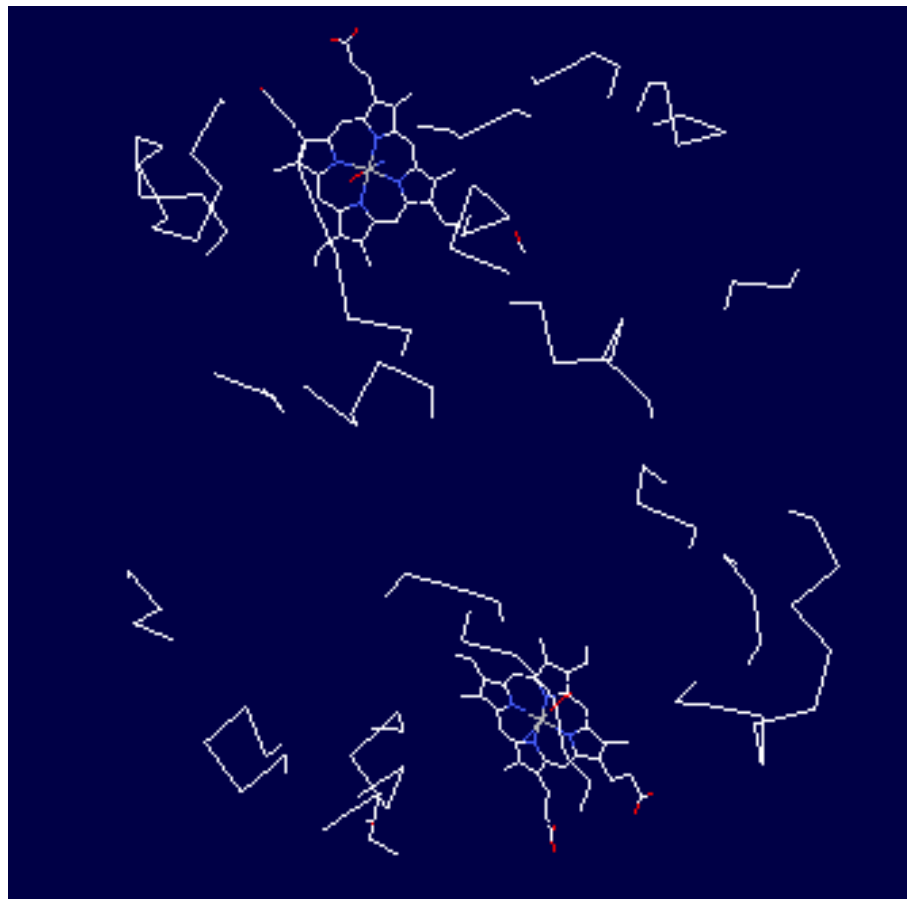




- Select → Secondary Structure → Strands, 我们会只看到beta折叠片。由于在1A4F结构中没有折叠片, 所以选择了一个模型演示一下, 如下图



- 在select → Secondary Structure → coils, 就会显示无规卷曲, 如下图所示是1A4H里的无规卷曲。



- **Display**下选择 **Show H Bonds** 会显示H键，再点第二次，H键去除。
- **Layer infos**窗口包含显示图形的状态信息。最右侧的**Sel**的数字表示所选的基团数目



? Layer	vis	mov	axis	CA	O	H	Hbnd	Hd	dst	side	HOH	cyc	Sel
2GTT N pro	v	v	v	v	v	v					v	v	454



5 . Color

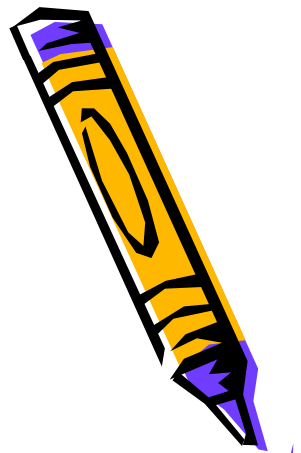
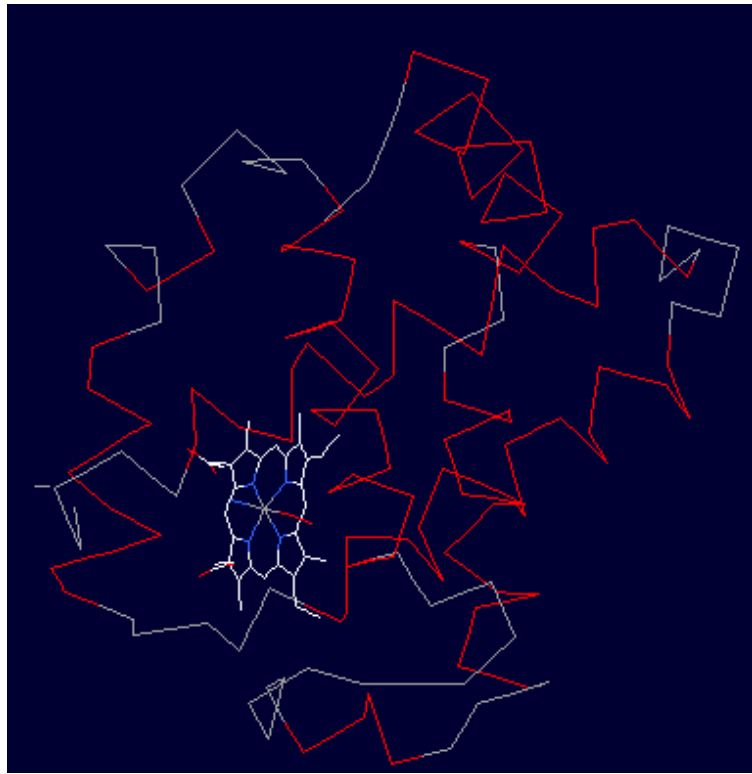


Deep View (Swiss-PdbViewer)可以将模型用不同的颜色区来显示，可以生动形象的展示分子的结构、化学、相关的特征。

Color: Secondary Structure

Deep View 可螺旋标记为红色，折叠标记为黄色，其他的二级结构标记为灰色。





在图中，血红蛋白的螺旋用红色显示了，其余的无规则卷曲用灰色表示，同时也在**control panel**窗口的右侧一列小方格以红色标记构成螺旋的氨基酸残基。

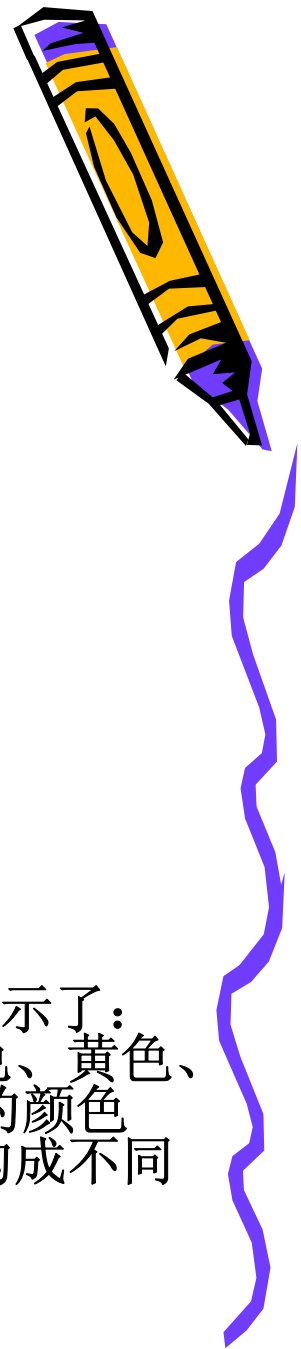
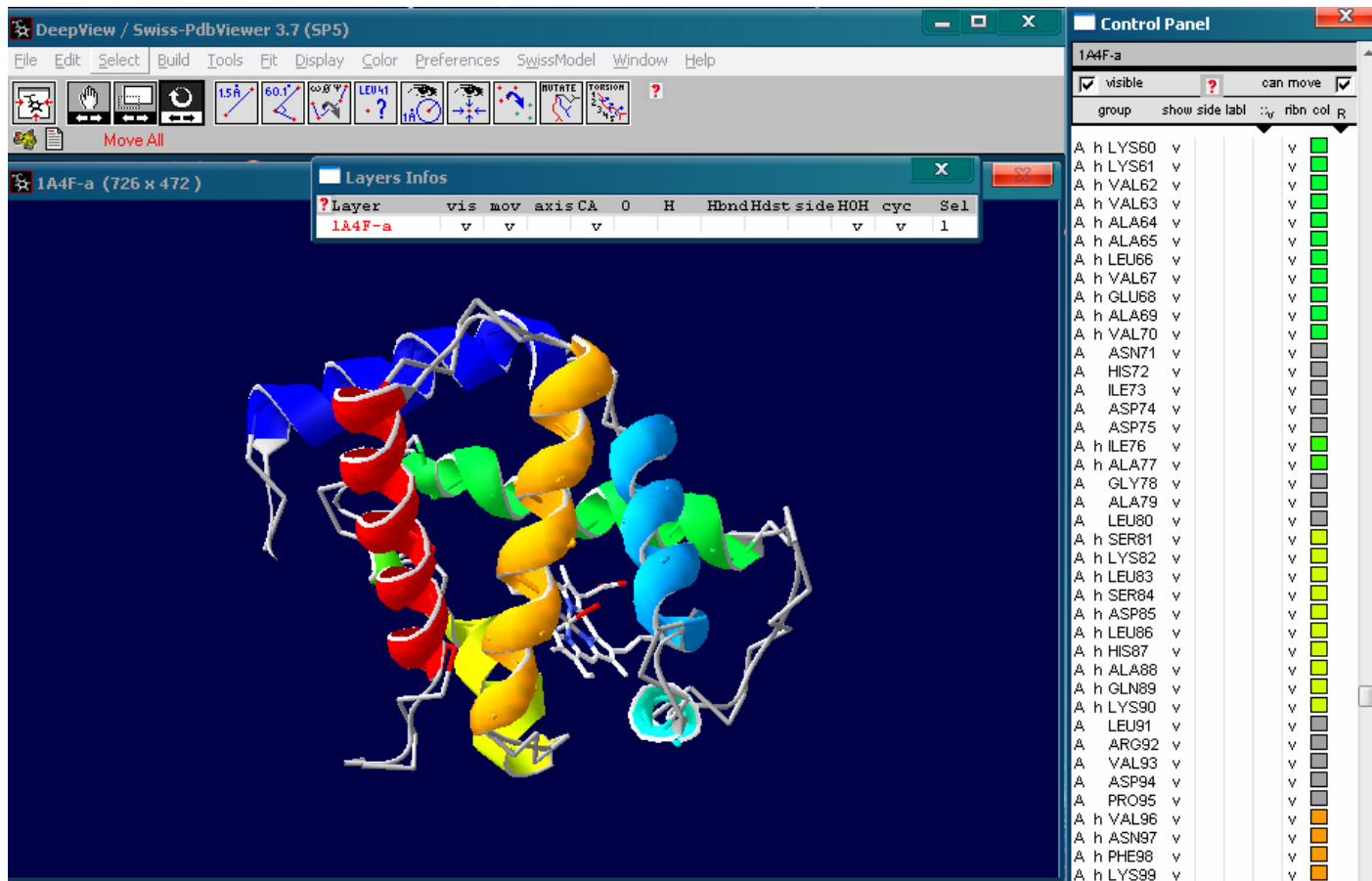


Color: Secondary Structure Succession



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，第一个二级结构用紫色，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二级结构间的顺序。

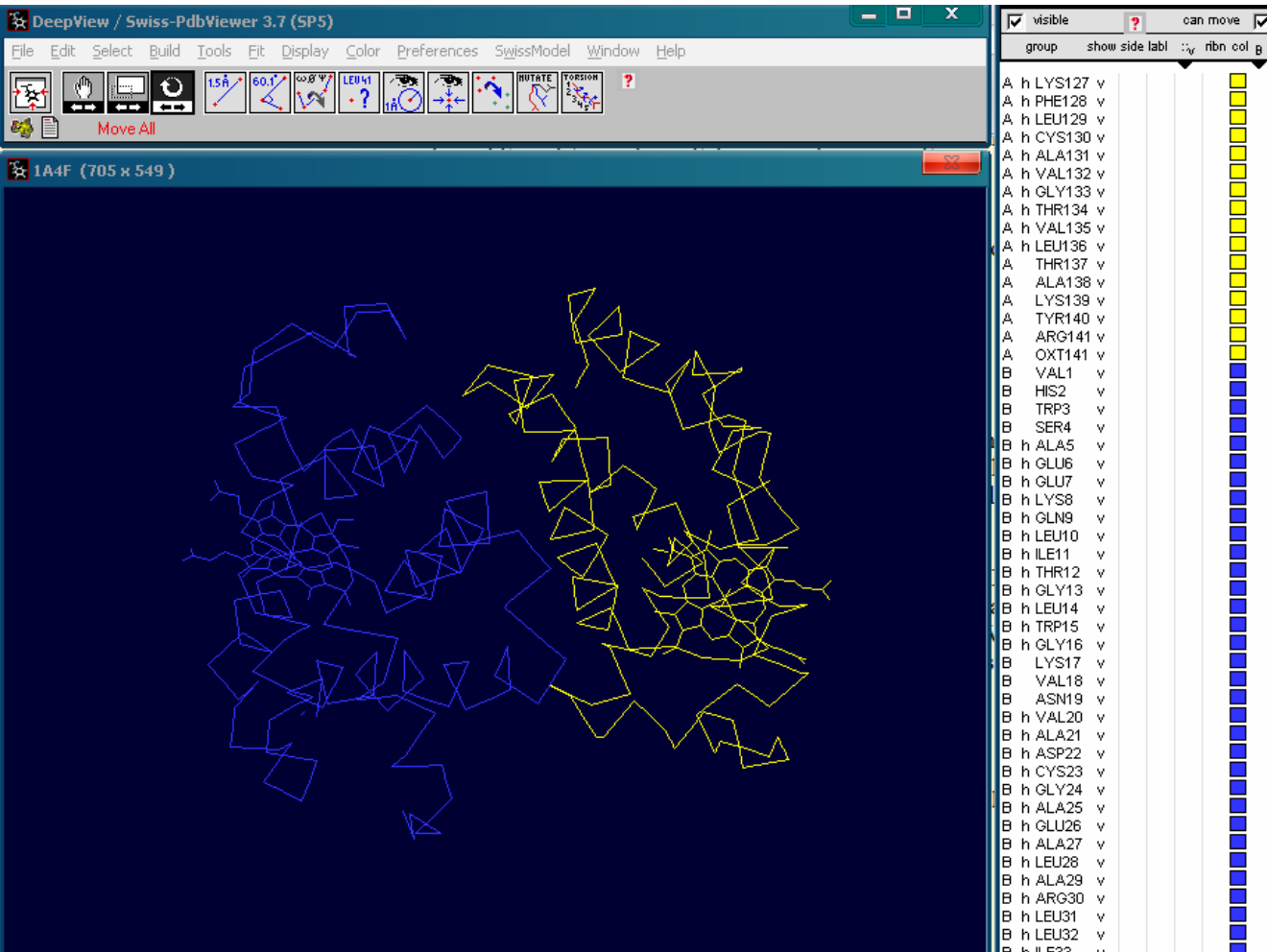




图中，血红蛋白 α 亚基整条多肽链二级结构用不同的颜色显示了：从氨基端到羧基端的颜色为——蓝色、淡蓝色、蓝绿色、绿色、黄色、桔黄色、红色。**control panel**窗口的右侧一列小方格以相同的颜色标记构成同一个二级结构的氨基酸残基，不相同的颜色标记构成不同二级结构的氨基酸残基。



Color: Chain



The screenshot shows the DeepView / Swiss-PdbViewer 3.7 (SP5) interface. The main window displays a protein structure (1A4F) with two chains: a yellow chain (alpha) and a blue chain (beta). The right panel shows a list of residues with checkboxes for 'visible' and 'can move', and a color selection column. The color selection column shows yellow for the alpha chain and blue for the beta chain.

chain	residue	visible	can move	color
A	h LYS127	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	yellow
A	h PHE128	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	yellow
A	h LEU129	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	yellow
A	h CYS130	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	yellow
A	h ALA131	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	yellow
A	h VAL132	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	yellow
A	h GLY133	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	yellow
A	h THR134	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	yellow
A	h VAL135	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	yellow
A	h LEU136	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	yellow
A	h THR137	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	yellow
A	h ALA138	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	yellow
A	h LYS139	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	yellow
A	h TYR140	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	yellow
A	h ARG141	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	yellow
A	h OXT141	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	yellow
B	h VAL1	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h HIS2	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h TRP3	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h SER4	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h ALA5	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h GLU6	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h GLU7	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h LYS8	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h GLN9	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h LEU10	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h ILE11	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h THR12	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h GLY13	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h LEU14	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h TRP15	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h GLY16	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h LYS17	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h VAL18	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h ASN19	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h VAL20	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h ALA21	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h ASP22	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h CYS23	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h GLY24	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h ALA25	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h GLU26	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h ALA27	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h LEU28	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h ALA29	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h ARG30	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h LEU31	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h LEU32	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue
B	h F33	<input checked="" type="checkbox"/>	<input checked="" type="checkbox"/>	blue

- 这个命令适合于含有多条链的结构模型，不同的链用不同的颜色加以区分。
- 从图中可以很清楚的看到，血红蛋白的 α 亚基以黄色显示， β 链以蓝色显示。

Color: Type

- 这项命令使得根据氨基酸残基的化学类型而显示不同的颜色：无极性的氨基酸氨基以灰色显示，不带电荷的极性氨基酸以黄色显示，带负电荷的氨基酸残基以红色显示，带有正电荷的氨基酸残基以蓝色显示，如下图所示



DeepView / Swiss-PdbViewer 3.7 (SP5)

File Edit Select Build Tools Fit Display Color Preferences SwissModel Window Help

1A4F-a (705 x 549)

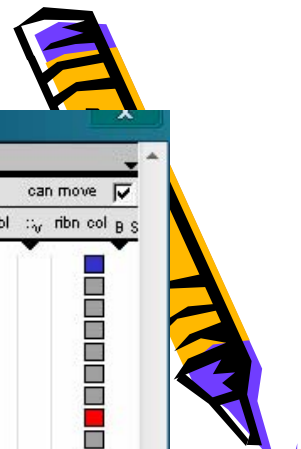
Control Panel

1A4F-a

visible can move

group show side labl rbn col B S

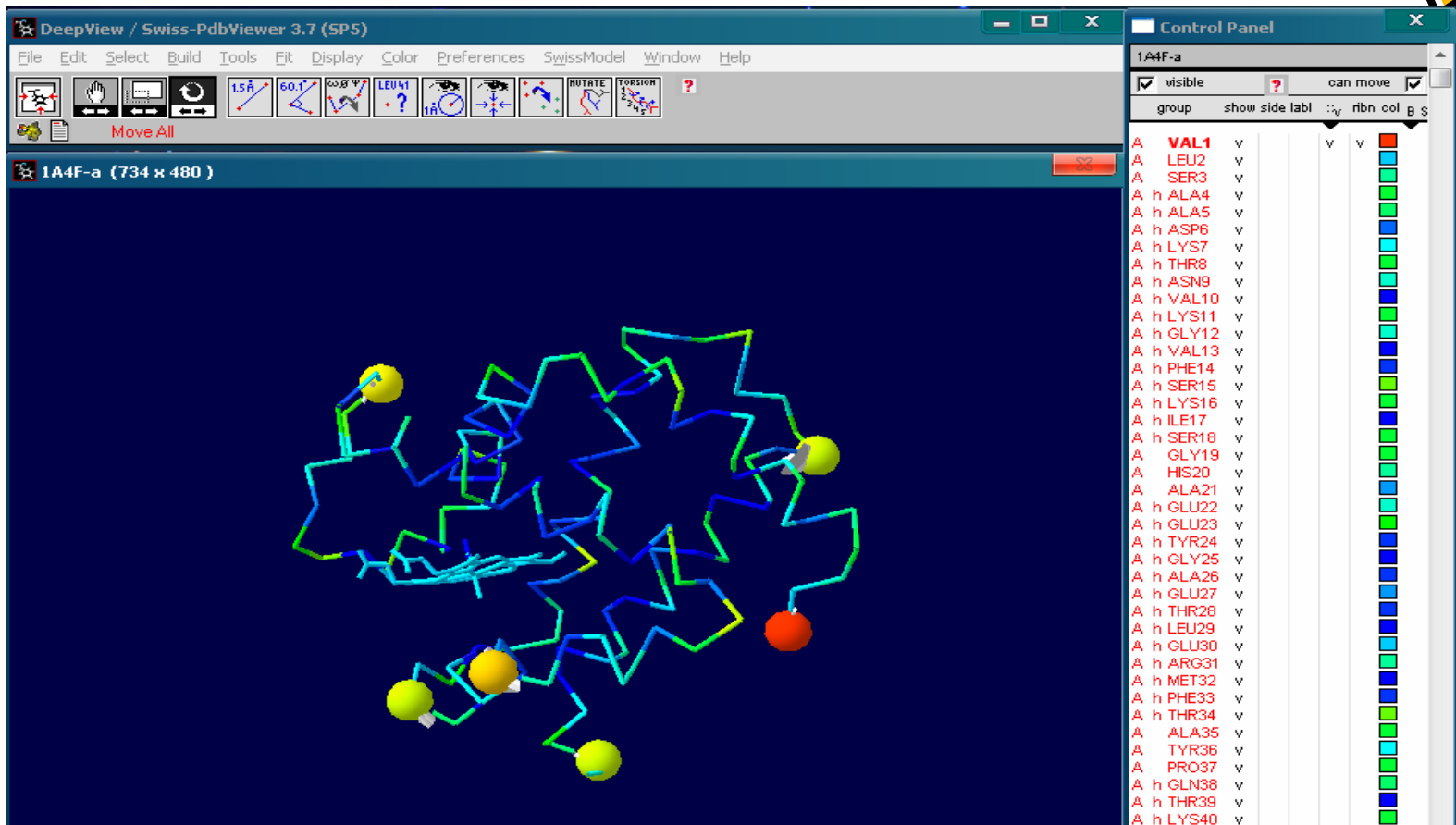
A	h	LYS81	v	v	
A	h	VAL62	v	v	
A	h	VAL63	v	v	
A	h	ALA64	v	v	
A	h	ALA65	v	v	
A	h	LEU66	v	v	
A	h	VAL67	v	v	
A	h	GLU68	v	v	
A	h	ALA69	v	v	
A	h	VAL70	v	v	
A		ASN71	v	v	
A		HIS72	v	v	
A		ILE73	v	v	
A		ASP74	v	v	
A		ASP75	v	v	
A	h	ILE76	v	v	
A	h	ALA77	v	v	
A		GLY78	v	v	
A		ALA79	v	v	
A		LEU80	v	v	
A	h	SER81	v	v	
A	h	LYS82	v	v	
A	h	LEU83	v	v	
A	h	SER84	v	v	
A	h	ASP85	v	v	
A	h	LEU86	v	v	
A	h	HIS87	v	v	
A	h	ALA88	v	v	
A	h	GLN89	v	v	
A	h	LYS90	v	v	
A		LEU91	v	v	
A		ARG92	v	v	
A		VAL93	v	v	
A		ASP94	v	v	
A		PRO95	v	v	
A	h	VAL96	v	v	
A	h	ASN97	v	v	
A	h	PHE98	v	v	
A	h	LYS99	v	v	
A	h	PHE100	v	v	
A	h	LEU101	v	v	
A	h	GLY102	v	v	
A	h	HIS103	v	v	
A	h	CYS104	v	v	
A	h	PHE105	v	v	
A	h	LEU106	v	v	



Color: Accessibility

模型中每个氨基酸残基的颜色是取决于它与周围溶剂接触的程度。与溶剂接触最少的（埋藏在分子内的）氨基酸残基显示蓝色，与溶剂接触最多的（暴露于分子表面的）氨基酸残基显示红色。因此，可以通过看氨基酸残基的颜色来判断其与溶剂的接触程度。

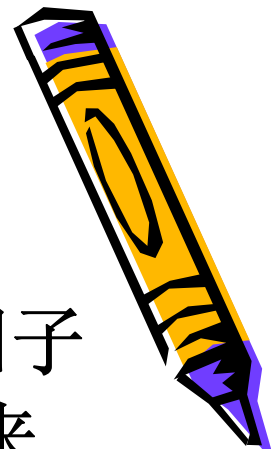




图中，将与溶剂接触较多的原子以球形结构显示出来了，与溶剂接触最多的氨基酸残基显示红色，与溶剂接触最少的氨基酸残基显示蓝色。

Color: B Factor

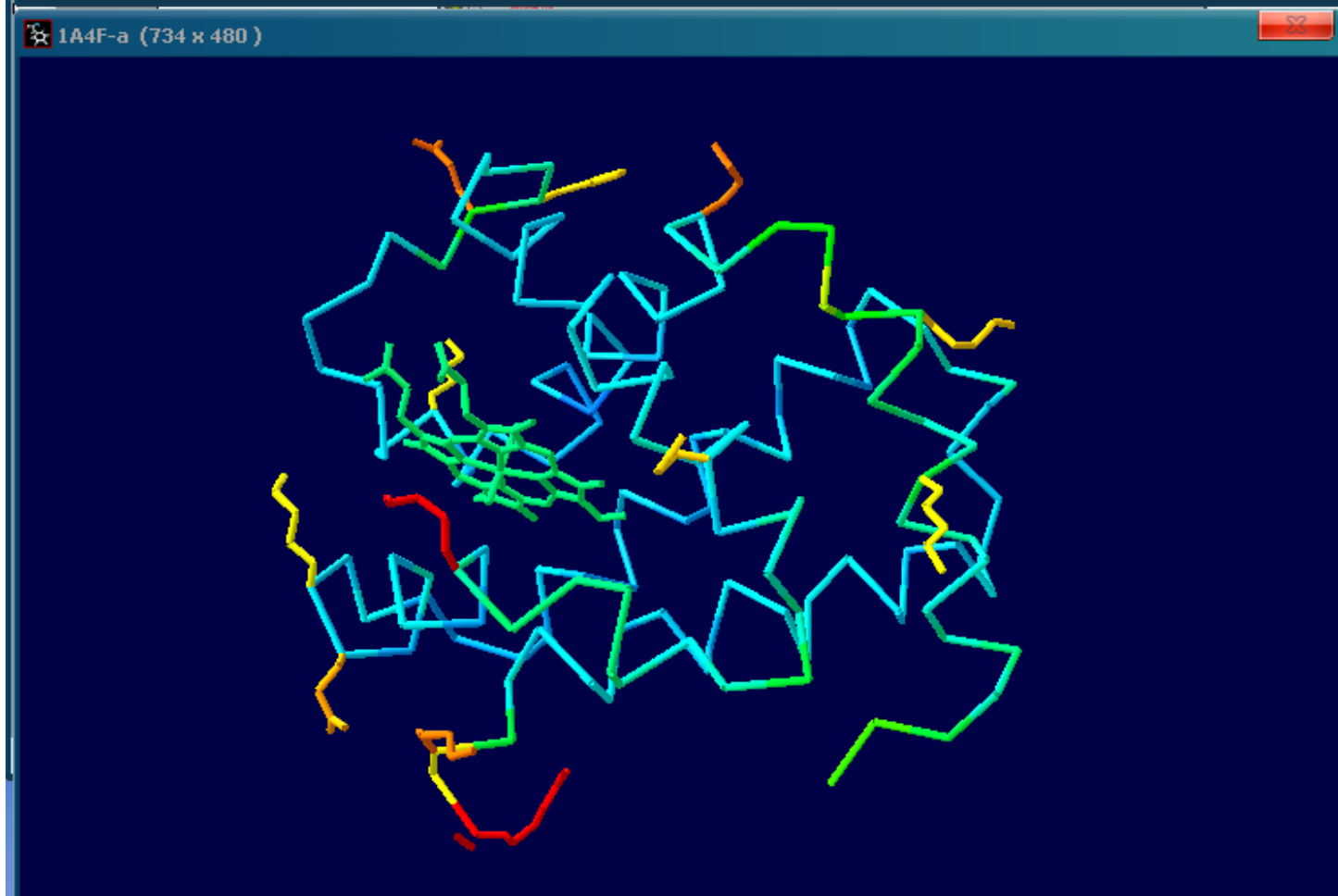
- 执行这项命令后，模型中颜色的取决于**B**因子（或称之为温度因子）。对于一个的原子来说，**B**因子指的是该原子在一般的（平均化了的）模型的位置与在其他模型的位置间的平均距离，可反映分子各部分的摇摆性或活动性。
- 因此，可以利用**B**因子来判断其他模型与一般模型的一致性。若在所有测得的模型中该原子的位置变化不大是固定的，则以深蓝色显示；若在所有测得的模型中该原子的位置是不确定的或者说摇摆性很大，则以红色表示。



DeepView / Swiss-PdbViewer 3.7 (SP5)

File Edit Select Build Tools Fit Display Color Preferences SwissModel Window Help

Move All



Control Panel

1A4F-a

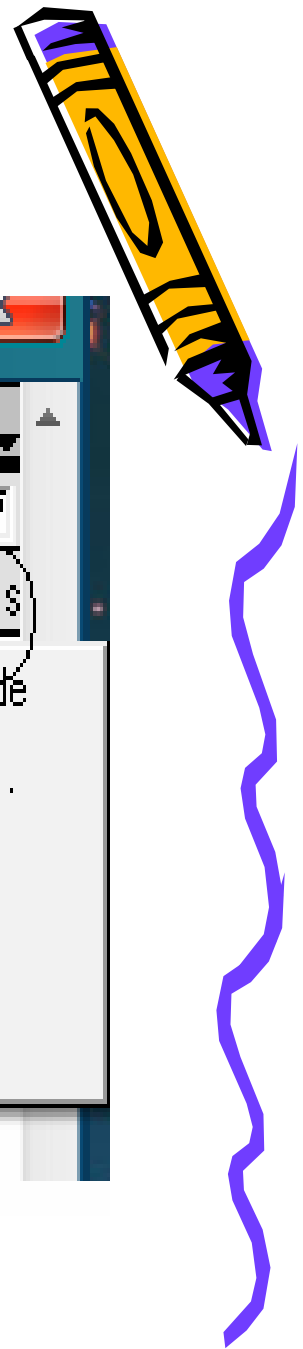
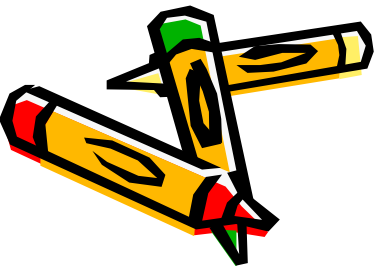
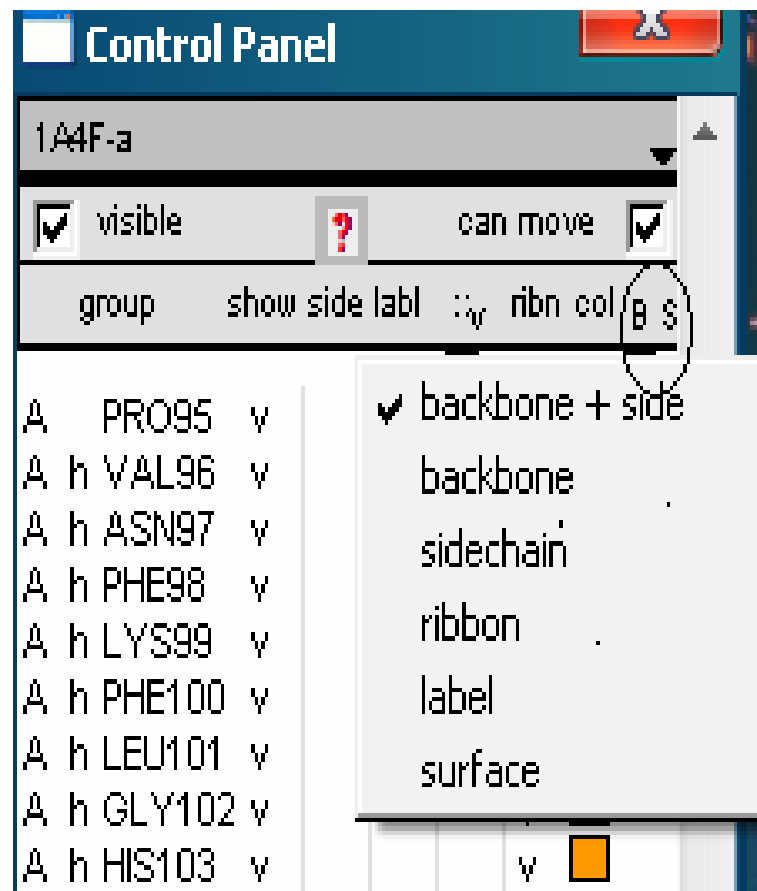
visible ? can move

group	show side labl	rnb	col	g	s
A h VAL67	v				
A h GLU68	v	v			
A h ALA69	v				
A h VAL70	v				
A ASN71	v				
A HIS72	v				
A ILE73	v				
A ASP74	v				
A ASP75	v				
A h ILE76	v				
A h ALA77	v				
A GLY78	v				
A ALA79	v				
A LEU80	v				
A h SER81	v				
A h LYS82	v	v			
A h LEU83	v				
A h SER84	v				
A h ASP85	v				
A h LEU86	v				
A h HIS87	v				
A h ALA88	v				
A h GLN89	v	v			
A h LYS90	v	v			
A LEU91	v				
A ARG92	v				
A VAL93	v				
A ASP94	v				
A PRO95	v				
A h VAL96	v				
A h ASN97	v				
A h PHE98	v				
A h LYS99	v				
A h PHE100	v				
A h LEU101	v				
A h GLY102	v				
A h HIS103	v				
A h CYS104	v				
A h PHE105	v				



不同部位的颜色标记

- 在control panel窗口的col的旁边有字母BS，当单击BS下面的黑色三角形时，会弹出下拉式菜单，如图所示：
- 一般默认为BS（backbone+sidechain），及骨架和侧链。选中某项，颜色就影响某项，如选Ribbon，则影响模型中色带的颜色。



DeepView / Swiss-PdbViewer 3.7 (SP5)

Edit Select Build Tools Fit Display Color Preferences SwissModel Window Help

act on Ribbon

- act on Backbone + Sidechains
- act on Backbone
- act on Sidechains
- act on Ribbon
- act on Label
- act on Surface

by CPK

by Type

by RMS

by B-Factor

by Custom Scale

by Secondary Structure

by Secondary Structure Succession

by Selection

by Layer

by Chain

by Alignment Diversity

by Accessibility

by Threading Energy

by Force Field Energy

by Protein Problems

by Other Color ...

by Backbone Color

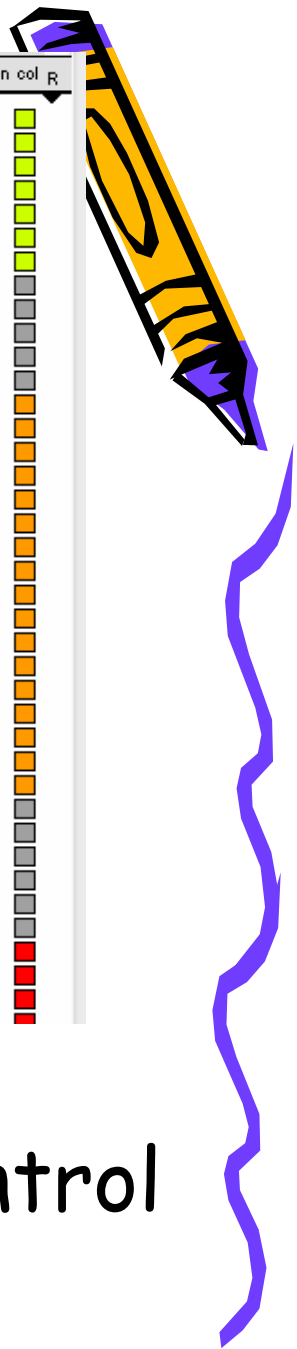
by Sidechain Color

by Ribbon Color

by Surface Color

by Label Color

group	show side labl	ribn col	R
A h SER84	v	v	█
A h ASP85	v	v	█
A h LEU86	v	v	█
A h HIS87	v	v	█
A h ALA88	v	v	█
A h GLN89	v	v	█
A h LYS90	v	v	█
A LEU91	v	v	█
A ARG92	v	v	█
A VAL93	v	v	█
A ASP94	v	v	█
A PRO95	v	v	█
A h VAL96	v	v	█
A h ASN97	v	v	█
A h PHE98	v	v	█
A h LYS99	v	v	█
A h PHE100	v	v	█
A h LEU101	v	v	█
A h GLY102	v	v	█
A h HIS103	v	v	█
A h CYS104	v	v	█
A h PHE105	v	v	█
A h LEU106	v	v	█
A h VAL107	v	v	█
A h VAL108	v	v	█
A h VAL109	v	v	█
A h ALA110	v	v	█
A h ILE111	v	v	█
A h HIS112	v	v	█
A HIS113	v	v	█
A PRO114	v	v	█
A SER115	v	v	█
A ALA116	v	v	█
A LEU117	v	v	█
A THR118	v	v	█
A h ALA119	v	v	█
A h GLU120	v	v	█
A h VAL121	v	v	█
A h HIS122	v	v	█



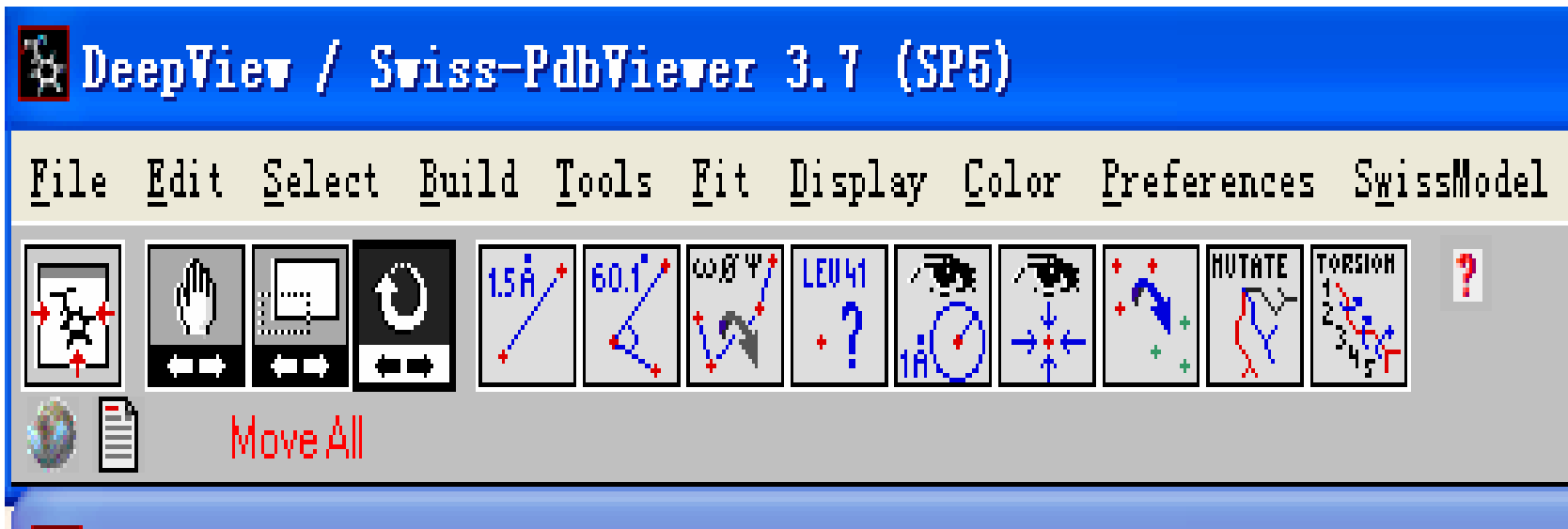
Color 下拉式菜单的子菜单与 control 窗口中的 `col R` 的作用相同

Color: CPK

- 这项命令可以将所有基团的颜色回复到标准的颜色——**C**原子以白色显示，**O**原子以红色表示，**N**原子以蓝色显示，**S**原子以黄色表示。



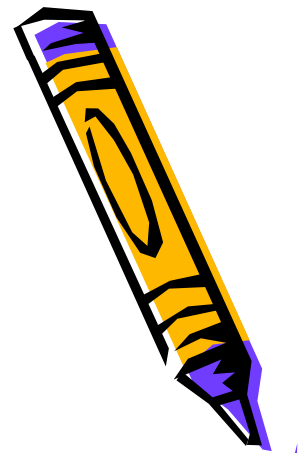
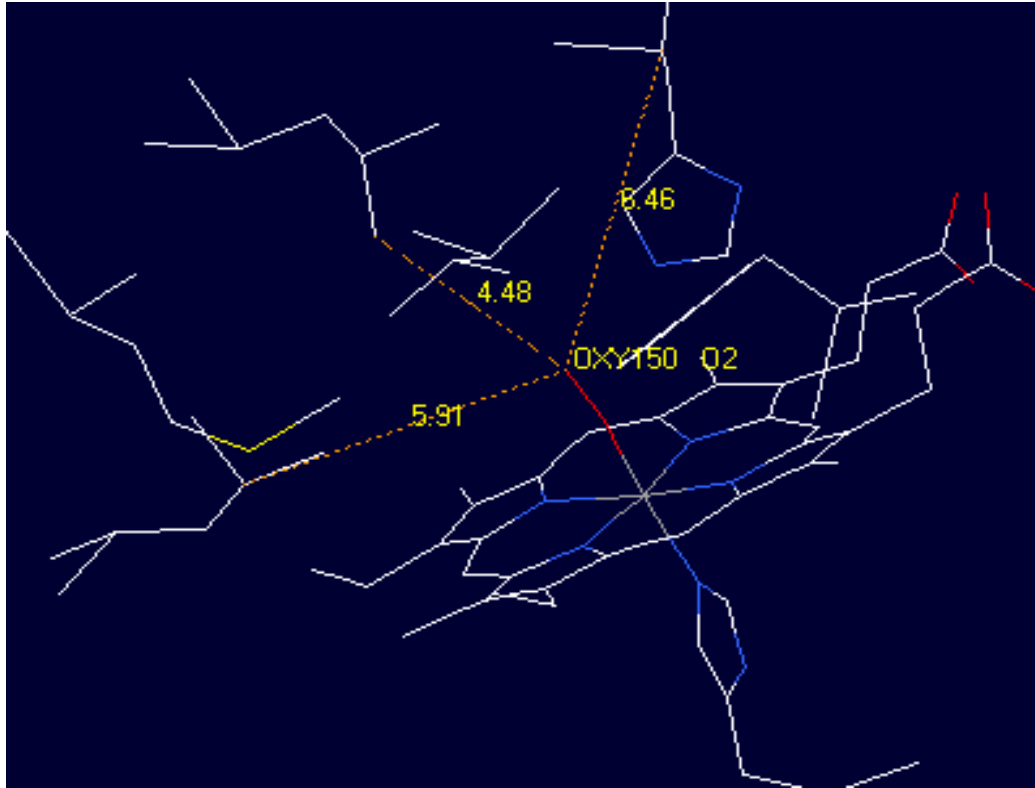
6. Measuring and Labeling



点击距离按钮，再依次点击结构图中的两个原子就可以得到两个原子之间的距离



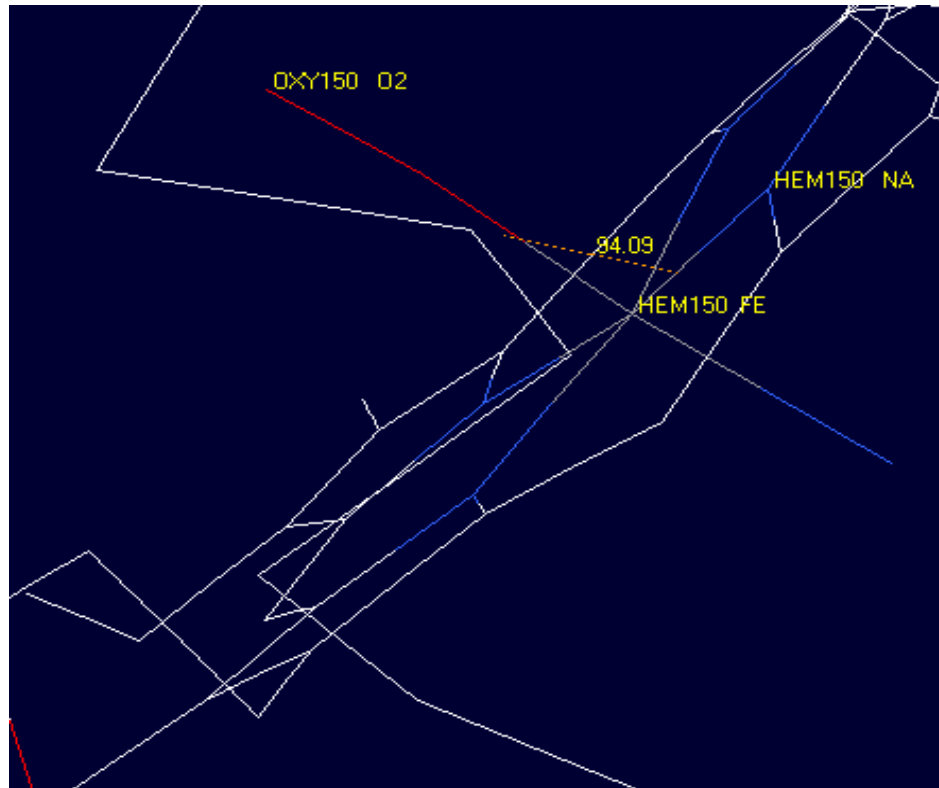
6. Measuring and labeling




以斑头雁氧合血红蛋白1A4F为例，可以得到血红素中心铁原子与O₂分子的距离为2.99nm。



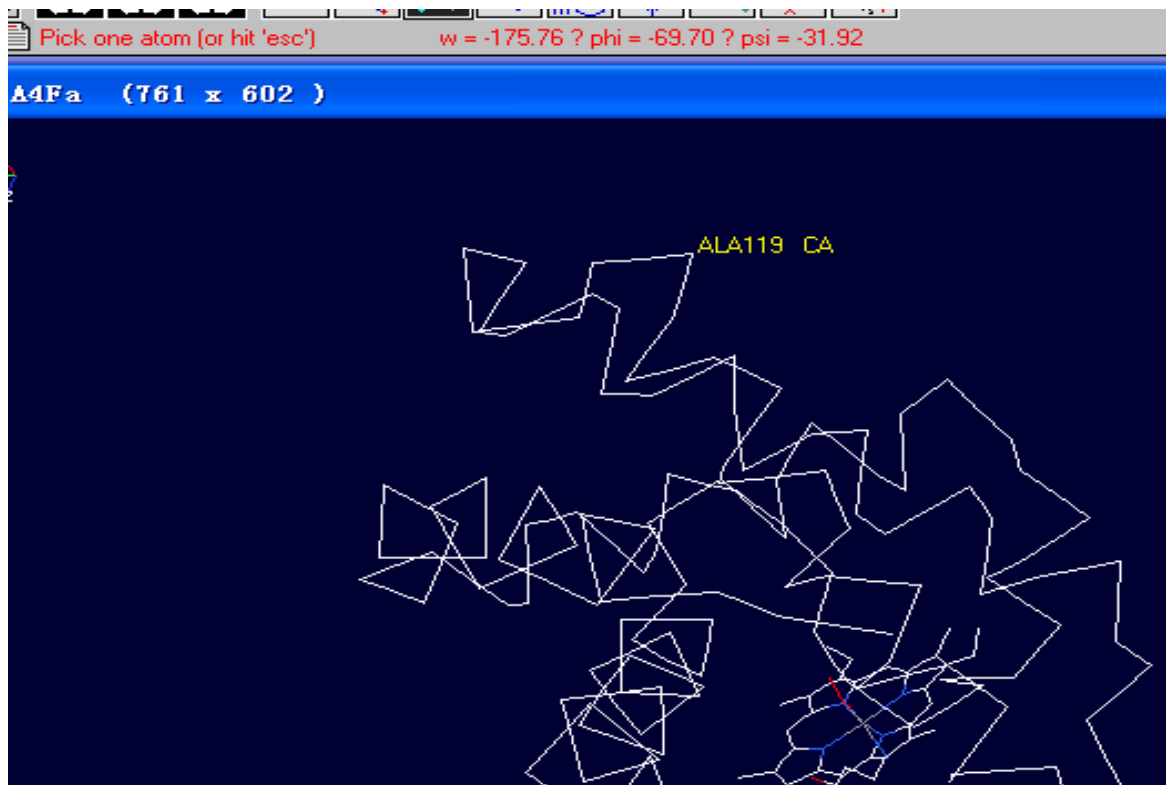
6. Measuring and Labeling




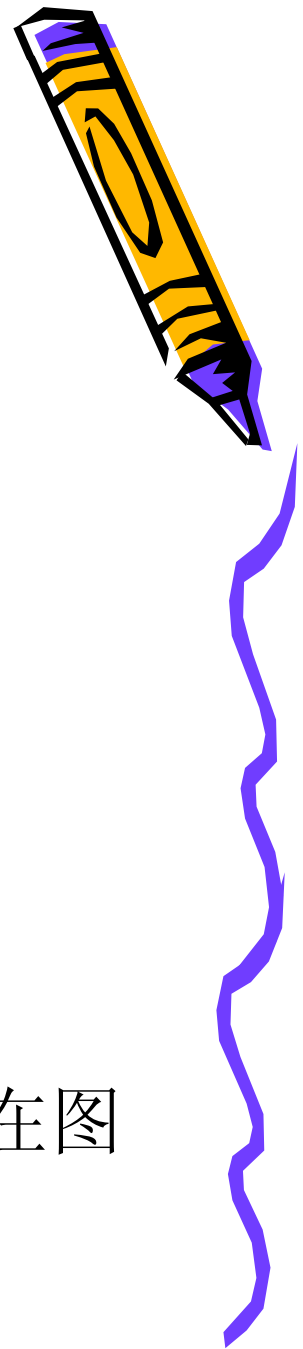
角度按钮 , 首先点击角顶点的原子, 然后点击角两个边的原子, 就会显示角的角度。

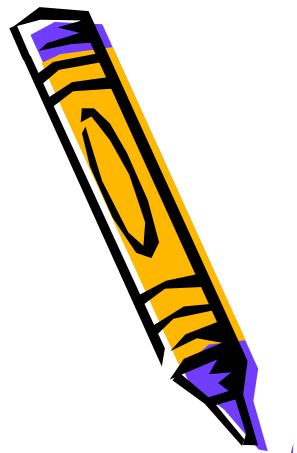
血红素上的O₂与血红素平面的夹角为**94.09°**

6. Measuring and Labeling



点击二面角按钮 ，点击任意一个原子将会在图形框上方显示phi，psi和omega角



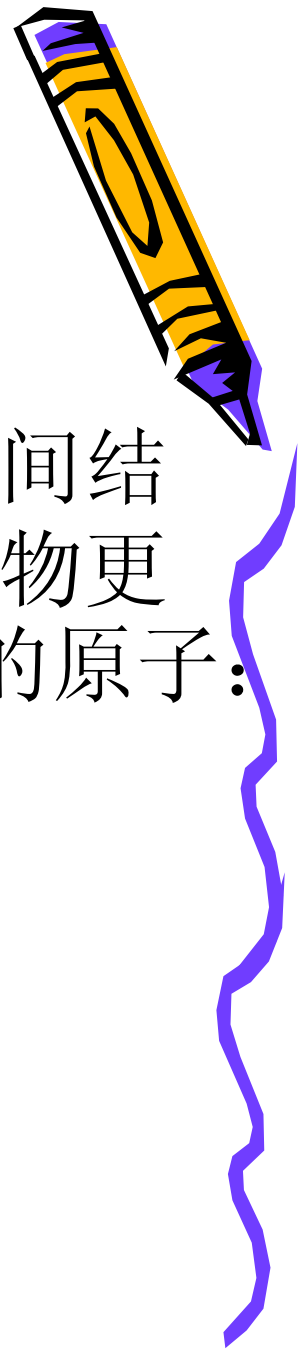
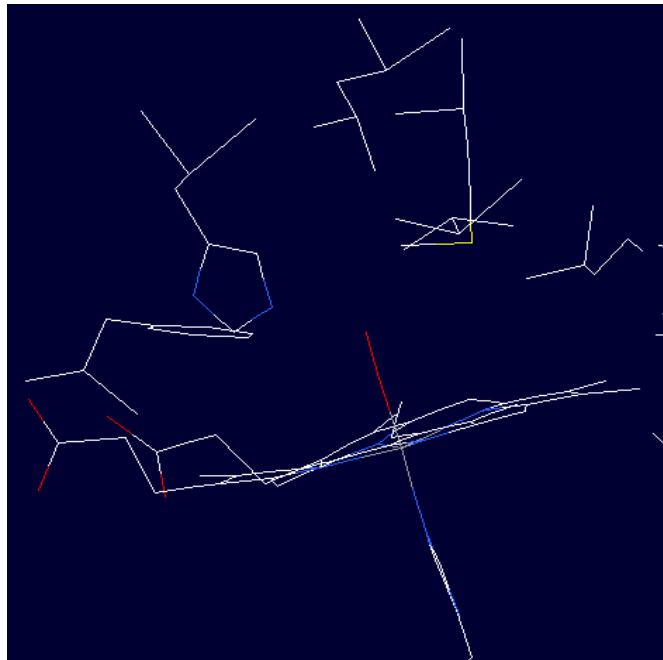


- 去除标记的方法:
- `display` \longrightarrow `label kind`
 \longrightarrow `clear user labels`



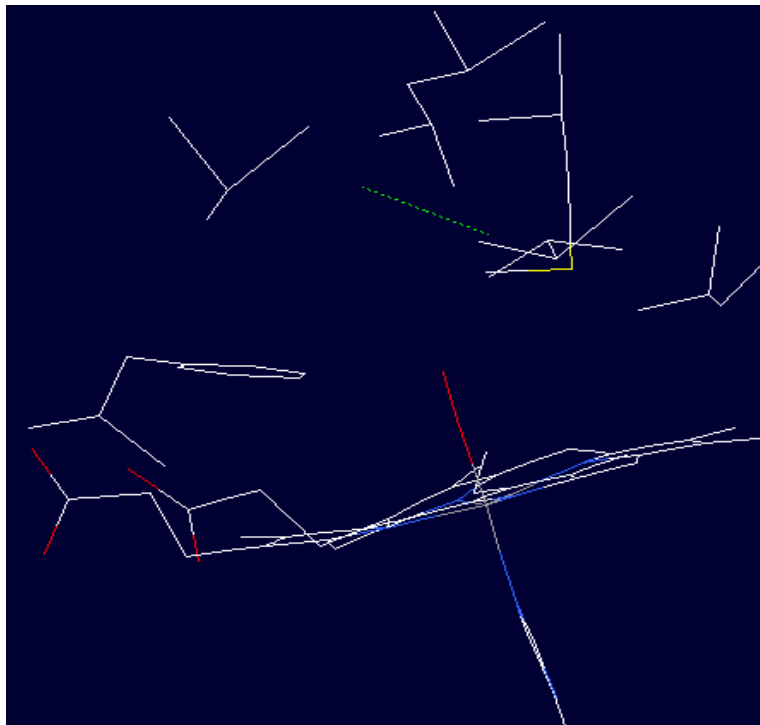
7. Mutating and Changing Side-Chain Conformations

- 突变某一个氨基酸，从而改变蛋白的空间结构，由此可以重新设计蛋白，使之与底物更好地结合。选择显示氧气分子6埃以内的原子：



7. Mutating and Changing Side-Chain Conformations

发现产生空间为阻效应的主要为his，将其突变为小侧链的氨基酸Ala，点击mutate按钮，再点击his的任何一个原子，选择下拉框中的Ala，再点一次mutate选择接受还是放弃突变。



7. Mutating and Changing Side-Chain Conformations

- **Torsion**可以改变氨基酸侧链的构型：
点击**Torsion**，再点击所要旋转的氨基酸的任何一个原子，鼠标会变成旋转图标，拖动鼠标的同时按住**1**，是旋转侧链的第一个键，按住**2**是旋转第二个键，按住三是旋转第三个键。点击第二次**Torsion**选择接受还是放弃旋转改变。

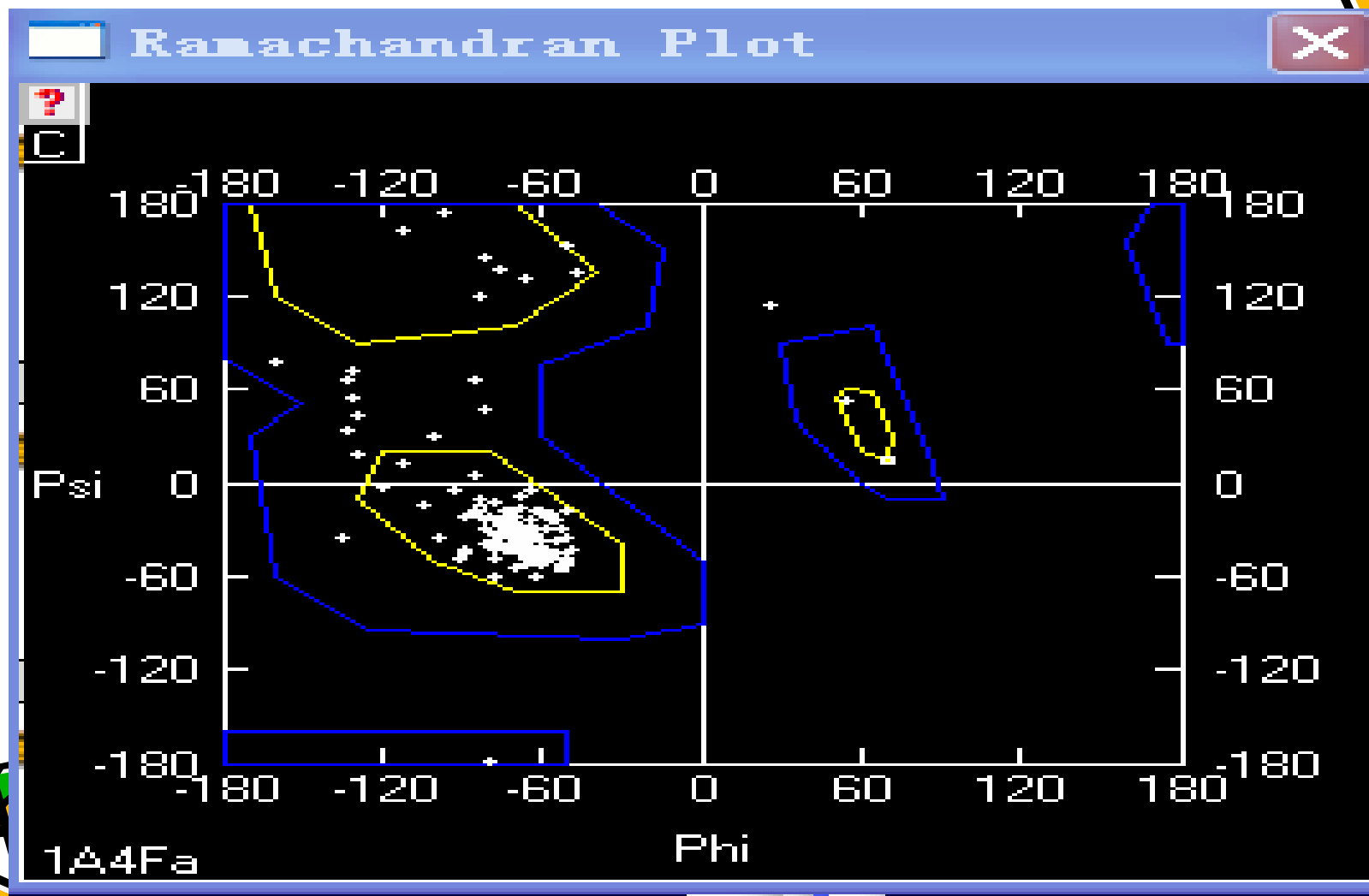


8. Ramachandran Plot

Ramachandran Plot(α -碳与酰胺平面交角图), 通过它我们可以判断一个模型的质量, 可以找到一个残基与一个特定平面的构象角, 我们也可以改变模型中的构象角。图形中的每一个点都给出了每个残基的 ϕ 和 ψ 角



在工具栏WINDOW下选择Ramachandran Plot，然后出现下面的图片



- 点击**Rama Plot** 使它激活，出现上面的那个图片，将鼠标放在图上的一个点上（不用点击它），残基的名字和数字出现在这个窗口的最上面的左上角，然后移动这个点就会使控制窗口中的结构的这个点连接的相应结构发生移动。
- 看**Ramachandran Plot** ， 并且注意到很小的点出现—仅仅是呈现被选择的残基，注意一下大量的点都位于图片左上角的黄色区域，相应的**beta** 构型的角位于在这个区域。
- 当你观察这个模型时点击或是拖拽图上的一个点转动，当你水平的拖拽时，你正改变的是**phi** 角；当你垂直的拖拽时，你正改变的**psi** 角。这允许你在模型的构建中调整骨架构象。这些可以使你更加了解分子的结构及其它的二面角。



9. Working with Oligomeric Proteins

- **Color : chain**

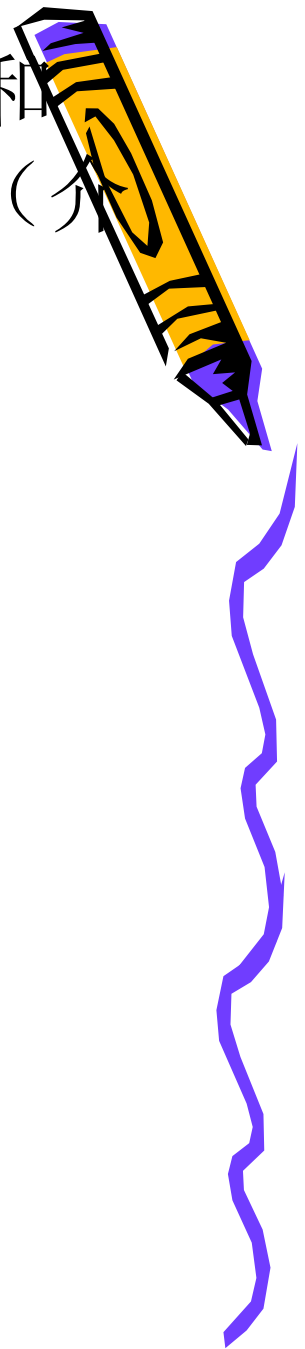
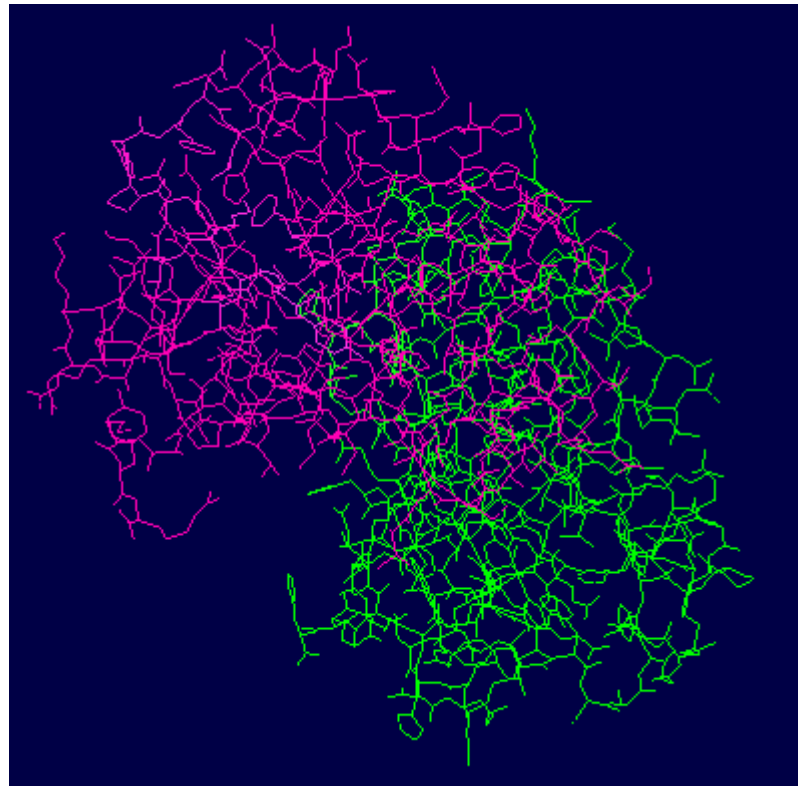
许多蛋白质是由多个亚基或者蛋白质链组成。 **Deepview color** 可以显示各亚基不同的颜色。 这个命令是一个快速的方法来找出新打开的**pdb**文件中有多少个蛋白链或者亚基。



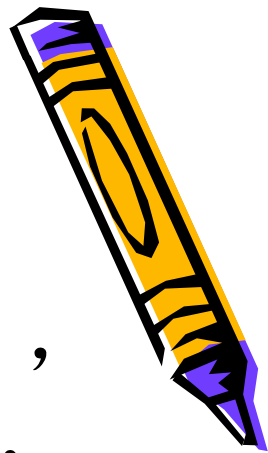
- 我们选斑头雁的血红蛋白**1A4F**为例子。此结构包括 α 和 β 亚基血红蛋白。你可能知道，血红蛋白包括四个亚基，两个 α 亚基和两个 β 亚基。一些寡聚蛋白质的 **pdb** 文件只包含独特的亚基，在**1A4F** 的结构中，就包括其中的一个的 α 和 β 。稍后，你可以建立更多的亚基组成。但首先，你要先检查亚基之间接触的表面。



- 可以把**A**亚基染上洋红色（介于红色和蓝色之间）和再把**B**亚基染成蓝绿色（介于蓝色和绿色之间）。

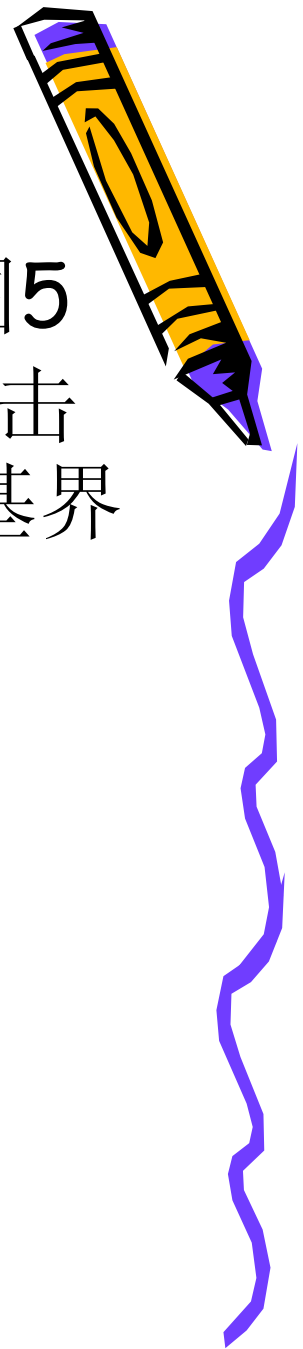
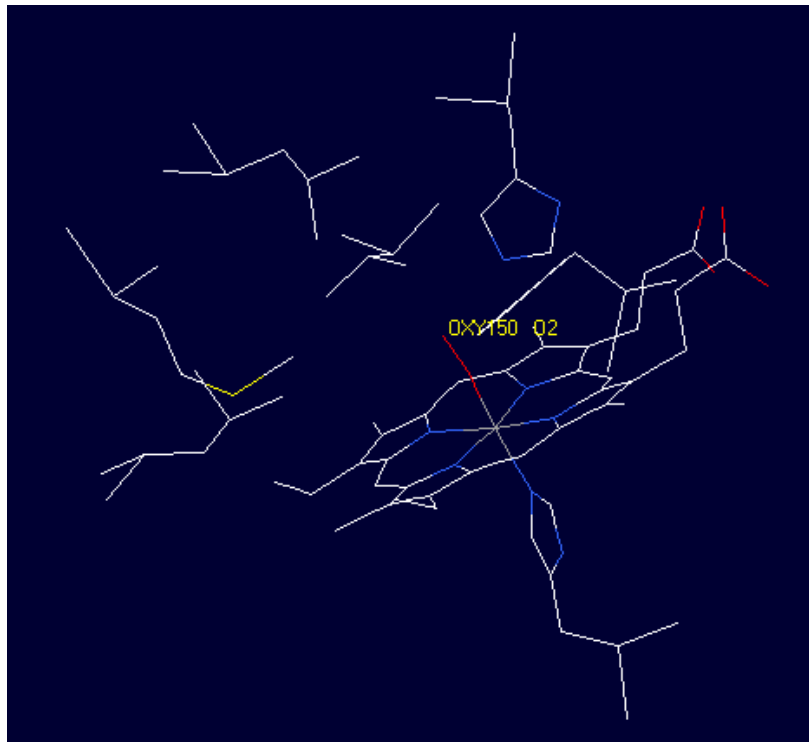


- 点击命令行 **Windows –Control panel** , 以启动这个选项。字母 **A** 在第一栏中, 可以理解为是第一个亚基。
- 点击链中的栏位选择整个亚基。从开始向下滚动, 到 **A** 亚基的底部, 该蛋白的 **A** 链残基被选中, 也可以直接单击字母 **A** 选中 **A** 亚基。按下 **enter**, 亚基 **b** 或其他亚基消失。



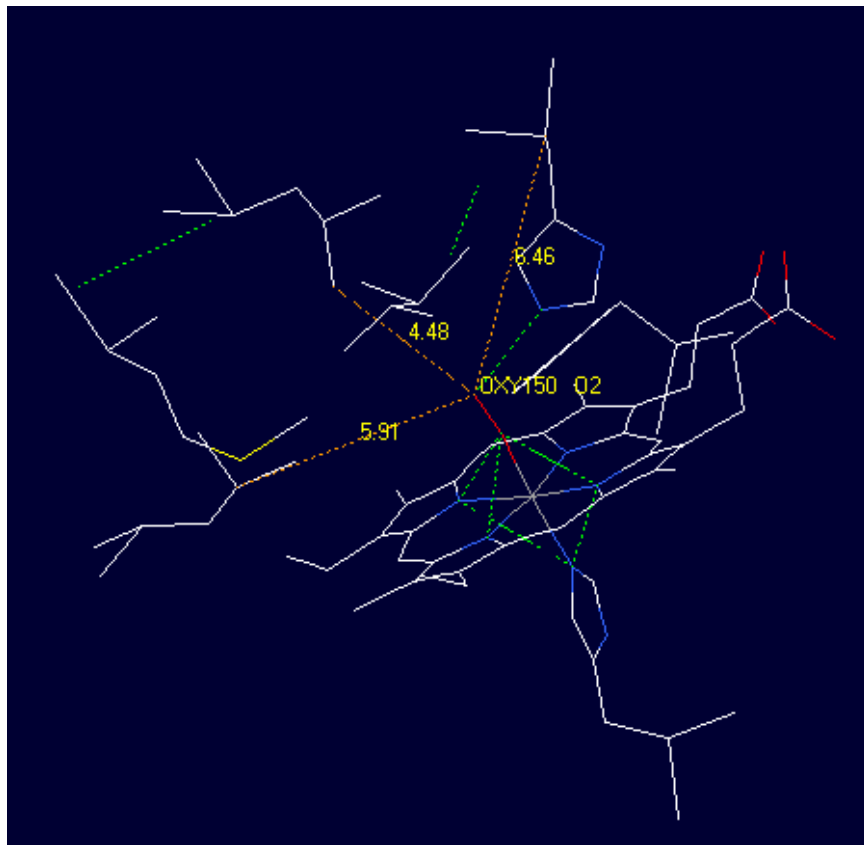
- **Select: Groups Close to another Chain...**

使用此命令行选择位于一个残基周围**5**埃（或其他距离）的其他残基，并单击**确定**。这等于挑选残留在**5**埃的亚基界面。单击返回，以消除其他残留物。



- 研究亚基之间的相互作用。 选定 sidechains lacking proper H-bonds, 然后计算出的H-键。 放大了仔细研究。 前面所讲的亚基的颜色, 让你分辨亚基 **A**和**B**, 而**sidechain**颜色显示类型的相互作用。 红方链(负)近蓝(正面)表明离子相互作用。 近灰色意味着疏水相互作用。 而绿色虚线显示的是H-键。 如下图所示



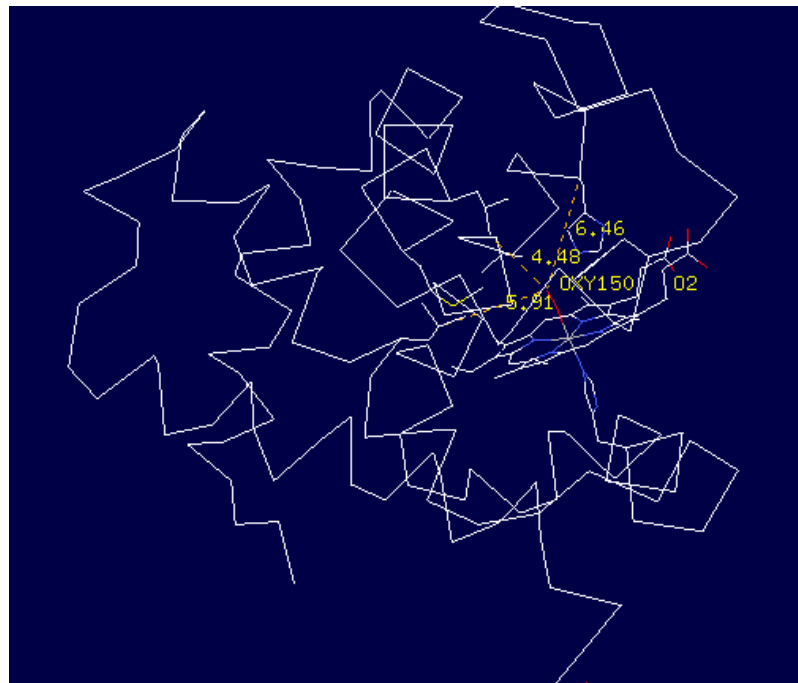


绿色虚线表示H-键

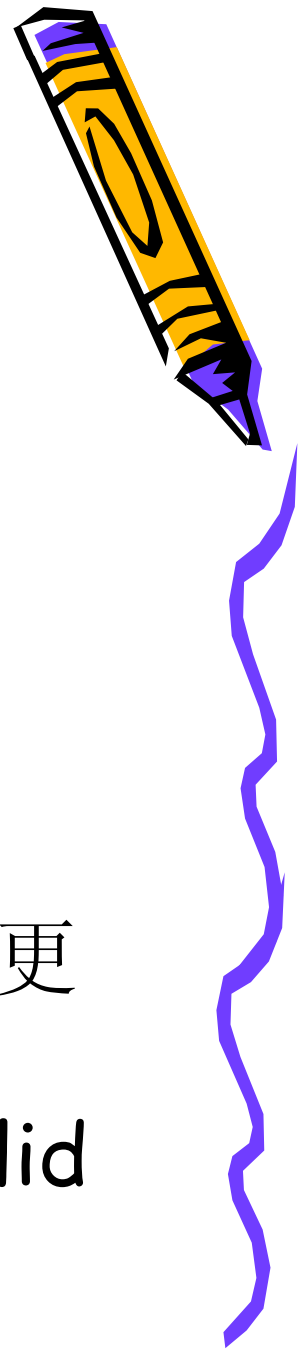
当你完成后，重新显示整个模型。重新打开Control Panel中的color选项可以选择显示backbone + sidechain的颜色，也可以选择显示其他的颜色，如label, surface。可以关掉H-键的显示。

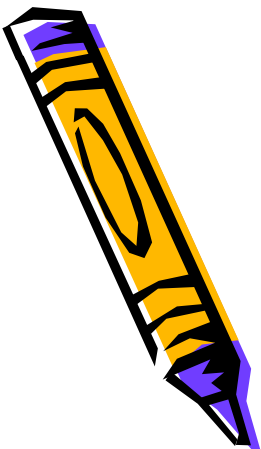
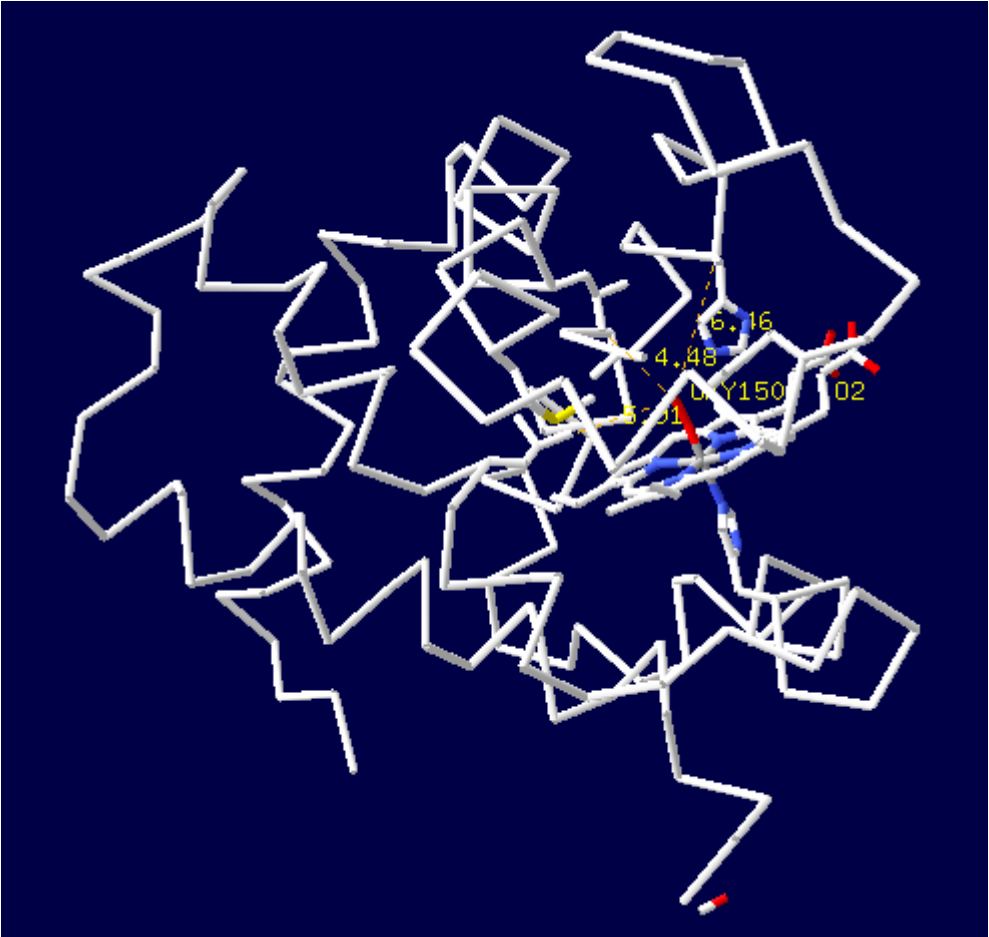


- 改变图形的样子，由线性变成棍型

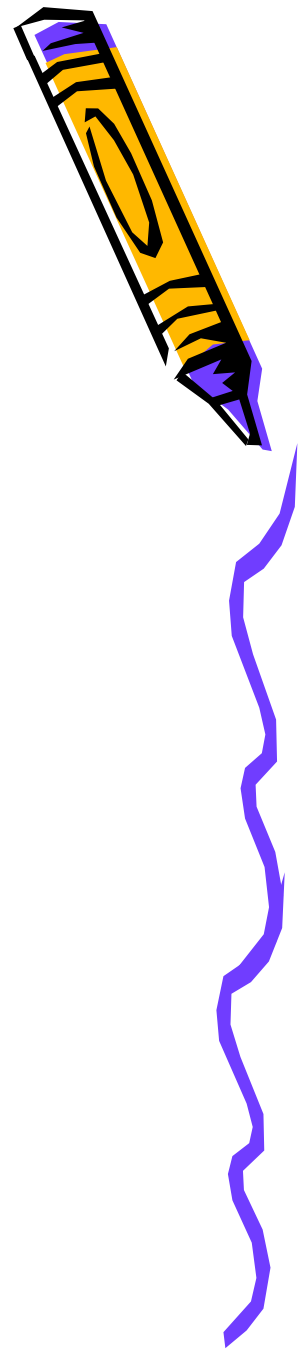
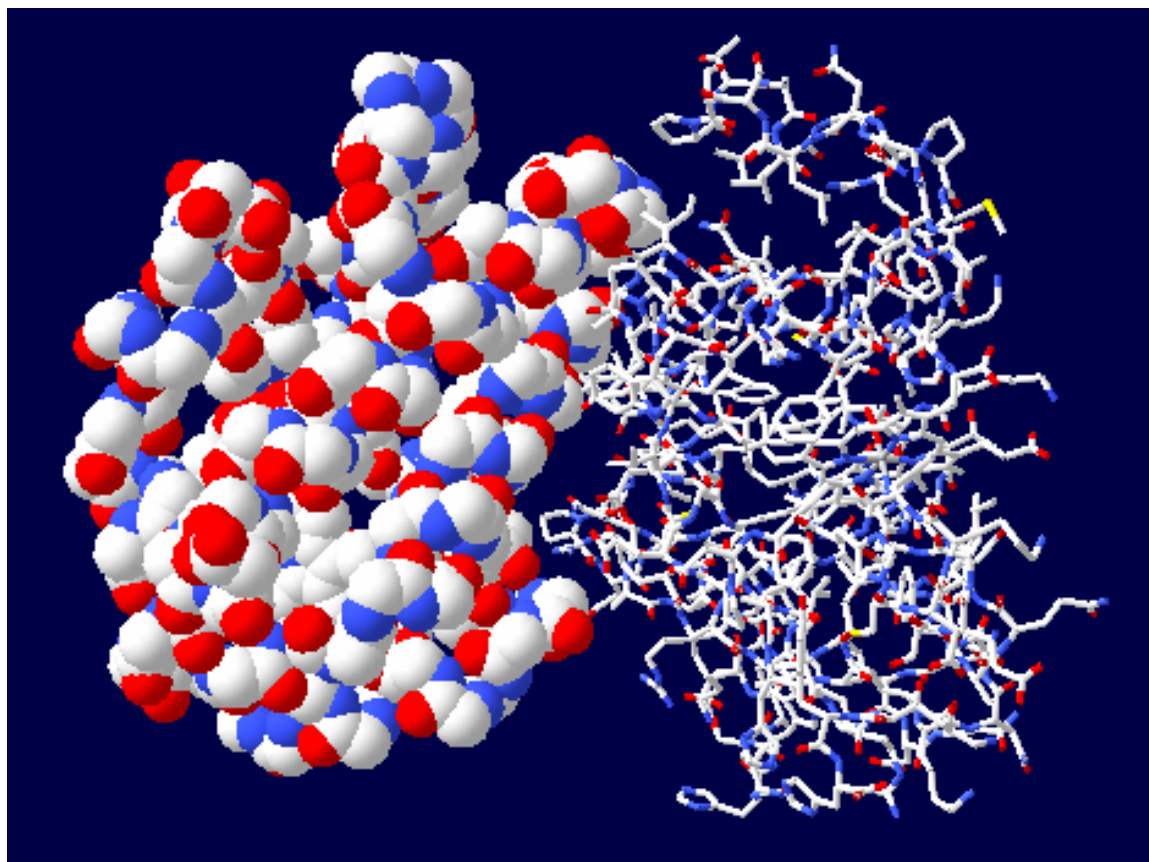


- 将线性的结构变成棍型，这样看起来更加清晰。点击 **Display-use OpenGL Rendering** ,然后再点击 **Render in solid 3D** ,就会出现如下图所示的棍状模型。

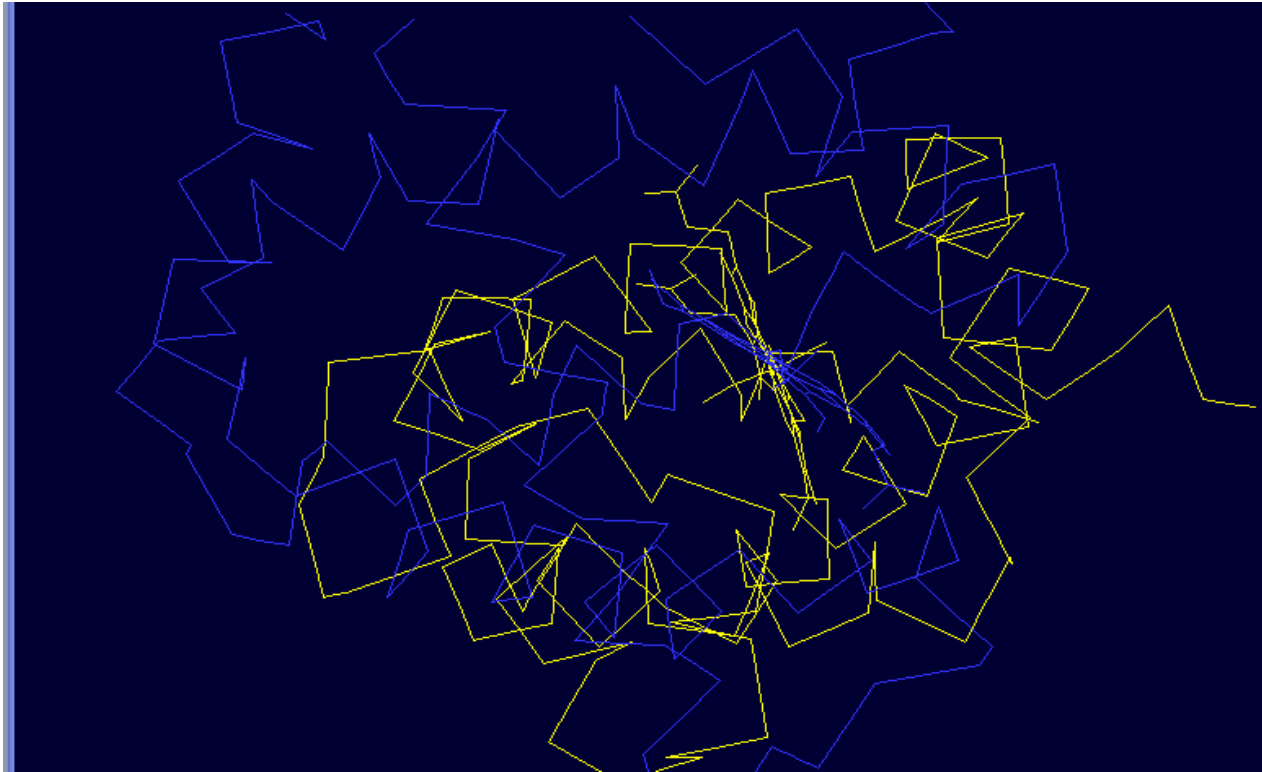




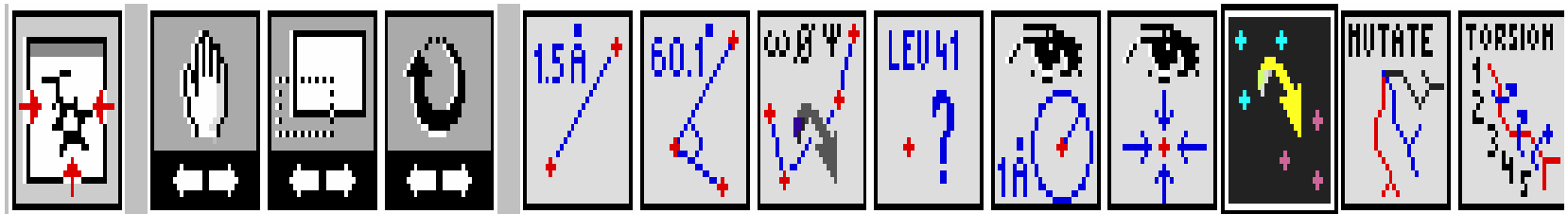
- 右击  ，就会出现以下球状模型



10. Comparing Proteins: Hemoglobins



10. Comparing Proteins: Hemoglobins



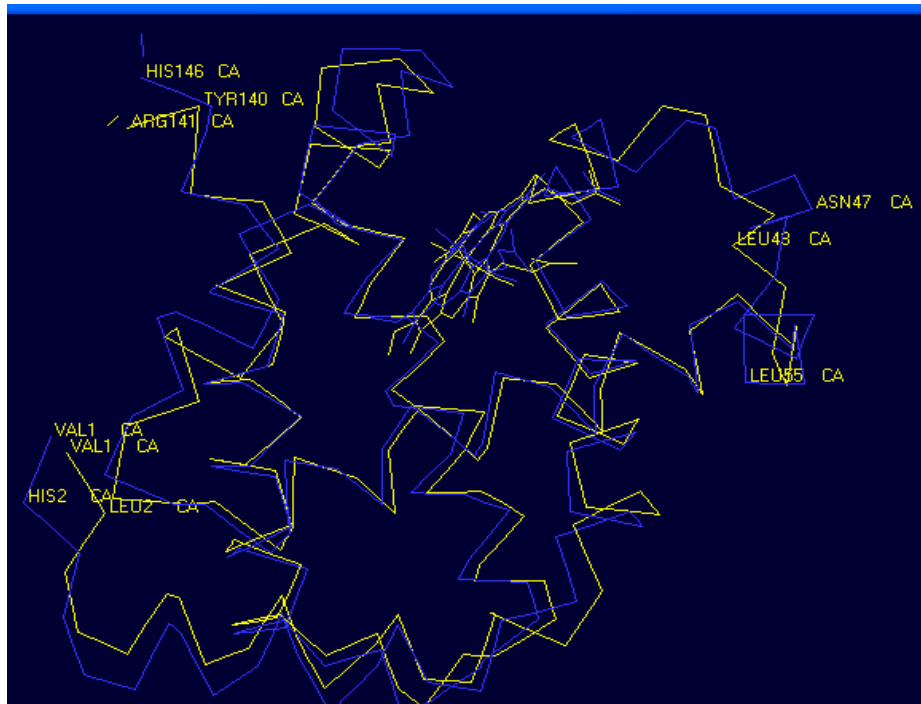
- **superimpose** (重叠) 是右边倒数第三个按钮，可对应的点击两个模型中的三个原子进行重叠，选择斑头雁血红蛋白的氧合形式 **1A4F** 和去氧形式 **1HV4** 进行重叠，当点击完三个对应的原子时，两个模型重叠起来。



color → by layers

10. Comparing Proteins: Hemoglobins

- 比较1A4F的A、B亚基，首先选择A、B亚基，
save → from selected residues .fit → magic
fit 主要是通过序列比对发现二者的差别



10. Comparing Proteins: Hemoglobins

- **Fit Calculate RMS Deviation**

RMS是A、B链的所有相应的alpha碳原子的平方根，在图形框上方的红色字体显示:nb atoms involved : 137, RMS 1.34

- **Fit: Best Fit (with Struct. Align.)**

在magic fit的基础上又加了结构比对。

- **Select: Inverse Selection:** 可取消之前所选择的原子或集团



Thank You !

