




# User Guide of Swiss-PdbViewer

2008年6月21日

报告人：张晶

组员：张文娟 张银敏 晁江涛

- 
- Introduction
  - Getting started
  - Windows and Help
  - Manipulating the Model
  - Selecting and Displaying
  - Coloring
  - Measuring and Labeling
  - Mutating and Changing Side-Chain Conformations
  - Using a Ramachandran Plot



# Introduction

## Deep View的功能:

- a. 显示和分析生物大分子（**protein**）结构与图解；
- b. 给予一段氨基酸序列，从头建立蛋白质结构模型
- c. 找出并显示蛋白质中、蛋白质间、基团间的氢键
- d. 通过检晶仪检测电子密度图，判断电子密度图谱和模型的质量，从而可以确定蛋白质模型许多普通类型的缺陷；
- e. 同时显示分析多个蛋白质的**3D**结构和序列；
- f. 计算氨基酸残基的静电力和分子表面携带的最小自由能。



## Getting started

载入一个蛋白质分子有以下几种方法：

- 可以直接在菜单**file**→**open PDB file**
- 也可以在打开**PdbViewer**之后再直接把**pdb**文件拖进去即可
- 另外也可以通过快捷键**ctrl+o**打开**pdb**文件
- 在菜单**file**最下面的最近使用的**pdb**文件中直接打开



## 保存PDB文件

- 可以通过file→Save→Layer(Ctrl+S)保存在显示窗口活动的蛋白分子的PDB文件
- Project (shift+Ctrl+S) 保存所有同时打开显示的蛋白质分子
- Save selected residues保存被选择的氨基酸残基
- 同样还可以保存fasta结构的蛋白质序列和当前蛋白质的图像
- 同时可以修改默认的参数更好的显示分子图像

DeepView / Swiss-PdbViewer 3.7 (SP5)

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

Open PDB File... Ctrl+O  
 Open mmCIF File... Shift+Ctrl+O  
 Open MOL File...

Open Text File...  
 Run Script...  
 Import...

Open Surface ▶  
 Open Electrostatic Potential ▶  
 Open Electron Density Map ▶

Close Ctrl+W  
 Close All Layers Shift+Ctrl+W  
 Discard... ▶

Save In Original Orientation

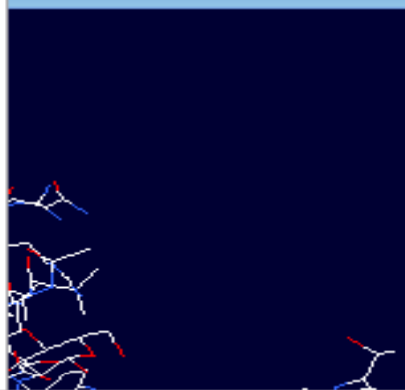
Save ▶  
 Save Remote Job ▶

Exit Ctrl+Q


F:\生物信息学作业\1HEWafterMin.pdb  
 F:\生物信息学作业\1HEWbeforeMin.pdb  
 F:\生物信息学作业\1HEWI98Q.pdb  
 F:\生物信息学作业\1HEW.pdb  
 -



Layer  
 ? Layer  
 1HEW



Layer... Ctrl+S  
 Project... Shift+Ctrl+S  
 Save Selected Residues...  
 mmCIF...  
 Surface...  
 Electrostatic Potential...  
 Sequence (FASTA) ...  
 Alignment ...  
 Ramachandran Plot Values ...  
 Image... Ctrl+E  
 Stereo Image ...  
 POV 3.1 Scene ...  
 POV 3.5 scene ...



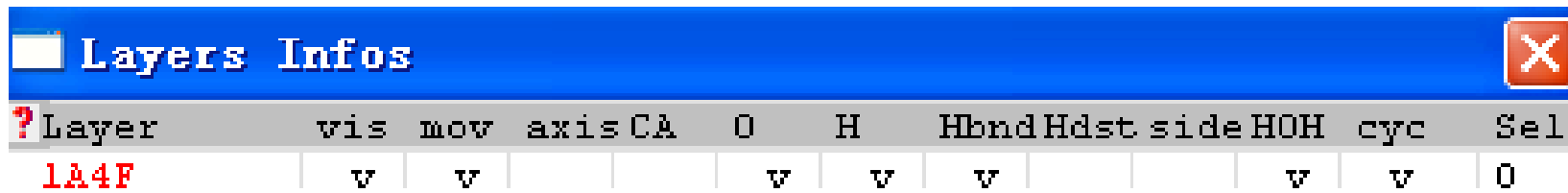
# Windows and Help

- 在windows下有如下各种功能control panel, layers infos, alignment等，下面以斑头雁与人的血红蛋白的序列为例，来介绍windows这些选项卡的功能。

Control Panel					
1A4F					
<input checked="" type="checkbox"/>	visible	<input type="checkbox"/>	?	can move	<input checked="" type="checkbox"/>
group	show side labl	ribn	col	B	S
A	VAL1	v	v		<input type="checkbox"/>
A	LEU2	v	v		<input type="checkbox"/>
A	SER3	v	v		<input type="checkbox"/>
A h	ALA4	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	GLY12	v	v		<input type="checkbox"/>
A h	VAL13	v	v		<input type="checkbox"/>
A h	PHE14	v	v		<input type="checkbox"/>
A h	SER15	v	v		<input type="checkbox"/>
A h	LYS16	v	v		<input type="checkbox"/>
A h	ILE17	v	v		<input type="checkbox"/>
A h	SER18	v	v		<input type="checkbox"/>
A	...	..	..		<input type="checkbox"/>

- control panel可说明该蛋白质序列的详细特点，以及在这些蛋白质中的氨基酸残基的名称，并且可以有选择的对各种氨基酸残基进行颜色修饰，可以在蛋白质图形中标注氨基酸残基和显示氨基酸周围的电子云
- ribn:是否以丝状显示螺旋和折叠



A screenshot of a software window titled "Layers Infos" with a red close button in the top right corner. The window contains a table with columns: Layer, vis, mov, axis, CA, O, H, Hbnd, Hd, st, side, HO, H, cyc, and Sel. The first row of data shows "1A4F" in red text, with "v" in the vis, mov, O, H, Hbnd, Hd, st, HO, H, and cyc columns, and "0" in the Sel column.

? Layer	vis	mov	axis	CA	O	H	Hbnd	Hd	st	side	HO	H	cyc	Sel
1A4F	v	v			v	v	v				v	v	v	0

- **layers infos**可以同时显示多个蛋白质的信息，可以通过对**layers infos**的修改控制各个蛋白质的显示情况，根据使用者的需要清楚的观察各个蛋白质

Layers Infos										
? Layer	vis	mov	axis CA	O	H	HbndHdst	side	HOH	cyc	Sel
1A4F	v	v		v	v	v		v	v	0

- 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

# 序列比对（alignment）

- Alignment可以进行序列的比对，将斑头雁的血红蛋白（1a4f）与人的血红蛋白（1faw）文件打开，应用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



```
Alignment
?
目 1A4F      VLSAADKTNVKGVFSKISGHAE EYGAETLERMFTAYPQ
    1FAW     VLSAADKTNVKGVFSKISGHAE EYGAETLERMFTAYPQ
(A): ALA26
```

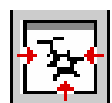
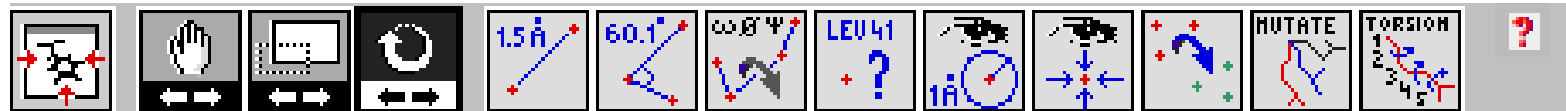
E:\temp\AlignPrv1.txt



```
1A4F      1  VLSAADKTNV KGVFSKISCH AEEYCAETLE RMFTAYPQTK TYFPHFDLQH
1FAM      1  VLSAADKTNV KGVFSKIGCH AEEYCAETLE RMFTAYPQTK TYFPHFDLQH
*****  *****_* ***** ***** *****
```

```
1A4F     51  GSAQIKAHCK KVVAALVEAV NHIDDIAGAL SKLSDLHAQK LRVDPVNFKF
1FAM     51  GSAQIKAHCK KVAALVEAV  NHIDDIAGAL SKLSDLHAQK LRVDPVNFKF
*****  ** ***** ***** ***** *****
```

# Manipulating the Model



是将在窗口中显示的蛋白质结构图形在窗口中居中



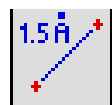
点击该图标后，可以保持蛋白质结构图形不旋转的情况下在显示窗口中移动蛋白质



点击该图标后，可以放大或者是缩小该蛋白质



点击该图标后，可以旋转该蛋白质结构图形，可以通过不同的角度清楚的观察蛋白质



是用来测量两个原子间的距离



用来测量三个相邻原子的角度



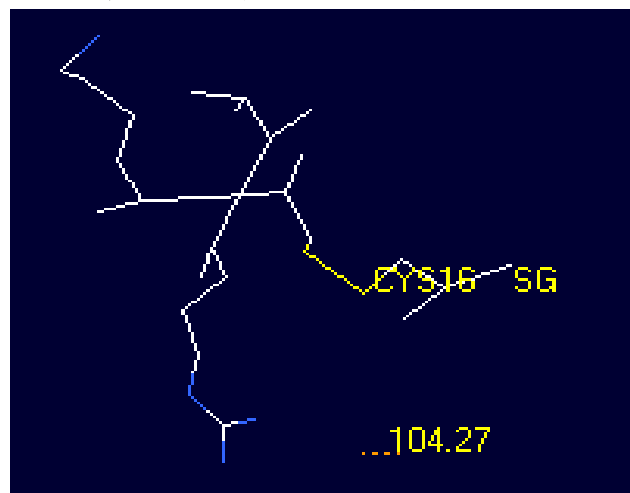
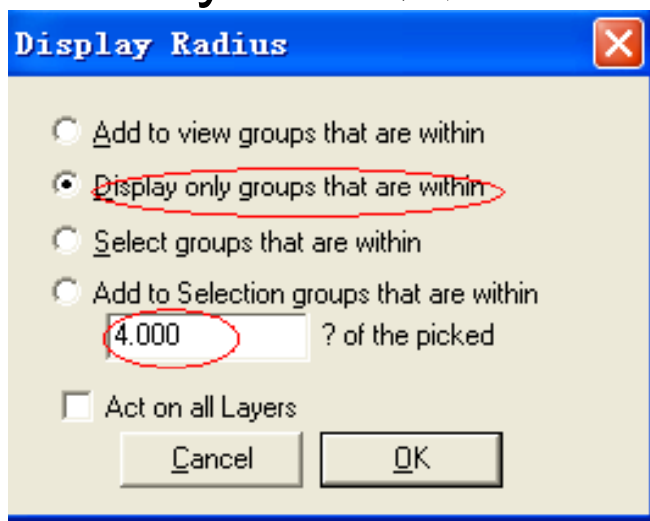
用来测量二面角

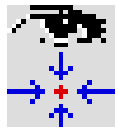


点击以后可以在所显示的蛋白质上查看某个氨基酸残基是什么，并且标出该氨基酸残基在蛋白质多肽中的位置

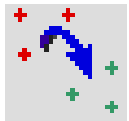


是以某个氨基酸残基为中心，显示在一定范围内的所有原子。以虎纹捕鸟蛛毒素（1QK6）为例，显示在 cys16 周围 4.000Å 范围之内内的所有氨基酸残基





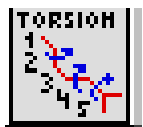
显示以某个所选定的氨基酸残基为中心的蛋白质多肽的结构图



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，可以点击三个相应的分子中的原子来进行叠加



可以应用这个工具进行对某一点的定点突变

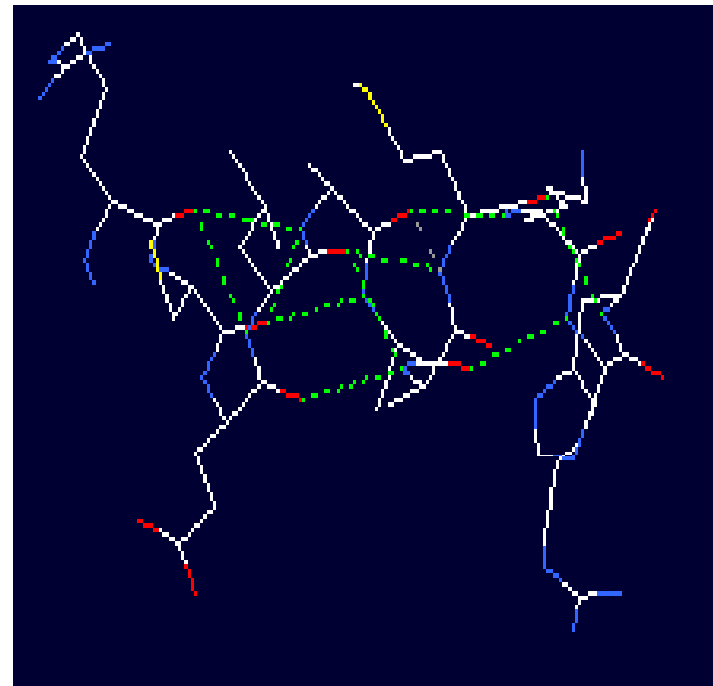
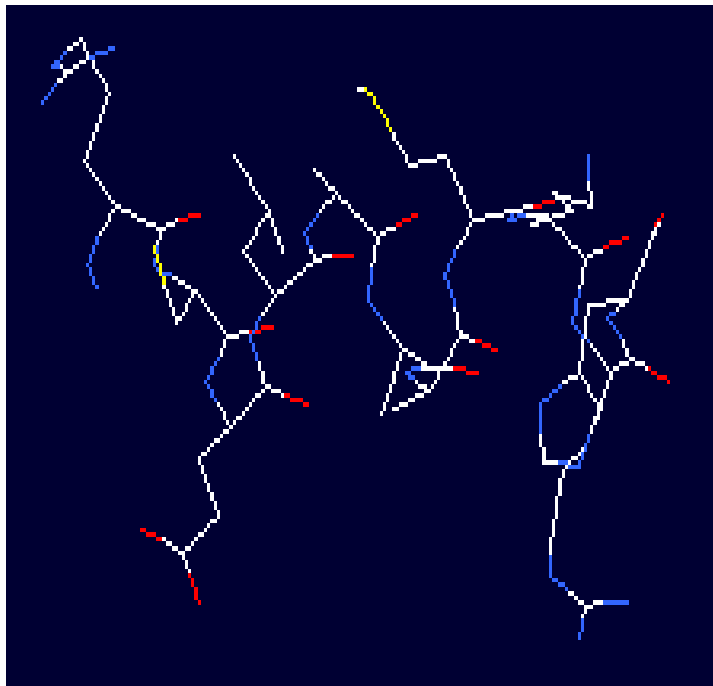


用来对所选的氨基酸残基的某一链进行旋转扭曲

关于mutate和torsion会在后面具体介绍

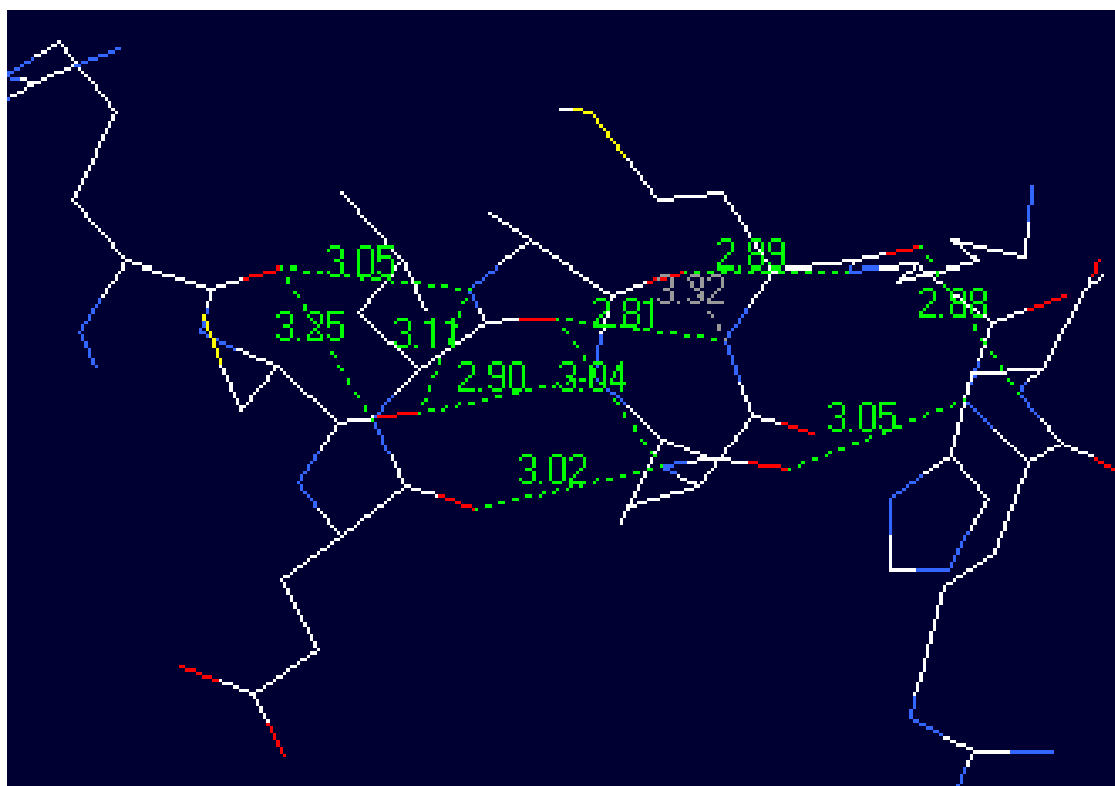
# Selecting and Displaying

选择Display-----show H-bonds （或者选择Layers Infos中的Hbnd）， H键就会以绿色的形式表现出来



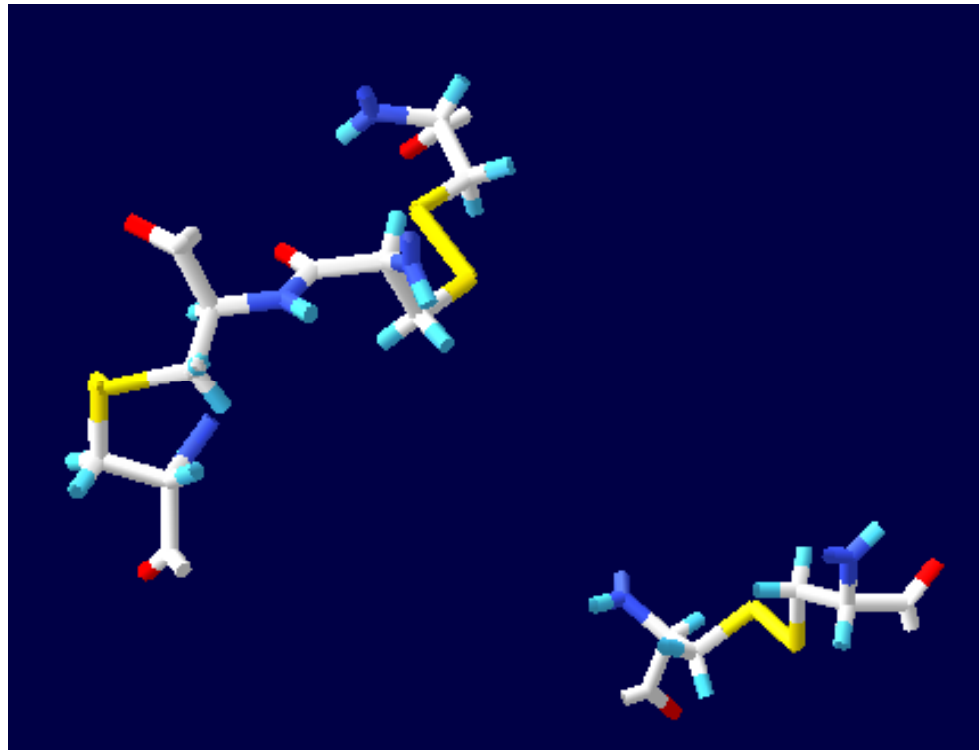



如果想进一步查看H键的长度，可以选择  
Display-----show H-bonds distances



蛋白质常见的20种氨基酸，如果想查看在蛋白质中想要的氨基酸，比如半胱氨酸（Cys），可以选择Select-----Group kind-----Cys(c) .

以1t1k.pdb为例，得到了3个Cys



- 
- **Group kind**中还有**ATCGU**（这是针对核苷酸序列的）按照同样的方法，也能得到想要的部分
  - **Select-----Inverse selection** 是反向选择：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
  - **Select-----Group Property** 中有4个选项：**Select Basic amino acids ;Select Acidic amino acids; Select Polar amino acids ;Select non Polar amino acids**
  - (它们分别是选择碱性、酸性、极性、非极性氨基酸)

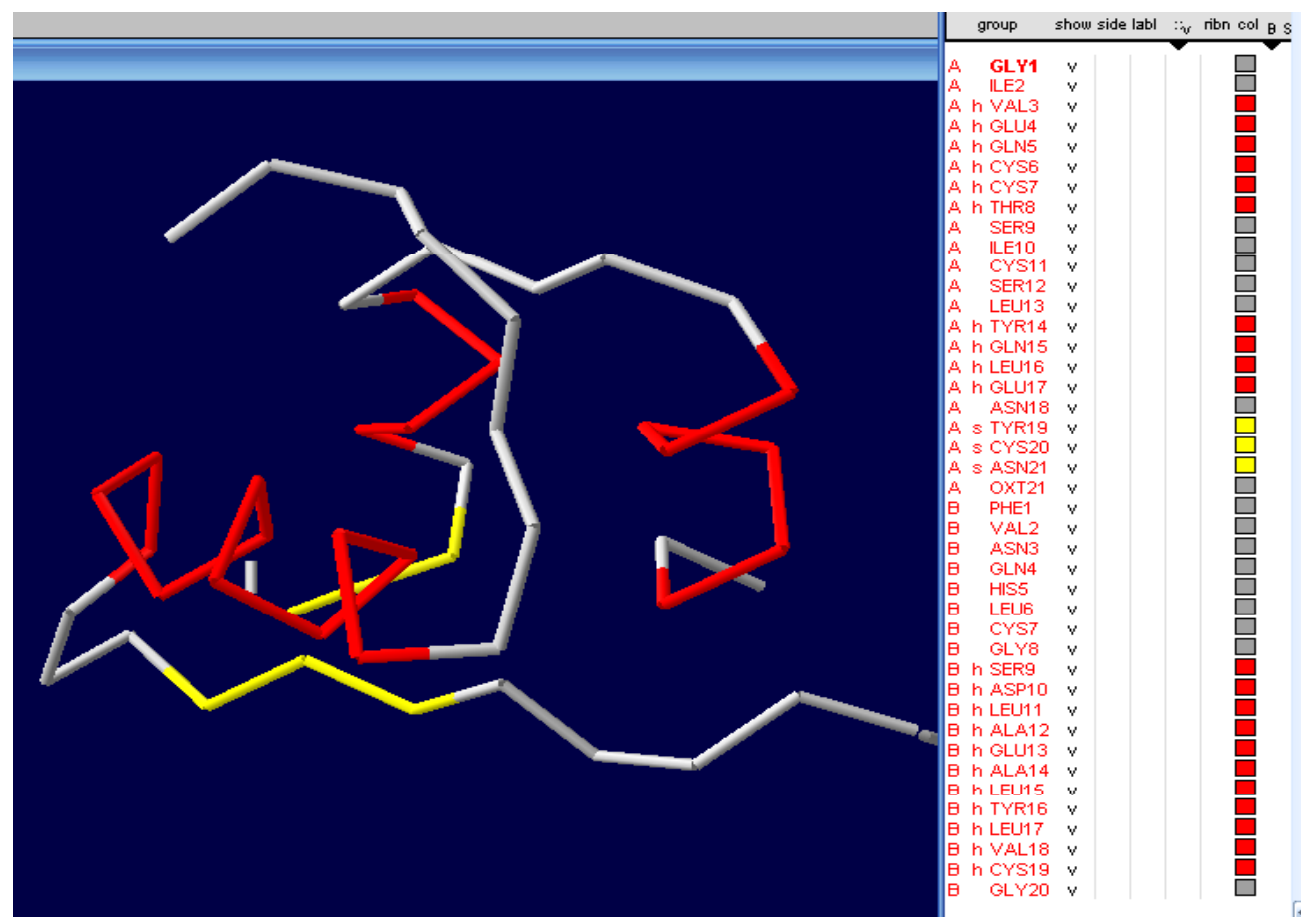


# Coloring

- **Swiss-PdbViewer**提供了多种对模型染色的方式。在分子模拟中，不同的颜色可以用生动、直观的形式来展示分子结构和化学结构的不同特点，帮助理解分子的复杂结构。
- 以1t1k.pdb为例
- (1t1k,human insulin mutant His-B10-Asp Val-B12-Ala Pro-B28-Lys Lys-B29-Pro )

# Color-----Secondary Structure

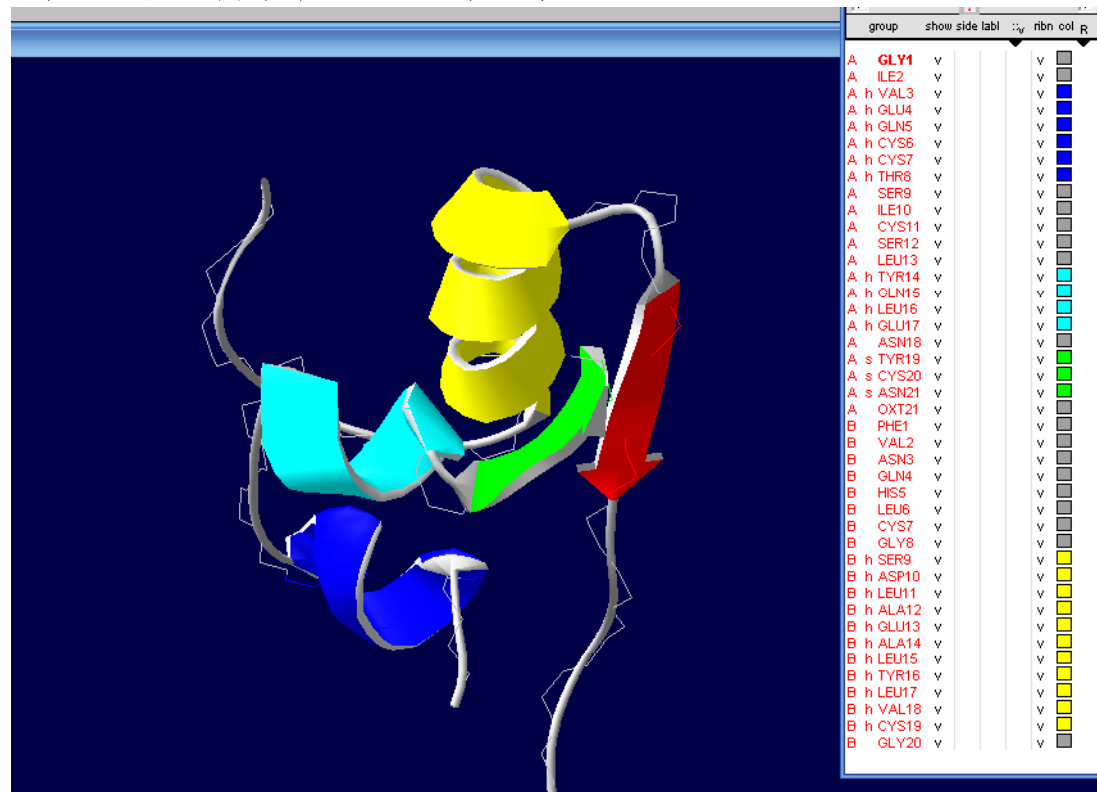
将螺旋部分 (**helix**) 标记为红色, 折叠部分 (**strands**) 标记为黄色, 无规卷曲 (**coil**) 标记为灰色如图



1t1k

# Color--- Secondary Structure Succession

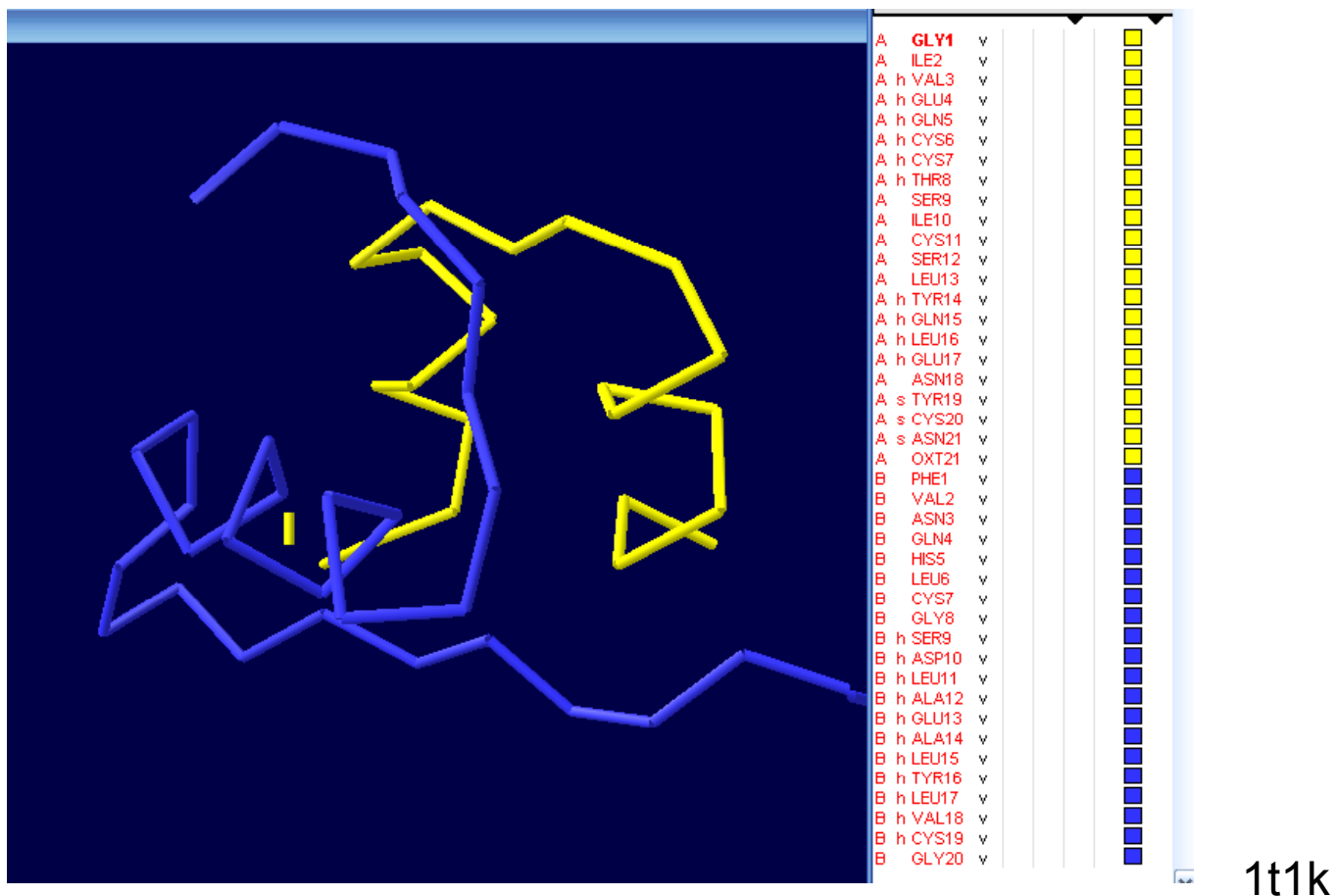
- **Secondary Structure Succession**能将整个序列的每个二级结构用不同的颜色显示出来，第一个二级结构用紫色，最后一个用红色，中间的二级结构用在可见光谱（**400nm-700nm**）的各种不同的颜色显示出来。这样可以更清楚的看到从氨基端到羧基端二级结构间的顺序。



1t1k

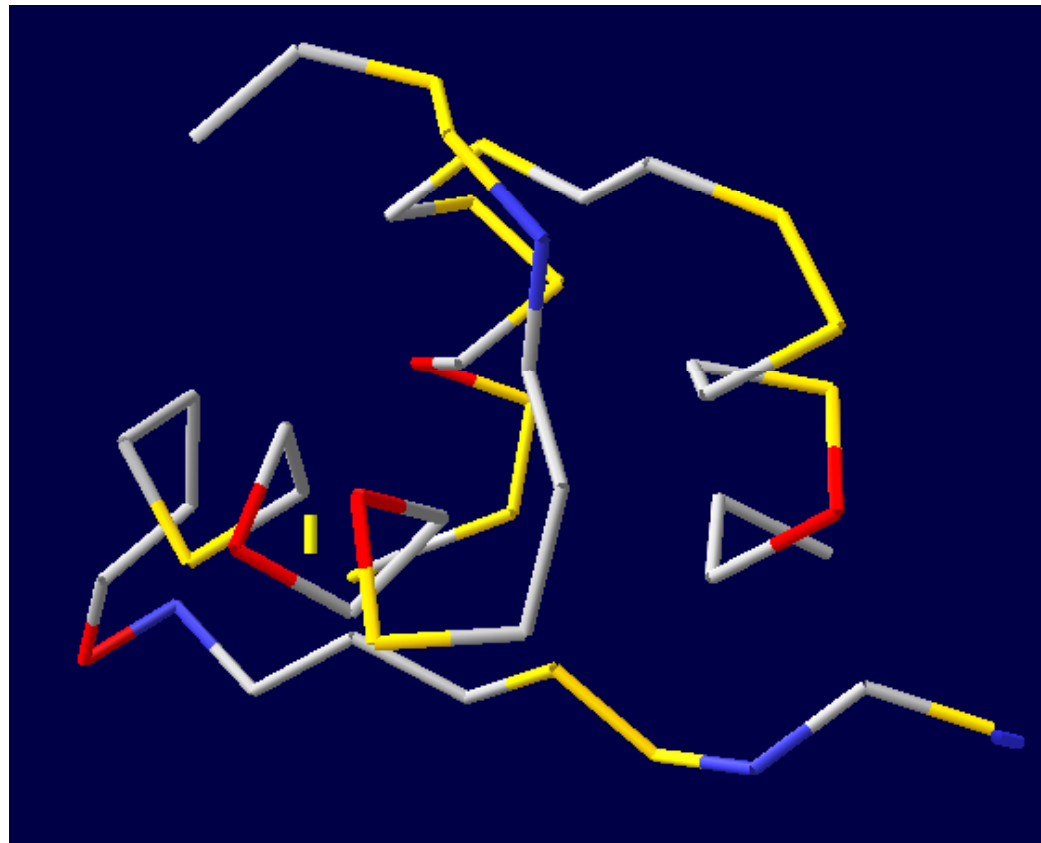
# Color-----by Chain

- 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（1t1k .pdb中一条alpha链和一条beta链）黄色的表示alpha链，蓝色的表示beta链。



# Color-----by Type

- 对结构模型染色的依据是残基的化学类型：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

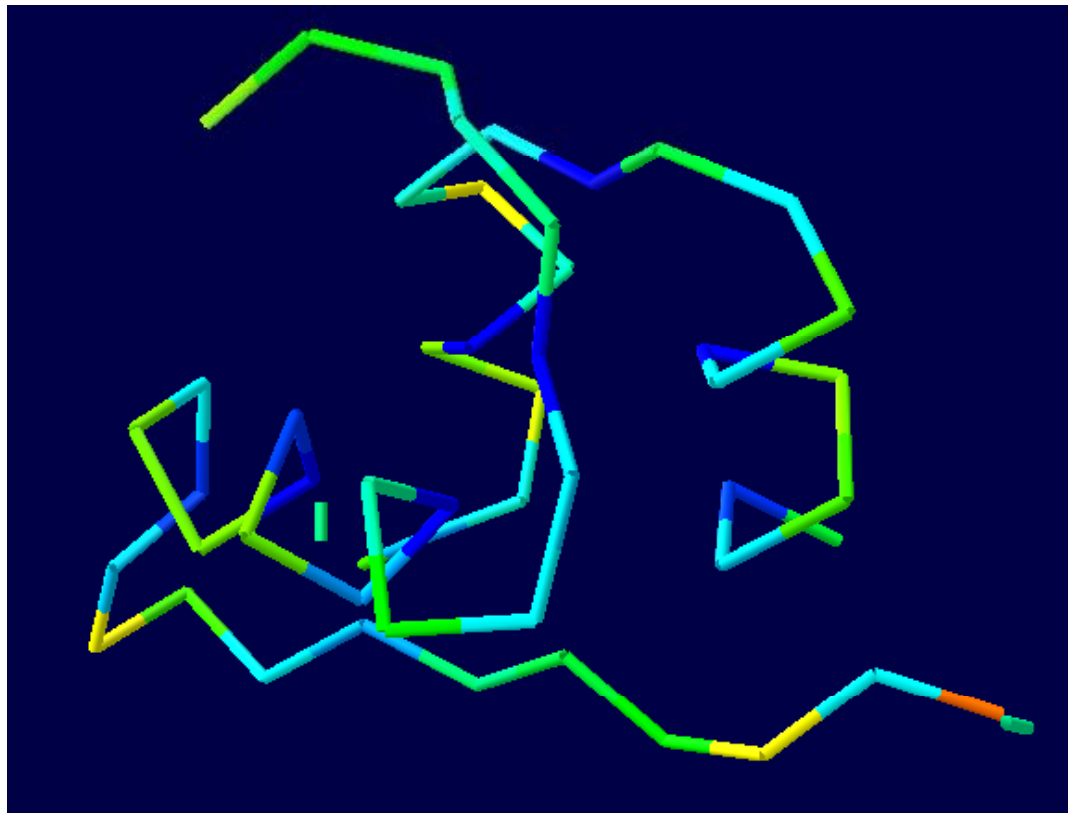


1t1k



# Color-----by Accessibility

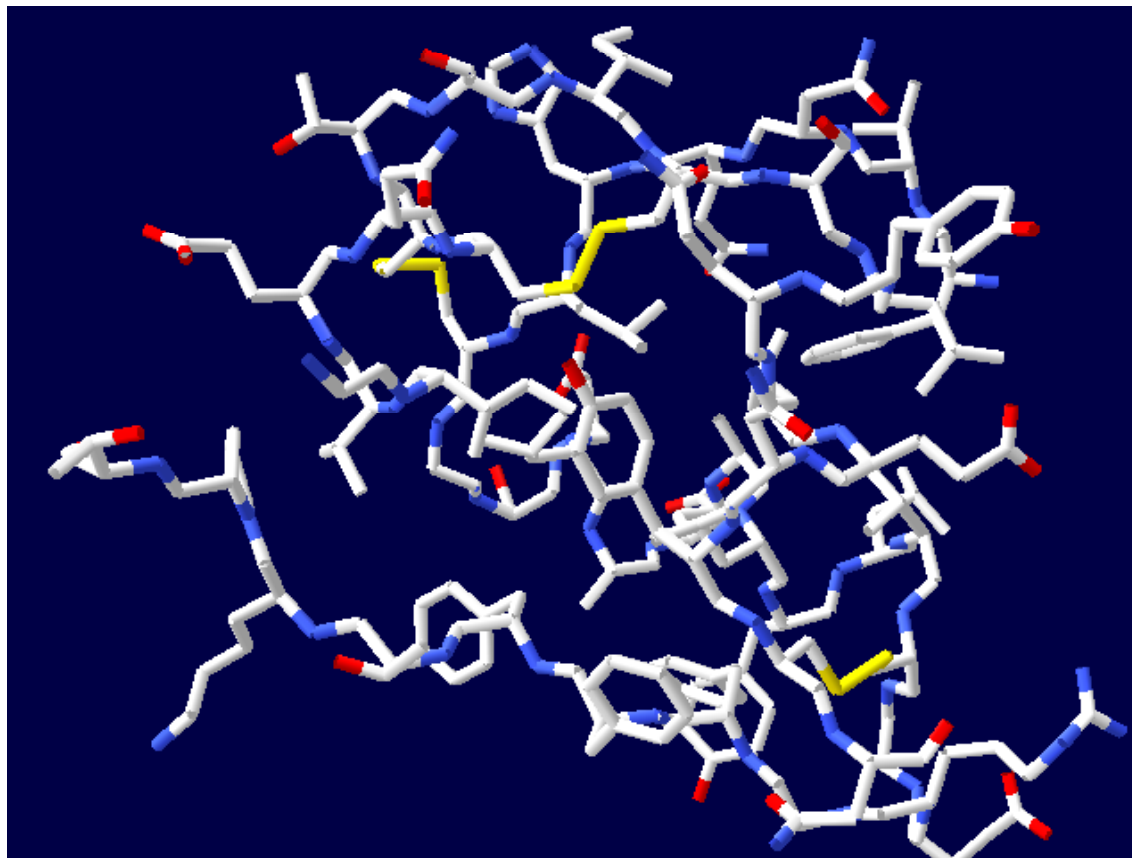
- 在结构中每个氨基酸残基与周围溶剂接触的程度多少决定了残基的颜色。与溶剂接触最少的是蓝色，完全露在分子表面的是红色，接触介于二者之间的，用蓝色和红色中间的颜色表示



1t1k

## Color -----by CPK

- 将所有残基集团的颜色恢复到标准状态：C原子用白色；O原子用红色；N原子用蓝色；S原子用黄色表示

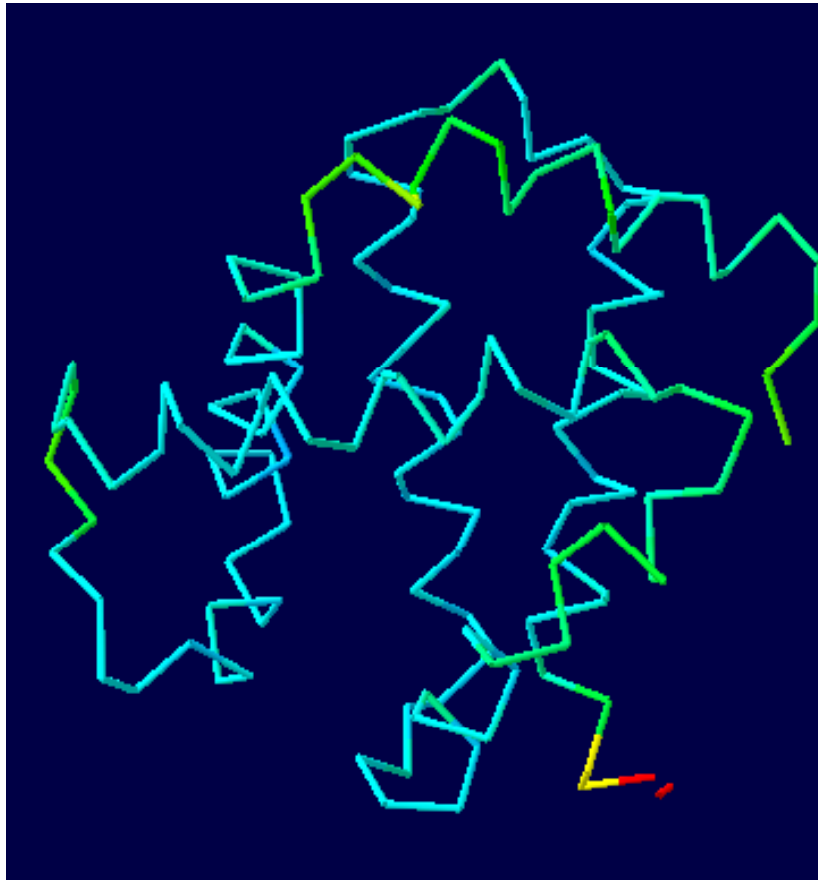
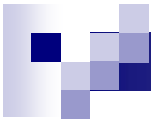


1t1k

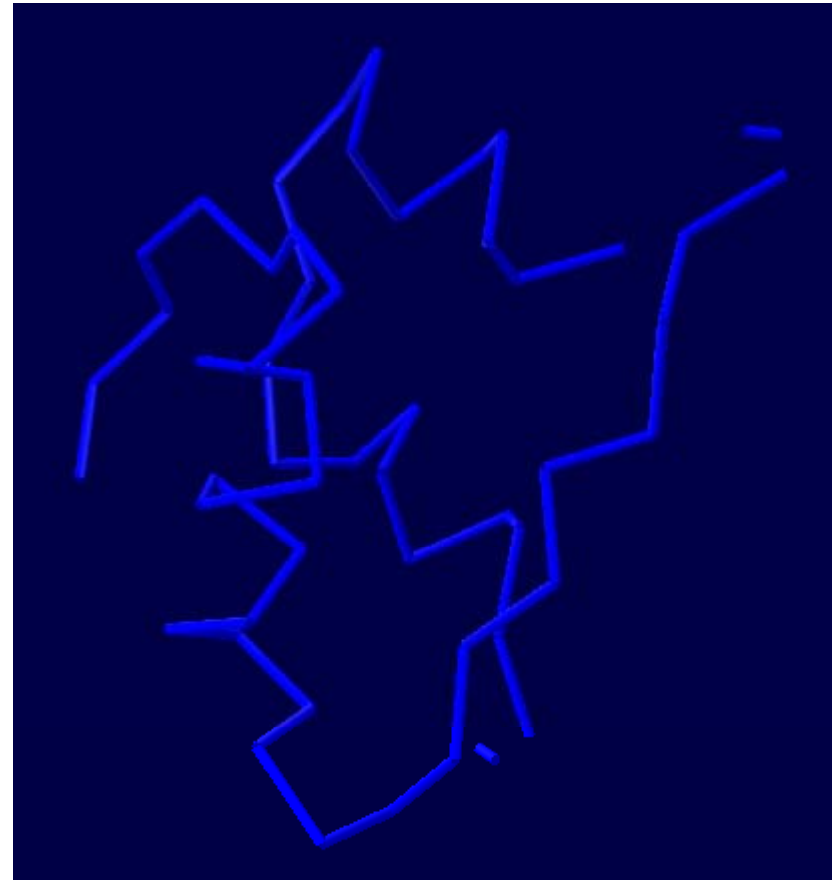


## Color----- B Factor

- 模型中的颜色取决于**B**因子（或称之为温度因子）。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。



1a4f- $\alpha$



1t1k

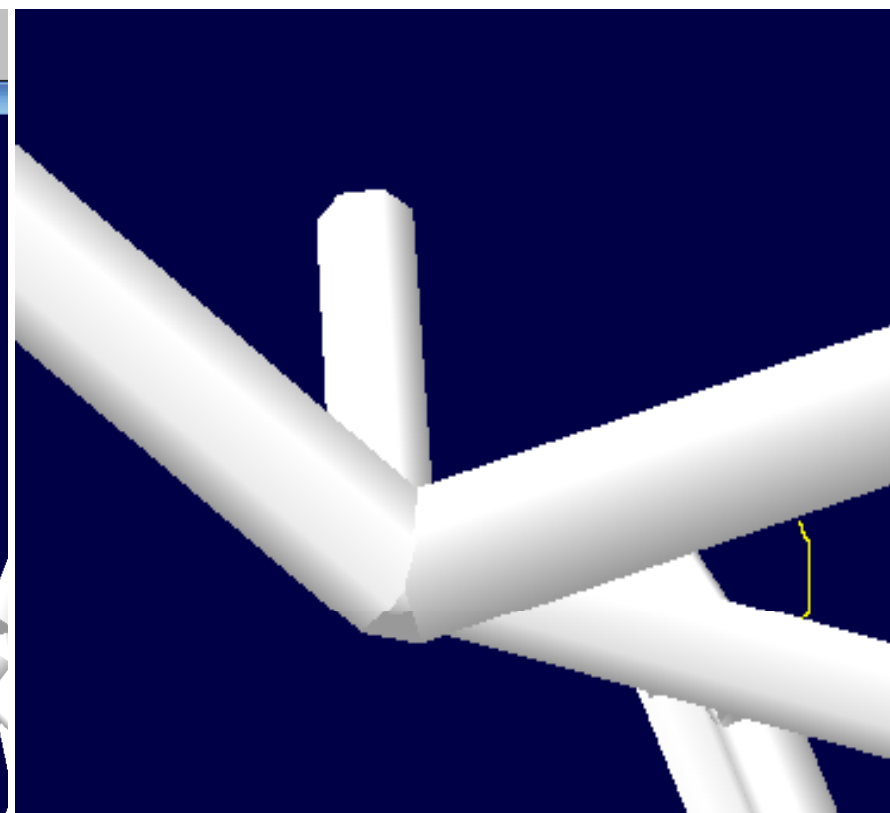
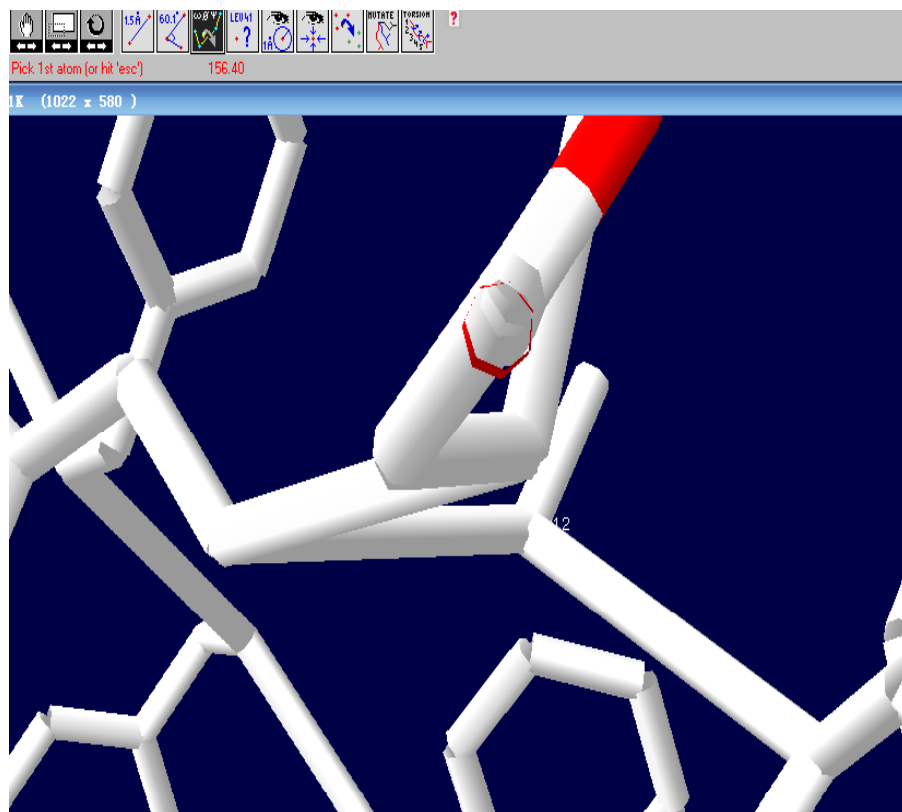



# Measuring and Labeling

- 在分子结构中，将分子结构放置到合适的位置，可以测量**2**点之间的距离、相邻**3**个原子的角度以及相邻**4**个原子的二面角。同时可以在图上标注出来。
- **1t1k.pdb** 为例来说明二面角的测量

## 选取beta链中的12Ala

Ctrl + , 依次选取相邻的4个原子，二面角 **156.40°**





如果你发现测量的数据不是你想要的，可以清除,重新测量:

选择: **Display-----Label kind-----Clear**  
**User Labels** (快捷键” Alt”+”-”)



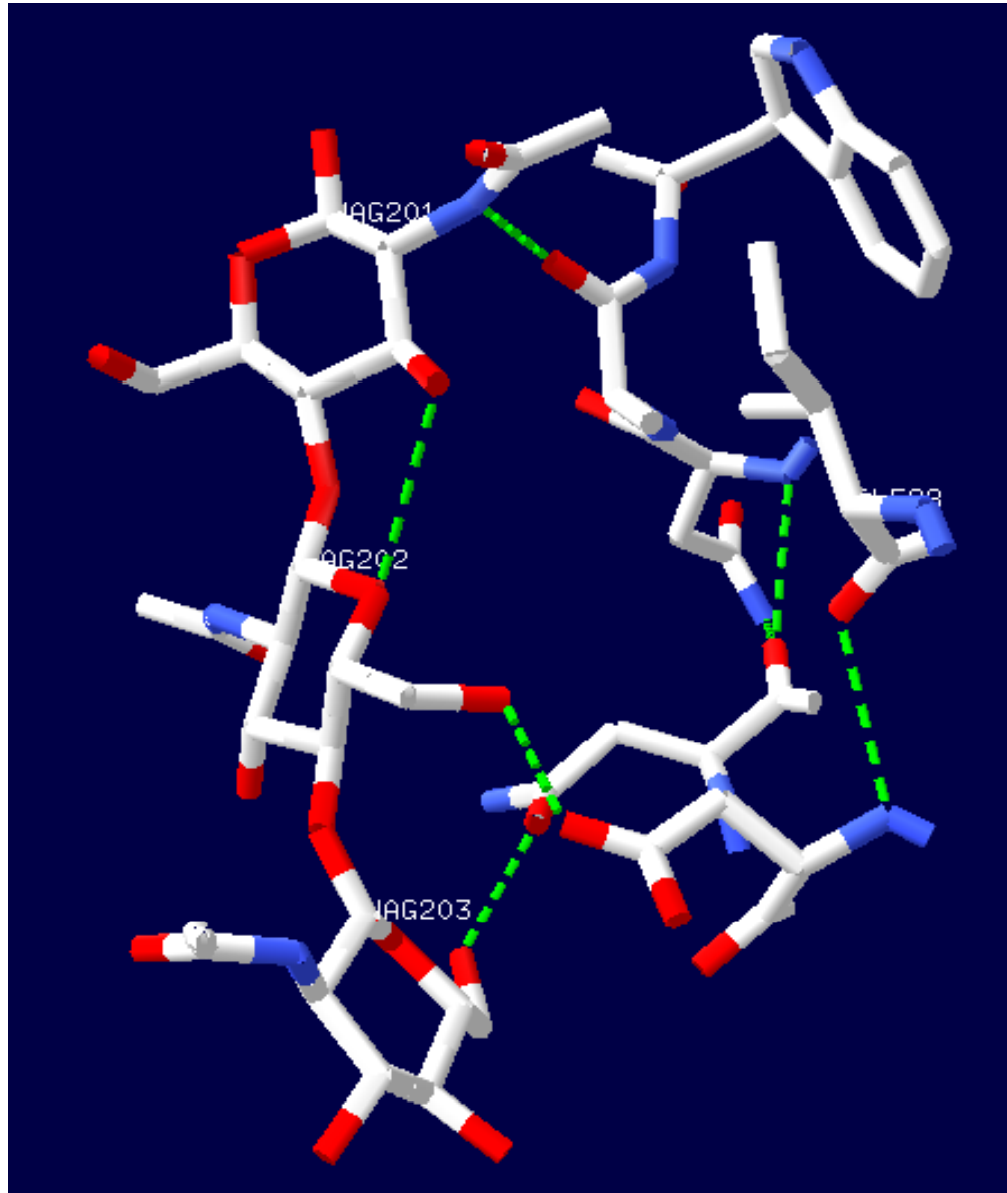
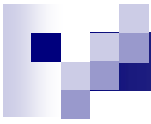
# Mutating and Changing Side-Chain Conformations

- 在这一部分里，我们以1HEW为例，将98ILE突变为98GLN，然后再研究是否这个新的残基会与tri-NAG形成多的H-bond
- 1HEW（鸡蛋白溶菌酶HEN EGG WHITE LYSOZYME）



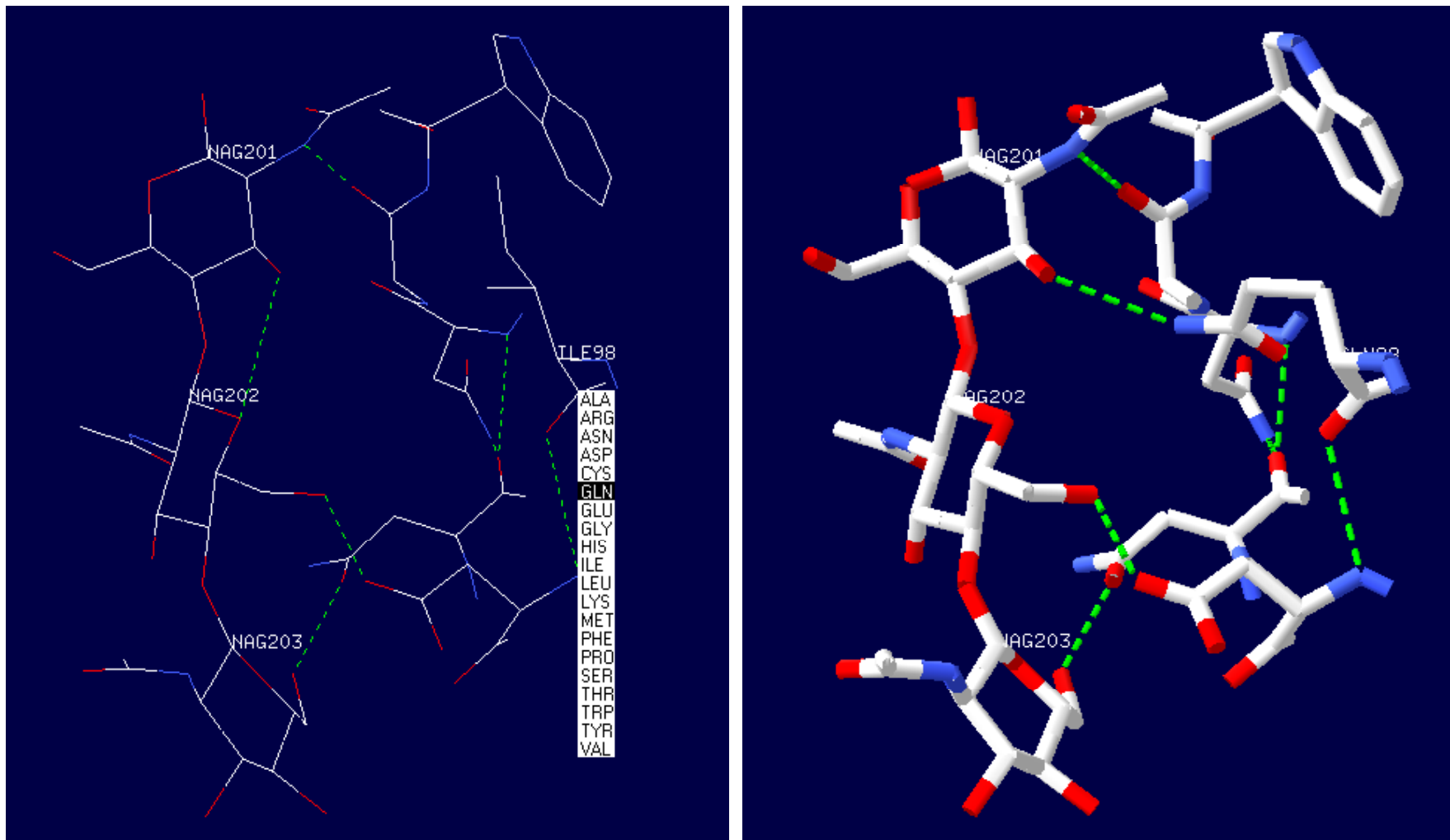


- .
- display and center the complete model 1HEW in CPK colors
- display H-bonds
- restrict the display to tri-NAG and groups within 7 angstroms of tri-NAG
- display only H-bonds to tri-NAG




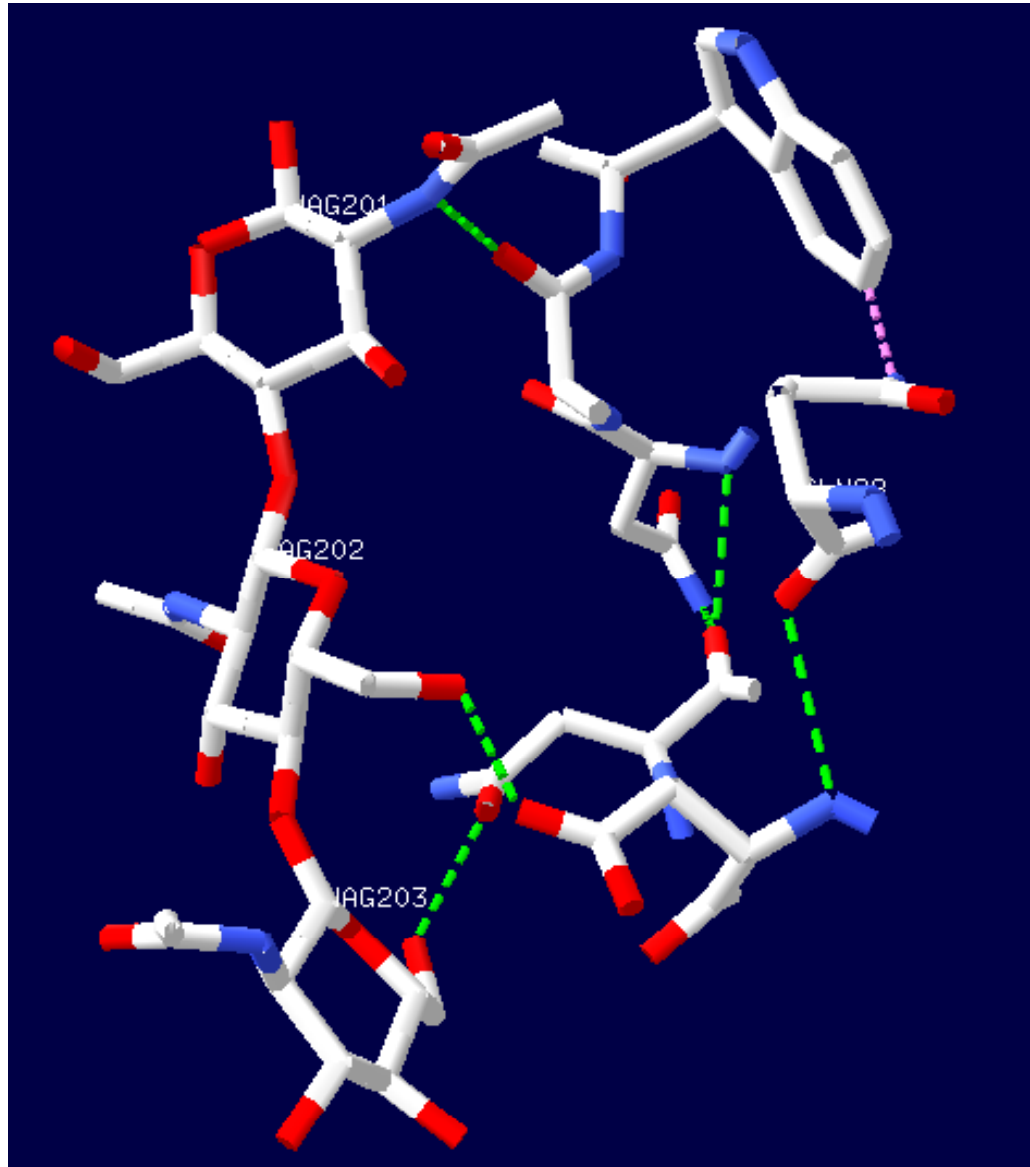
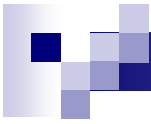
98ILE也在显示范围内，并且它的侧链朝向tri-NAG的方向，所以可以作为蛋白质工程改造的备选因子

选择mutate, 点击98ILE上的任一原子



GLN具有长的侧链，有接受或贡献H-bond的能力

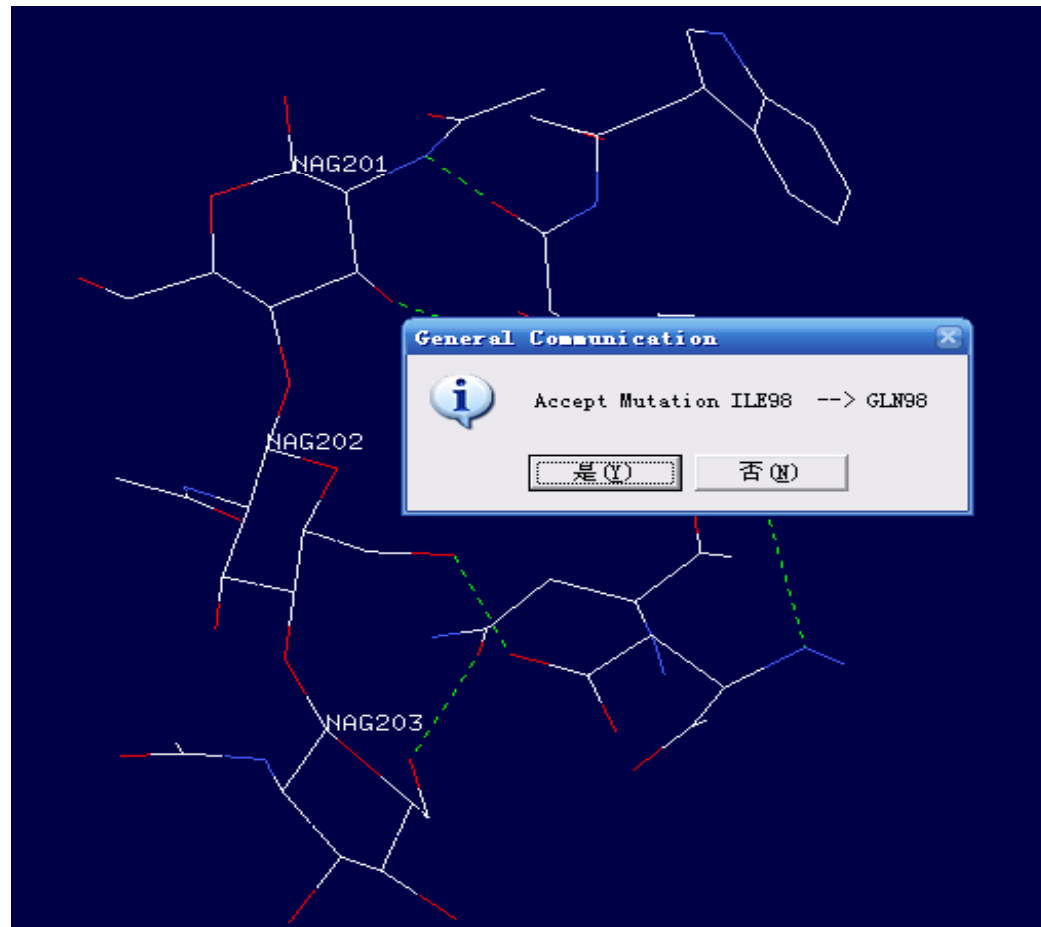
- 
- 检测侧链可能形成的不同构象
  - 可以通过键盘上的\*控制，也可以点击**mutate**按钮下的箭头
  - 每次点击，**Deep View**都会显示一个不同的构象
  - **粉色虚线**表示可能与其他原子产生碰撞
  - **绿色虚线**表示会形成潜在的**H-bond**
  - 要找到一种构象既可与**tri-NAG**形成**H-bond**，也不会与其他残基发生碰撞



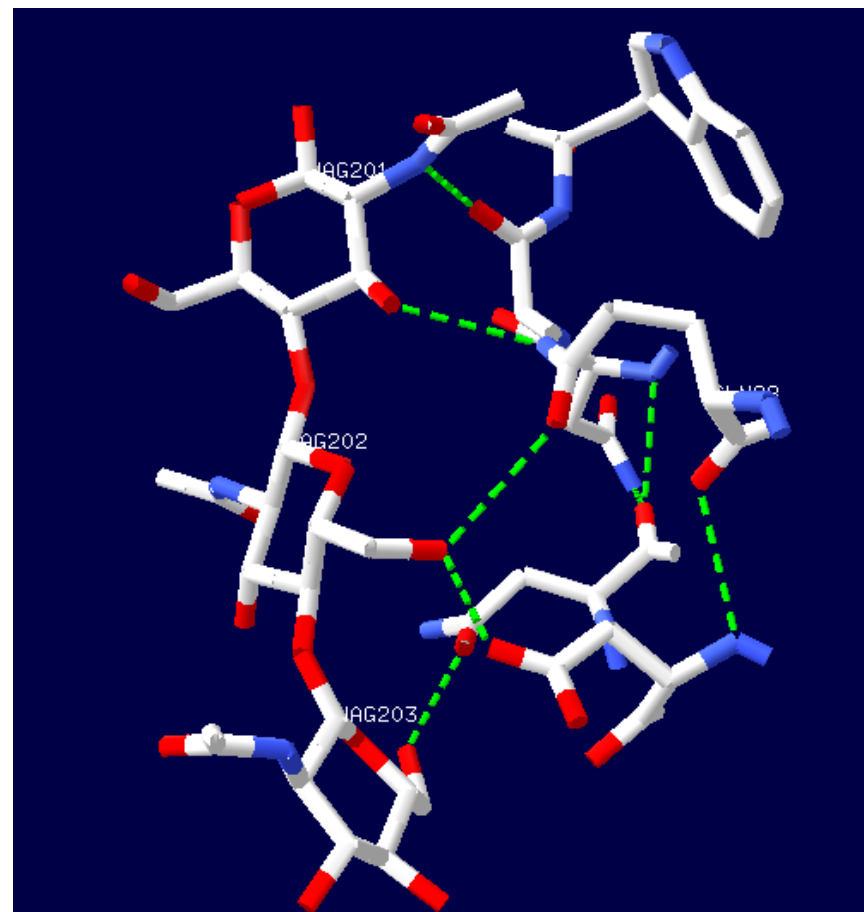
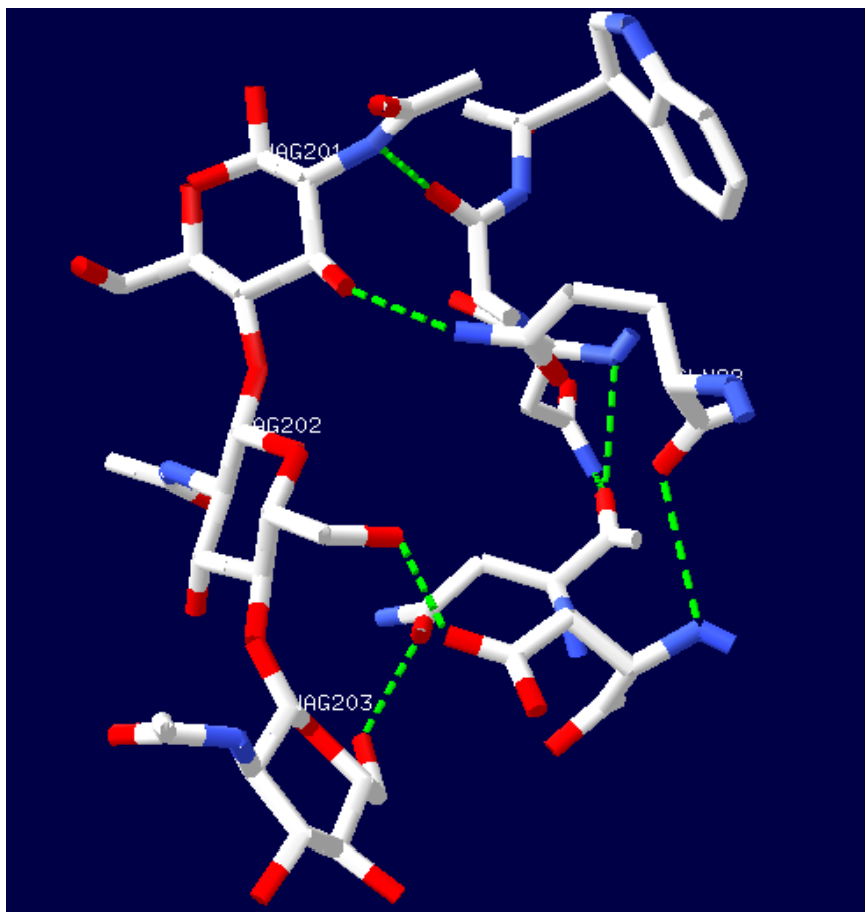
注意这时**mutate**  
按钮仍然是黑色

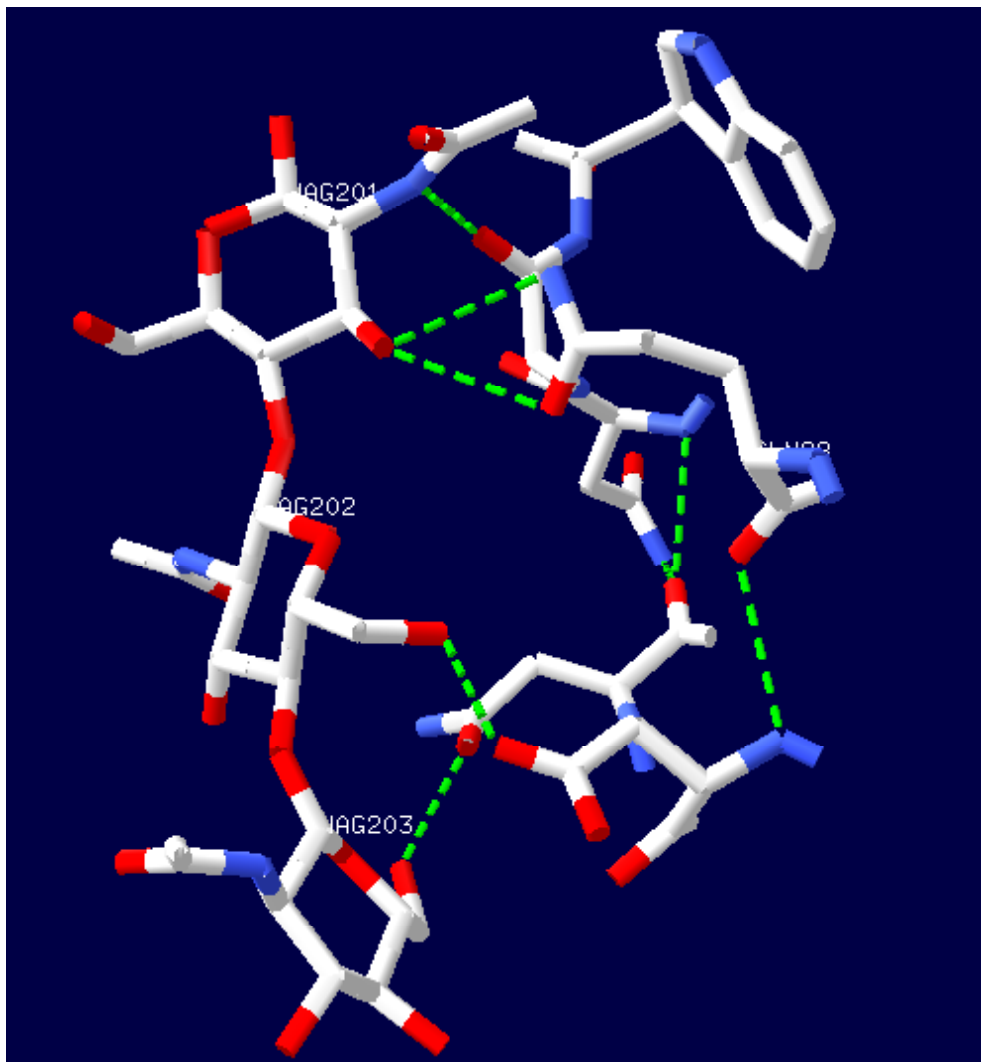


Click the button again and click **Accept** to keep the new GLN residue in the conformation you selected.

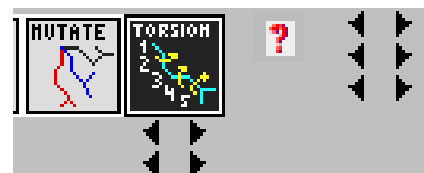


改变构象看新的侧链是否会与其它的原子相连  
选择**TORSION**点击**98GLN**的任一原子

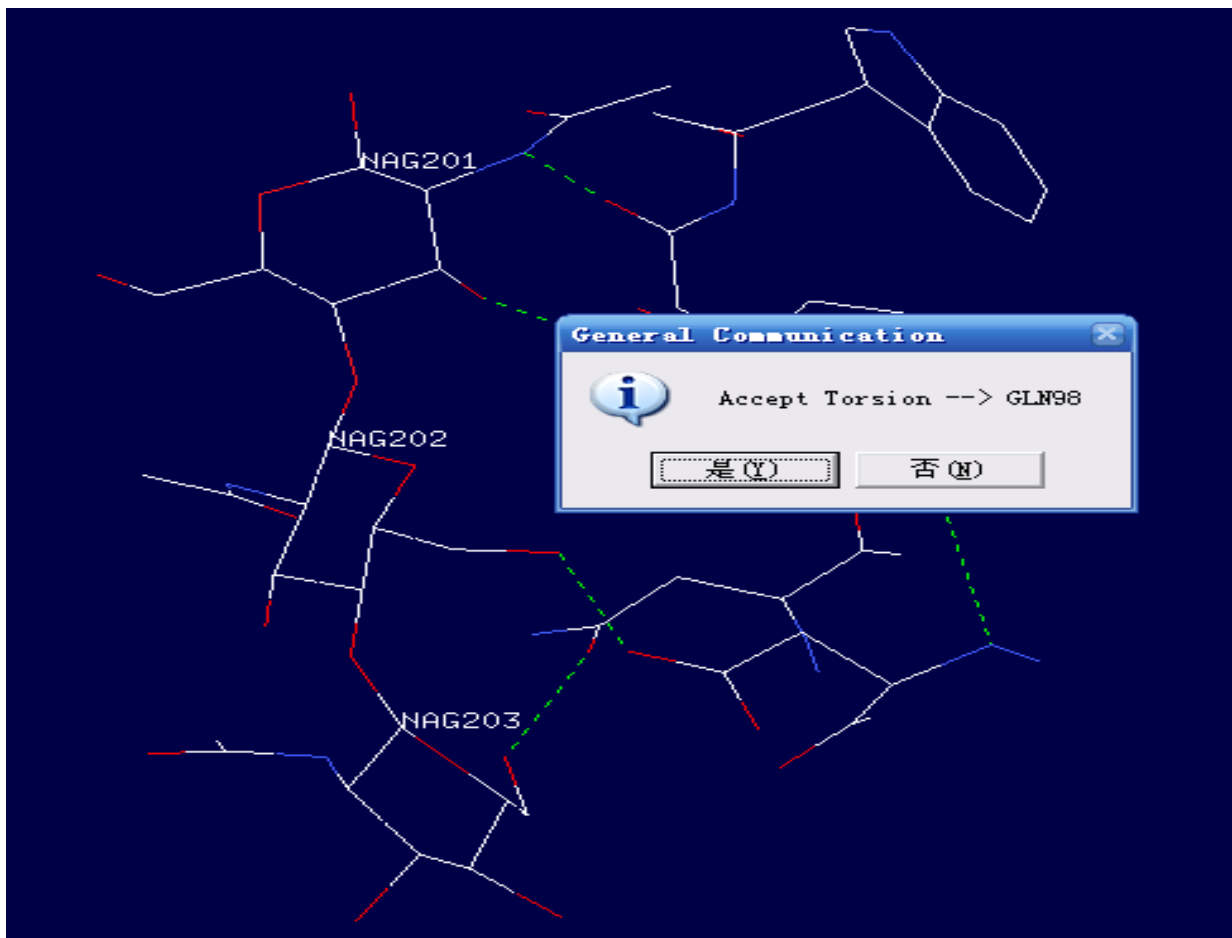





注意这时**TORSION**  
按钮也为黑色



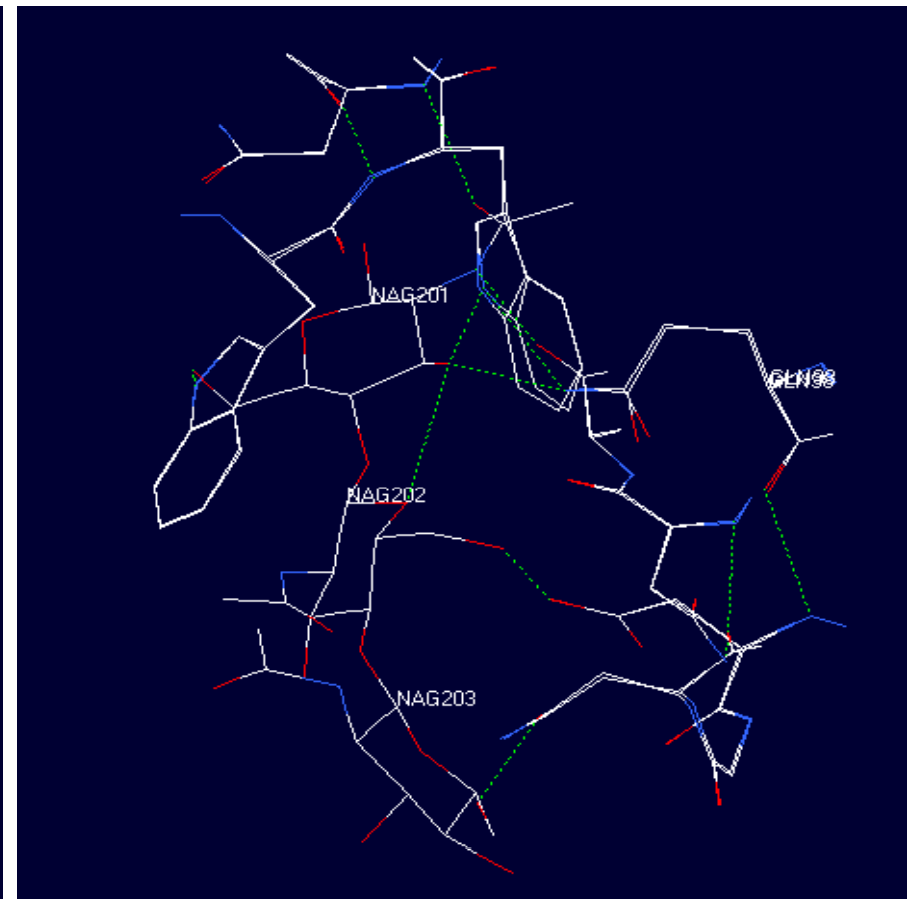
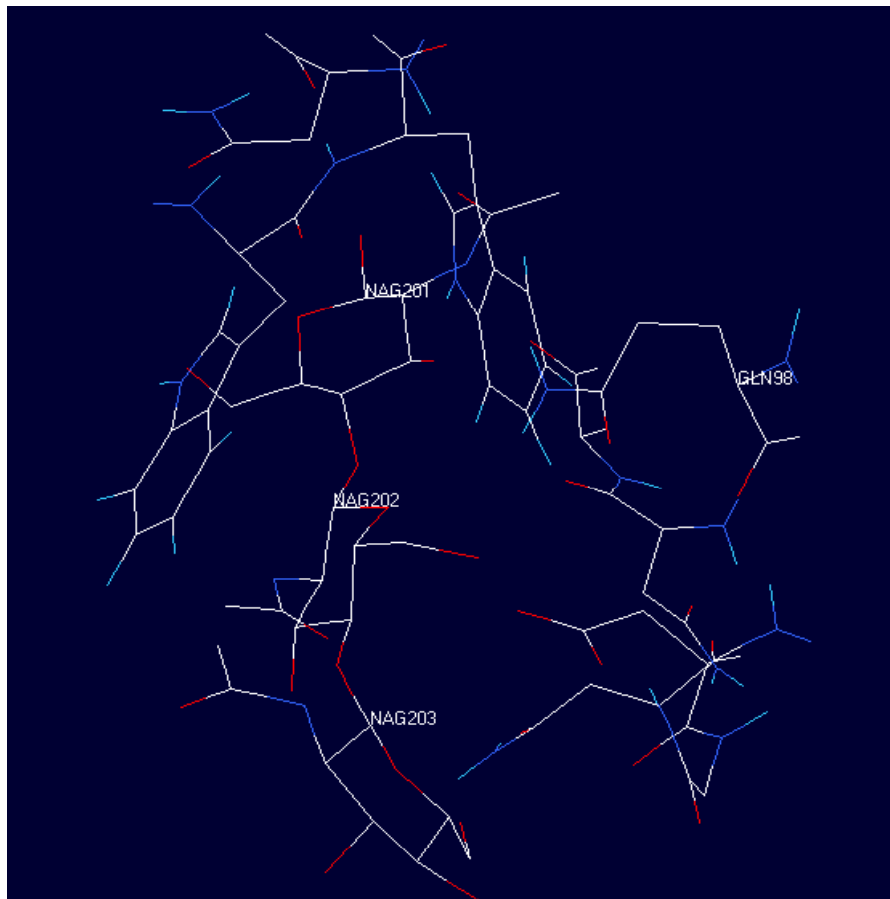




- 
- 注意：在使用**MUTATE**时，**Deep View**只显示实际构象，但使用**TORSION**时，不会检查改造过的侧链构象是否真实，会产生化学上不可能的构象
  - 实际应用上，要对模型进行能量最小化，来消除不合理的构象
  - **Deep View**通过对**AMBER,CHARMm,GROMOS**程序递交能量最小化请求，进行模型能量最小化

# Select: Visible Groups

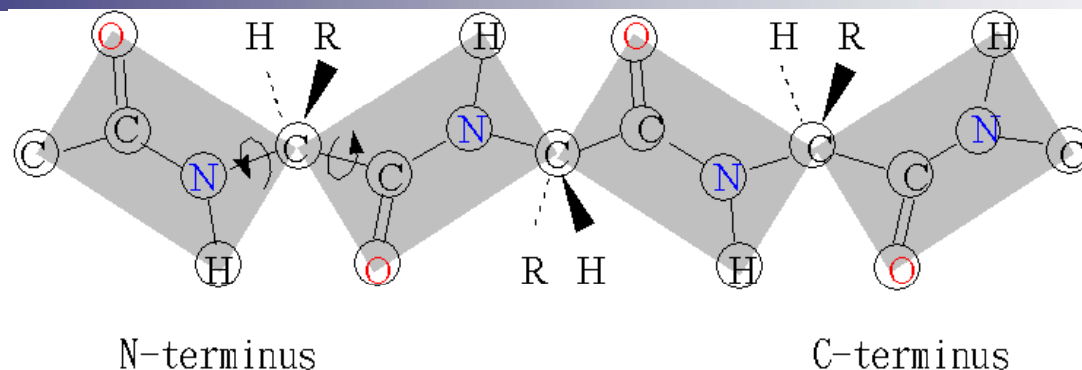
## Tools: Energy Minimization...





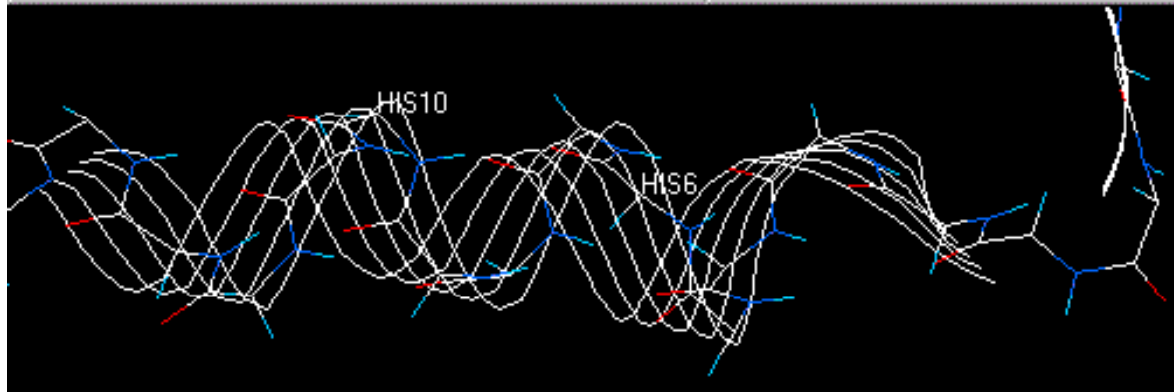
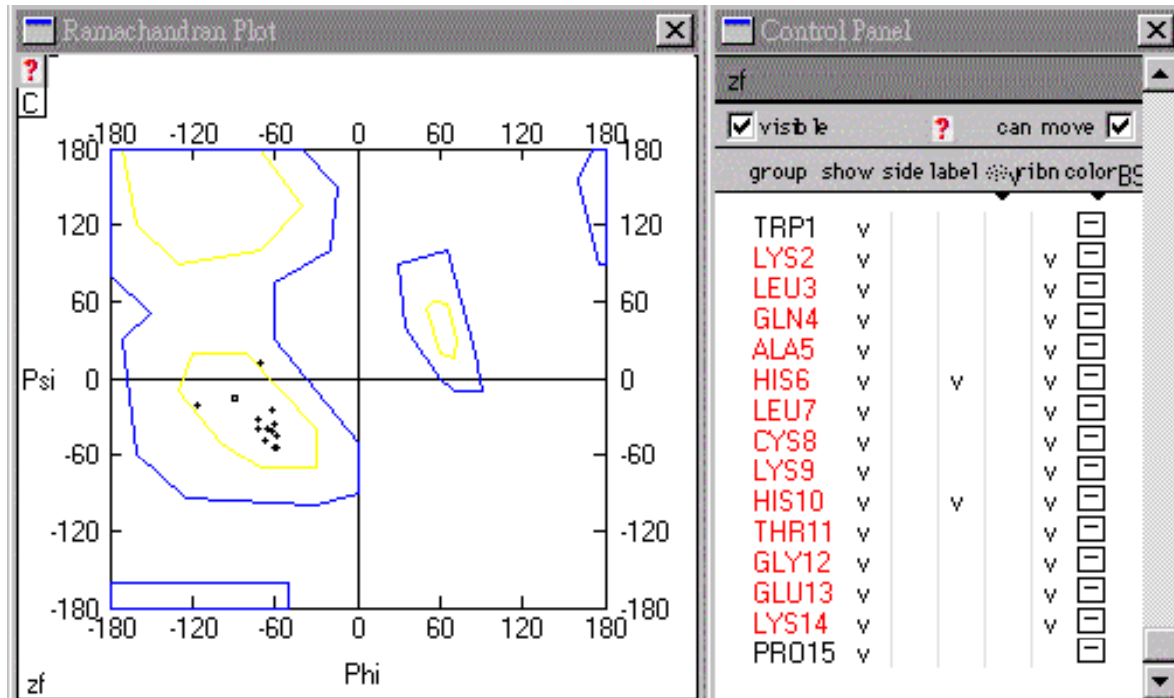
## Using a Ramachandran Plot

- Ramachandran Plot( $\alpha$ -碳与酰胺平面交角图), 通过它可以了解相关残基的**phi**和**psi**角的信息。也可以改变模型中的构象角, 来模拟构型。

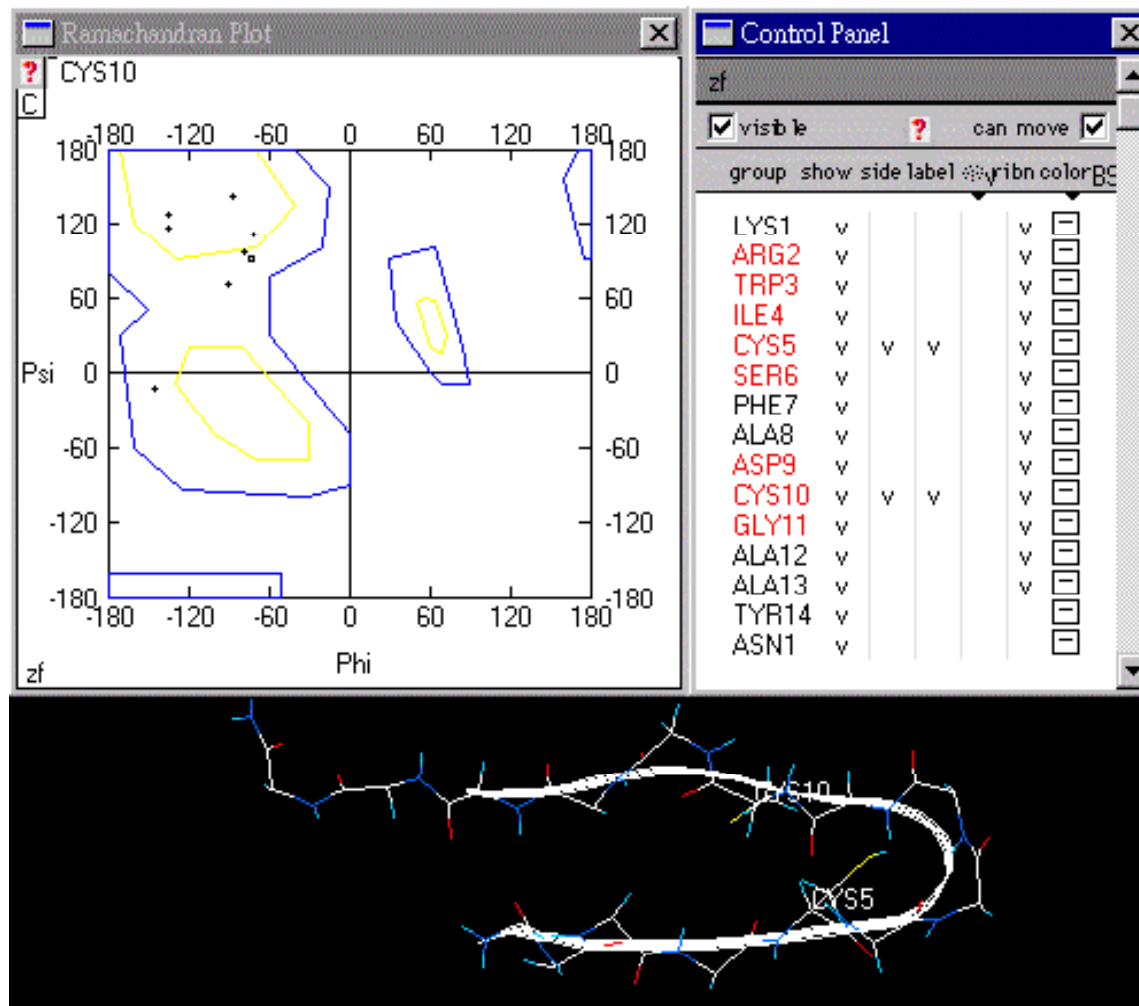


- 理论上 $\phi$ , $\psi$ 这两个角度可以自由旋转，可实际上在某些特定的角度可能有空间上的障碍，**Ramachandran Plot**不考虑能量的问题，其主要目的是显示哪些角度的组合是空间上所允许的。这些在空间上允许出现的区域以蓝色与黄色等高线表示。若将已知的蛋白质结构中 $\alpha$ -螺旋的角度绘在图上，大部分的点都出现在第三象限的黄色区域中；而 $\beta$ -链的数据集中在第二象限的黄色区域中。
- 一方面显示这些结构都落在没有空间障碍的区域，另一方面也显示这些结构是重复的，一连串的氨基酸都有相似的结构，在这两种特别的二级结构中，任何R-基都不会碰撞在一起。

# alpha-helix



# beta-strand

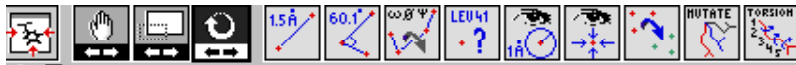




以**1t1k**为例，这个胰岛素突变体中有**3个 helices**，**2个 strands**

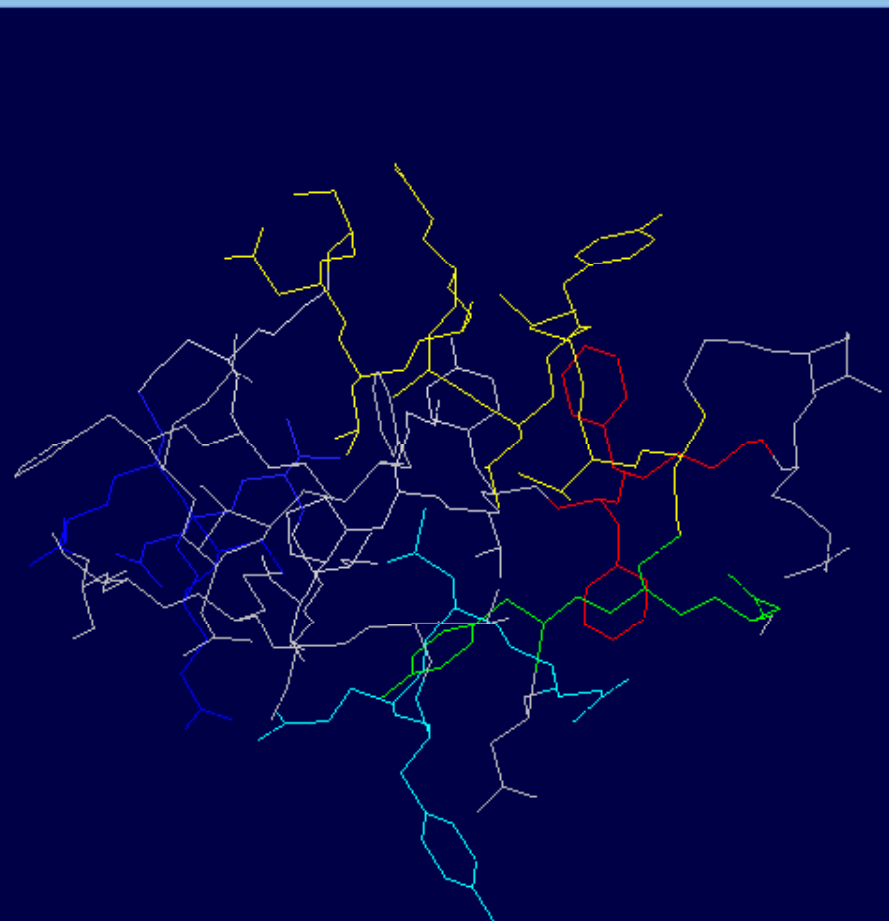
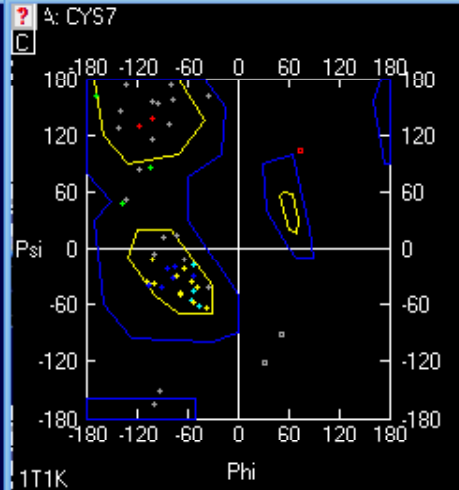
- 打开**1t1k**----**select**----**all**
- 然后**windows**----**show ramachandran plot**, 再在 **color** 中选择 **color by secondary structure succession**






Move All

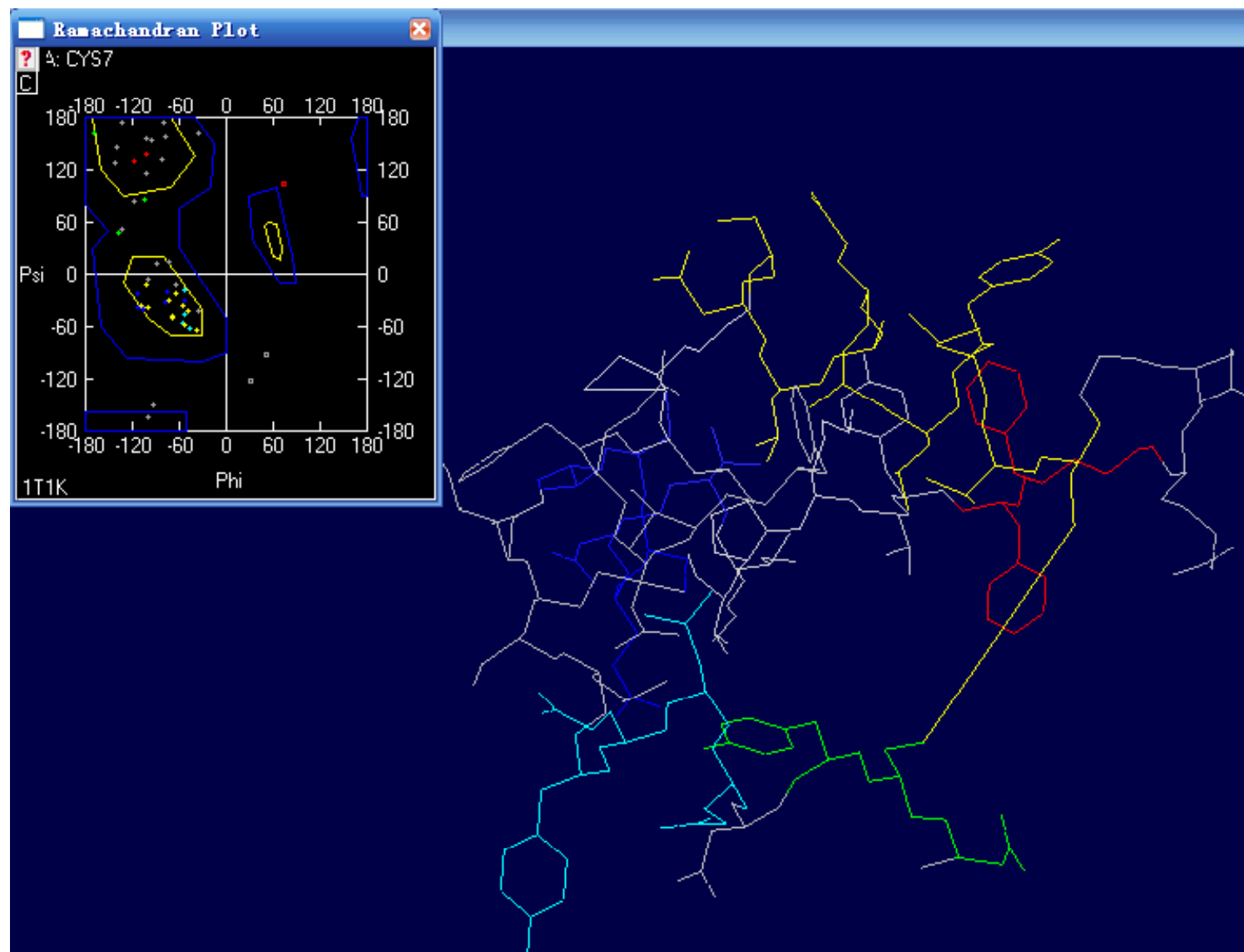
### Ramachandran Plot



1T1K				
<input checked="" type="checkbox"/> visible	<input checked="" type="checkbox"/> can move			
group	show side labl			
A	GLY1	v	v	
A	ILE2	v	v	
A	h VAL3	v	v	
A	h GLU4	v	v	
A	h GLN5	v	v	
A	h CYS6	v	v	
A	h CYS7	v	v	
A	h THR8	v	v	
A	SER9	v	v	
A	ILE10	v	v	
A	CYS11	v	v	
A	SER12	v	v	
A	LEU13	v	v	
A	h TYR14	v	v	
A	h GLN15	v	v	
A	h LEU16	v	v	
A	h GLU17	v	v	
A	ASN18	v	v	
A	s TYR19	v	v	
A	s CYS20	v	v	
A	s ASN21	v	v	
A	OXT21	v	v	
B	PHE1	v	v	
B	VAL2	v	v	
B	ASN3	v	v	
B	GLN4	v	v	
B	HIS5	v	v	
B	LEU6	v	v	
B	CYS7	v	v	
B	GLY8	v	v	
B	h SER9	v	v	
B	h ASP10	v	v	
B	h LEU11	v	v	
B	h <b>ALA12</b>	v	v	
B	h GLU13	v	v	
B	h ALA14	v	v	
B	h LEU15	v	v	
B	h TYR16	v	v	
B	h LEU17	v	v	
B	h VAL18	v	v	
B	h CYS19	v	v	
B	GLY20	v	v	

- 
- 点击ramachandran plot使之激活，将鼠标移到图的一个点上，残基的名字和数字就会显示在左上角。
  - 中间的黄色区域内显示的点是helices,左上侧的区域内显示的是beta构型的strands。
  - 当移动区域中的点时，蛋白结构中的相应的残基连接的结构也会发生移动。水平拖动点时，改变的是phi角（ $(n-1)C-N-CA-C(n)$ ） or  $CA-N$ ,垂直拖动点时，改变的是psi角（ $N-CA-C(n)-N(n+1)$ ） or  $CA-C$ ,这样就可以在模拟模型中调整构象。

# 水平拖动Cys7





## 参考文献:

- Cheetham, J.C., Artymiuk, P.J., Phillips, D.C. (1992) Refinement of an enzyme complex with inhibitor bound at partial occupancy. Hen egg-white lysozyme and tri-N-acetylchitotriose at 1.75 Å resolution. *J.Mol.Biol.* **224**: 613-628
- Huang, K., Xu, B., Hu, S.Q., Chu, Y.C., Hua, Q.X., Qu, Y., Li, B., Wang, S., Wang, R.Y., Nakagawa, S.H., Theede, A.M., Whittaker, J., De Meyts, P., Katsoyannis, P.G., Weiss, M.A. (2004) How Insulin Binds: the B-Chain alpha-Helix Contacts the L1 beta-Helix of the Insulin Receptor. *J.Mol.Biol.* **341**: 529-550
- G.N. Ramachandran, C. Ramakrishnan & V. Sasisekharan (1963): *Stereochemistry of polypeptide chain configurations*. In: *J. Mol. Biol.* vol. 7, p. 95-99. [PMID 13990617](#)
- Jin Xiong , Essential Bioinformatics
- <http://binfo.ym.edu.tw/bch/pro/ramachandran.htm>
- [http://en.wikipedia.org/wiki/Ramachandran\\_plot](http://en.wikipedia.org/wiki/Ramachandran_plot)
- <http://www.usm.maine.edu/~rhodes/SPVTut/>