

Белоктардың 3Д құрылымын модельдеу. Белоктардың физико-химиялық қасиеттерін биоинформатикалық әдістер арқылы анықтау.

Jmol және RasMol бағдарламалары.

Jmol



Jmol - бұл макромолекулалардың кеңістіктік құрылымын визуализациялауға арналған бағдарлама. Әдетте, бастапқы деректер PDB форматындағы файл болып табылады (дегенмен кейбір басқа форматтармен де көрсетіледі).

Бағдарлама туралы негізгі мәліметтер



Визуализация



Көптеген қажеттіліктер үшін жеткілікті талдау құралдарының спектрі



Игеру үшін оңай, жақсы ішкі логикаға ие



[Http://jmol.sourceforge.net/](http://jmol.sourceforge.net/) сайтында қол жетімді;



Java орнатуды қажет етеді

Визуализация дегеніміз не?

Визуализация үшін бастапқы деректер-олардың орталықтарының координаттары бар атомдар тізімі (кейбір координаттар жүйесінде). Белоктарды визуализациялау кезінде бағдарлама терезесінде әртүрлі т.б. модельдер бейнеленеді.

Ең көп таралған модельдер:

Сым моделі - атомдар арасындағы ковалентті байланыстар олардың орталықтарын қосатын сызықтармен бейнеленеді. Jmol, әдетте, Атом орталықтары арасындағы қашықтық бойынша коваленттік байланыстардың болуын анықтайды.

Шар моделі - атомдар шарлармен ұсынылған. Шар мен сымдардың модельдерін кейде артикуляциялық модель деп атайды.

Кеңістік моделі - көрші ақуыз қалдықтарының $C\alpha$ атомдарын немесе көрші ДНҚ немесе РНҚ нуклеотидтерінің фосфор атомдарын байланыстыратын сызықтар көрсетілген.

ІтоІ негізгі жұмыс принциптері

1-Жұмыс екі терезеде жүреді: графикалық және командалық (егер командалық терезе іске қосылмаған болса, графикалық терезені мышканың оң жақ жағымен нұқып, мәзірден "Console" -ді таңдаңыз)

2-Жұмыстың әр сәтінде бірнеше белгілі атомдар жиынтығы болады. Барлық әрекеттер осы жиынмен орындалады.

3-Әрбір әрекетке командалық терезеде терілетін команда сәйкес келеді.

4-Команда белсенді командалық терезеде пернетақтадан теріледі және "Enter" пернесін басу арқылы аяқталады.

Құрылымды қалай ашу керек?



-Графикалық терезеде: File → Open және файлды таңдау.

-Немесе File → GetPDB және төрт таңбалы кодты теру (мысалы 1crn). Бұл жағдайда құрылым PDB банкінен жүктеледі.

Кейбір командалар

select <МНОЖЕСТВО>	көп нәрсені ерекшелейді
restrict <МНОЖЕСТВО>	көп нәрсені ерекшелеп, графикалық терезеден өшіреді
wireframe 0.3	графикалық терезеде кескіндемеге 0.3 ангстрема сызығының қалыңдығы бар таңдалған жиындардың сым үлгісін қосады.
wireframe off	графикалық терезеден бөлінген жиын сым үлгісін өшіреді
backbone 0.5	графикалық терезеде суретке 0.5 ангстрем сызығының қалыңдығы бар таңдалған жиынның бастапқы үлгісін қосады
color <цвет>	көрсетілген түске боялады (бірақ егер бұл атомдар қандай да бір модельде бейнеленген болмаса, онда түстер сіз оларды суреттемегенше көрінбейді!)

Жиынтықты қалай орнатуға болады?

Бір атом:

Ser15:a. og-атом OG серин 15 тізбек A

Берілген қалдықтың барлық атомдары:

15:A

Диапозондағы қалдықтың барлық атомдары:

10-28:A

A тізбектің барлық атомдары :

*: A

Барлық C α -атомдар:

*. CA

Барлық:

all

Ештеңе (бос):

none ("restrict none" графикалық терезені тазартады)

Барлық ақуыз атомдары:

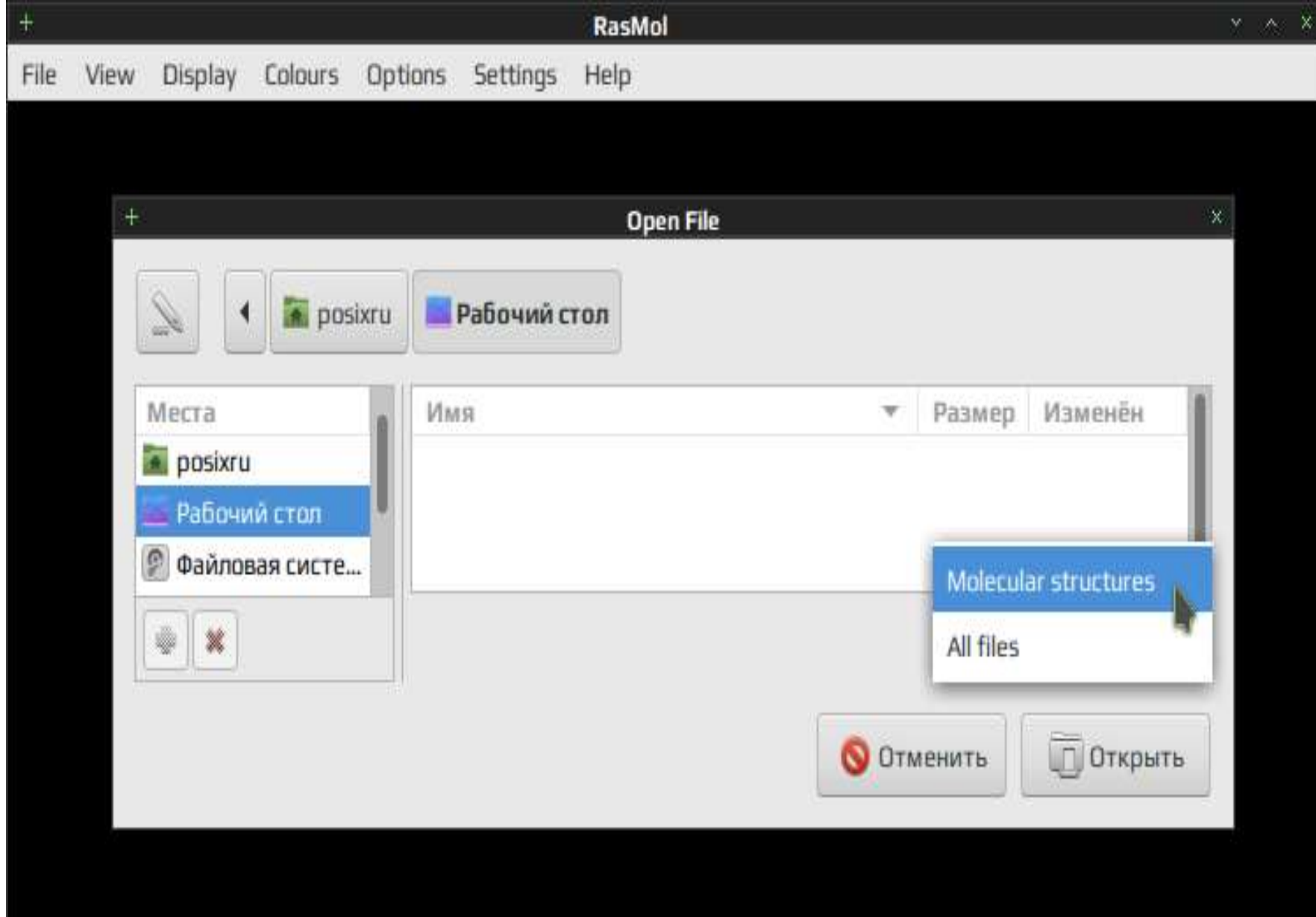
protein

Барлық су атомдары:

water

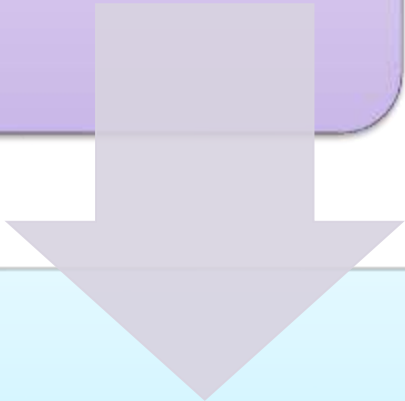
Барлық бастапқы атомдар (ақуыз, ДНК және РНК):

backbone



Rasmol - қарапайым молекулалардың
үш өлшемді визуализациясы үшін графикалық қосымша

RasMol-молекулаларды
визуализациялауға арналған және
негізінен биологиялық
макромолекулалардың, бірінші кезекте
ақуыздар мен **нуклеин**
қышқылдарының кеңістіктік
құрылымдарының бейнелерін зерттеу
және алу үшін пайдаланылатын
компьютерлік бағдарлама.



Визуализация үшін бастапқы
деректер болып **Protein Data Bank**
(PDB) форматындағы файлдағы
молекула атомдарының (немесе
молекулалар кешені) координаттары
қызмет етеді. Атом координаттары
бар файлдар PDB сайттарының
бірінен көшірілуі мүмкін (*Worldwide
Protein Data Bank* қараңыз).

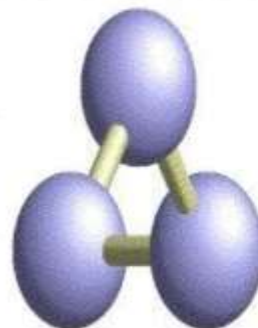
www.RasMol.org and www.OpenRasMol.org

[Copying and Distribution](#) | [Contents](#) | [Software Distributions](#) | [Latest Windows Installer](#) | [External Packages](#) |
[RasMol Manual](#) | [RasMol Blog](#) | [Frequently Asked Questions](#) | [RasMol 2.7 Series History](#) | [RasMol and OpenRasMol](#) |
[SourceForge OpenRasMol Site](#) | [Click Here to Make a Donation](#) | [RasMol SourceForge Site](#) |

Home Page for RasMol and OpenRasMol

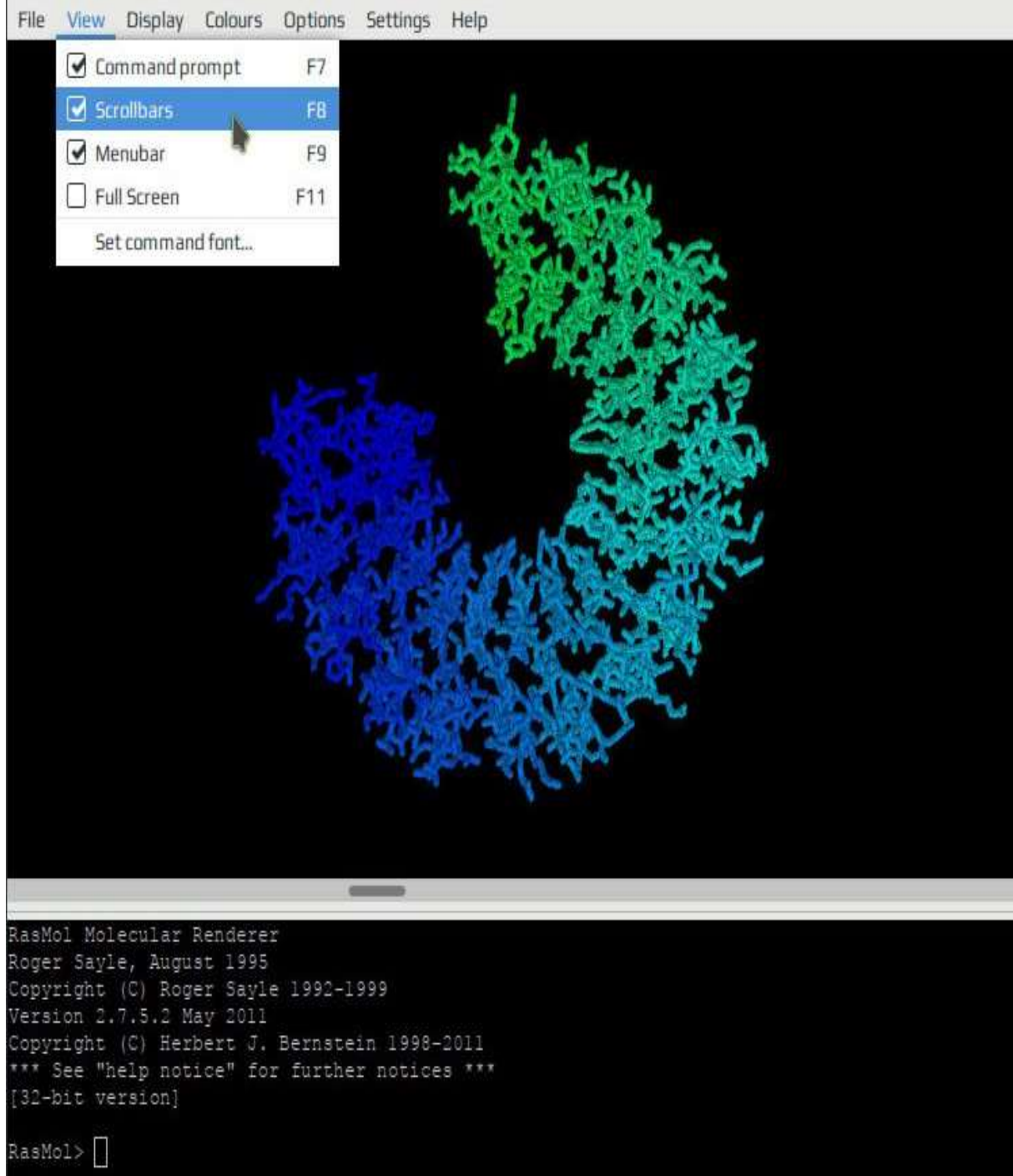
Molecular Graphics Visualisation Tool

- [RasMol Latest Windows Installer](#)
- [RasMol Latest Source Tarball](#)
- [RasMol Latest Manual](#)
- [Donate to Support RasMol](#)
- [Register your RasMol](#)



- [RasMol 2.7.5 Windows Installer](#)
- [RasMol 2.7.5 Source Tarball](#)
- [RasMol 2.7.5 Manual](#)
- [Donate to Support RasMol](#)
- [Register your RasMol](#)

www.RasMol.org және www.OpenRasMol.org
сайты



RasMol бірінші нұсқасы Роджер Сэйл (Roger Saugе) **1992** жылы құрылды және шартты-тегін қосымша ретінде таратылды.

1999 жылдан бастап (2.7 нұсқасымен) бастапқы код еркін лицензиямен шығарылды (бастапқыда OpenRasMol атымен), одан әрі әзірлеуді Герберт Дж Бернштейн (Herbert J. Bernstein) жалғастырды.

- ✓ *.ent, *.pdb, *.pdb1, *.pdb2, ... форматта кеңейтуі мүмкін;
- ✓ Ішінде барлық ақуыз атомдары координаттары жазылған (дәлірек айтқанда, - барлық дерлік атомдар).

```

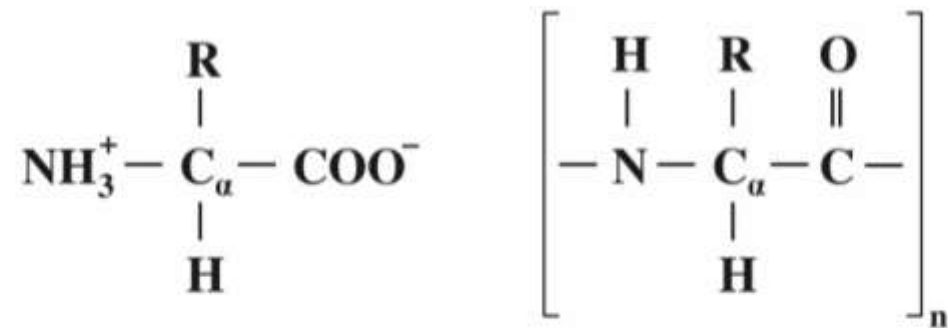
HEADER          ELECTRON TRANSFER                      19-APR-98    1BAW
TITLE          PLASTOCYANIN FROM PHORMIDIUM LAMINOSUM
...
ATOM           1  N   GLU A   1      35.039  18.146  24.600  1.00 73.96      N
ATOM           2  CA  GLU A   1      34.182  18.513  25.759  1.00 73.96      C
ATOM           3  C   GLU A   1      33.126  19.536  25.368  1.00 73.96      C
ATOM           4  O   GLU A   1      33.124  20.038  24.244  1.00 87.91      O
ATOM           5  CB  GLU A   1      35.048  19.052  26.891  1.00 87.91      C
ATOM           6  CG  GLU A   1      36.075  18.056  27.376  1.00 87.91      C
ATOM           7  CD  GLU A   1      37.009  18.647  28.405  1.00 87.91      C
ATOM           8  OE1 GLU A   1      36.536  19.012  29.502  1.00 87.91      O
ATOM           9  OE2 GLU A   1      38.220  18.744  28.120  1.00 87.91      O
ATOM          10  N   THR A   2      32.242  19.858  26.307  1.00 27.58      N
ATOM          11  CA  THR A   2      31.164  20.807  26.063  1.00 27.58      C
ATOM          12  C   THR A   2      30.988  21.697  27.283  1.00 27.58      C
ATOM          13  O   THR A   2      30.583  21.234  28.347  1.00 31.52      O
ATOM          14  CB  THR A   2      29.834  20.077  25.761  1.00 31.52      C
ATOM          15  OG1 THR A   2      29.997  19.235  24.612  1.00 31.52      O
ATOM          16  CG2 THR A   2      28.726  21.078  25.487  1.00 31.52      C
ATOM          17  N   PHE A   3      31.345  22.968  27.128  1.00 27.51      N
ATOM          18  CA  PHE A   3      31.235  23.948  28.204  1.00 27.51      C
ATOM          19  C   PHE A   3      29.925  24.713  28.083  1.00 27.51      C

```


Atomic Coordinates: PDB Format

		Amino Acid		Chain name	Sequence Number	-----Coordinates-----			(etc.)
	Element					X	Y	Z	
ATOM	1	N	ASP	L	1	4.060	7.307	5.186	...
ATOM	2	CA	ASP	L	1	4.042	7.776	6.553	...
ATOM	3	C	ASP	L	1	2.668	8.426	6.644	...
ATOM	4	O	ASP	L	1	1.987	8.438	5.606	...
ATOM	5	CB	ASP	L	1	5.090	8.827	6.797	...
ATOM	6	CG	ASP	L	1	6.338	8.761	5.929	...
ATOM	7	OD1	ASP	L	1	6.576	9.758	5.241	...
ATOM	8	OD2	ASP	L	1	7.065	7.759	5.948	...

\\
Element position within amino acid



Структура аминокислоты и полипептида.

Қолданудағы қарапайым әдіс тәсілдері

Файлды ашу:

- **Drag&Drop** бойынша мәзір **File** → **Open**
- консольдағы команда
load <файл аты>

Файлды жабу:

- мәзір **File** → **Close**
- консольдағы команда
zap

Құрылымы туралы ақпарат алу:

- мәзір **File** → **Information**

Жаңа нәрсе білу:

- анықтаманы оқу
(анықтама файлын RasMol сайтынан жүктеп алуға болады)
- Manual және FAQ оқу

Сол жақ батырмасы

- ✓ молекула айналдырады

Оң жақ батырма

- ✓ молекула орнын ауыстырады,

Shift + сол батырмасы

- ✓ өлшемін өзгертеді

Shift + оң батырмасы

- ✓ экран жазықтығына

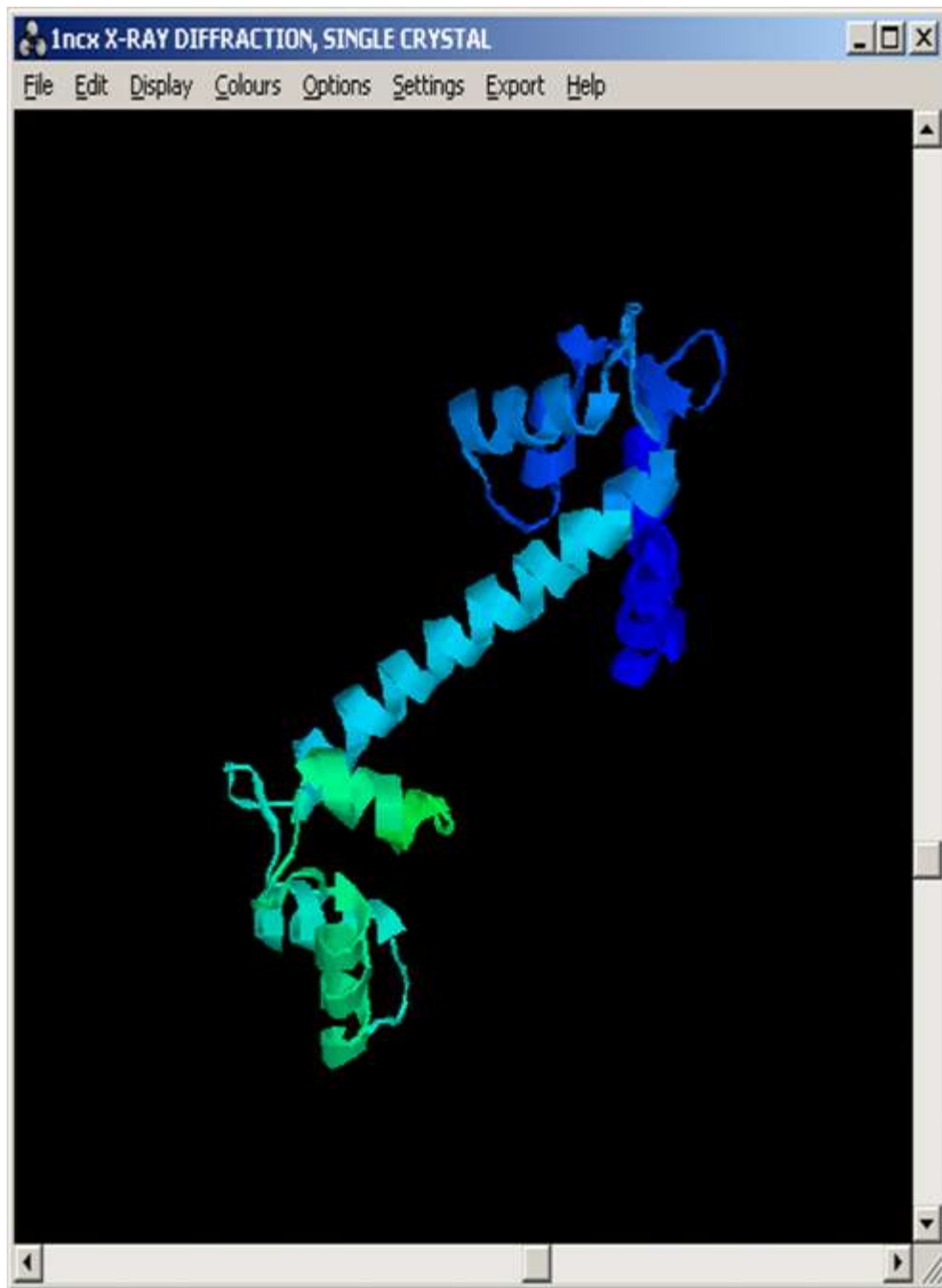
Мәзір командалары

- **Display** - берілген фрагменттің сурет әдісін таңдау
- **Colours** - түс схемасын таңдау
- **Options-Labels** және **Stereo**
- **Export** - суретті әртүрлі графикалық форматтарда сақтау

**Кіріктірілген тіл
тышқанмен жұмыс
жасағанға қарағанда
әлдеқайда көп
мүмкіндіктер береді**

МЫСАЛЫ

```
RasMol> load  
C:\PDB\1ncx.pdb  
RasMol> restrict none  
No atoms selected!  
RasMol> select all  
1433 atoms selected!  
RasMol> cartoons  
RasMol> color group  
RasMol>
```



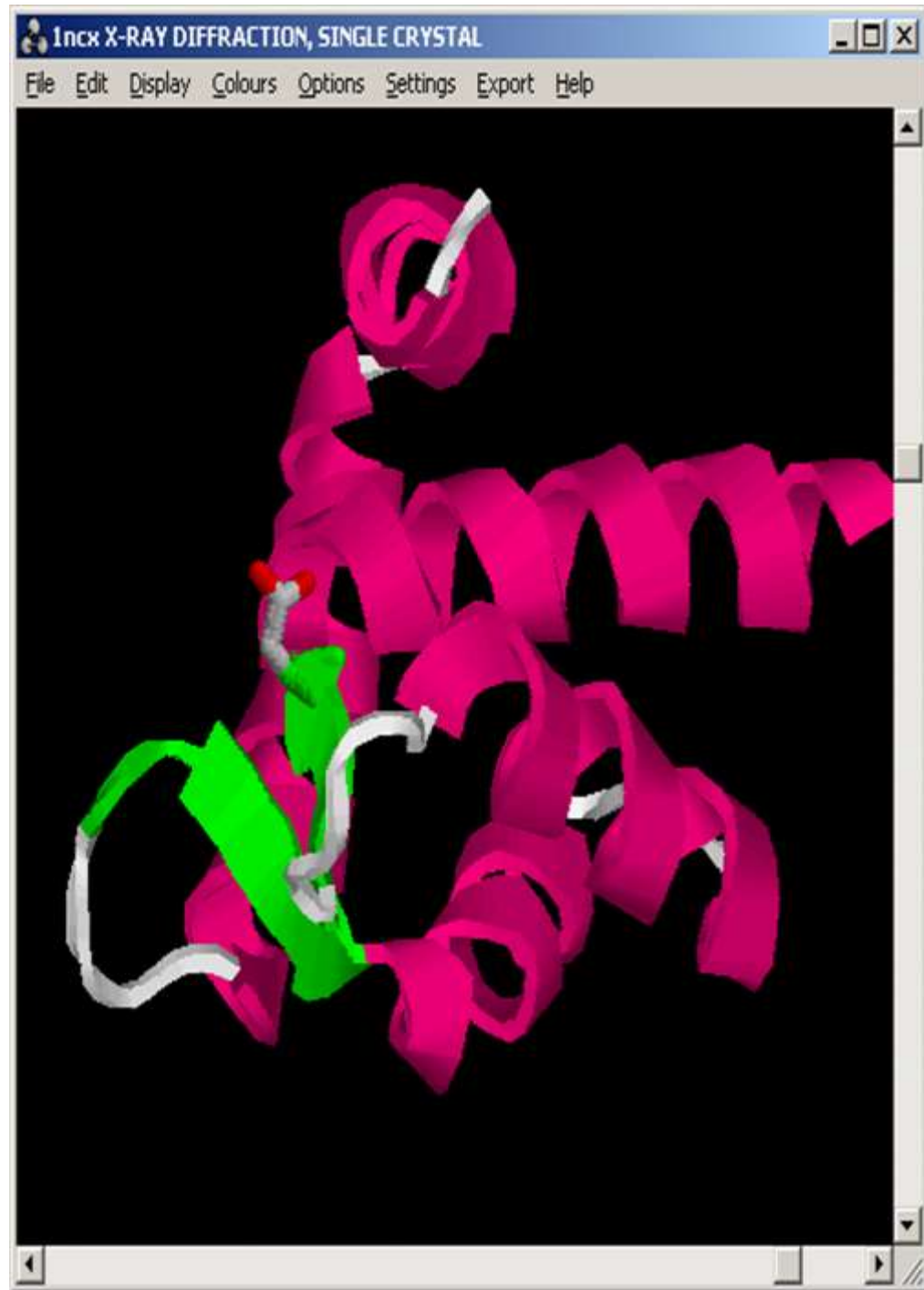


Мысалы

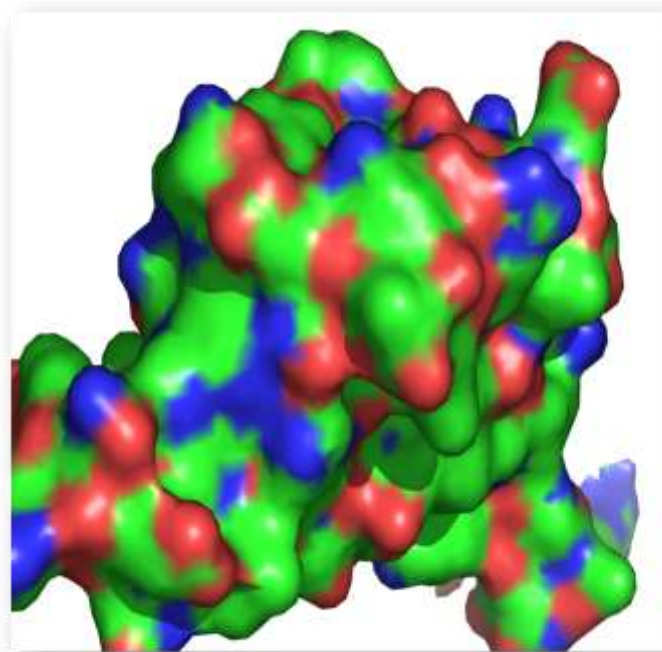
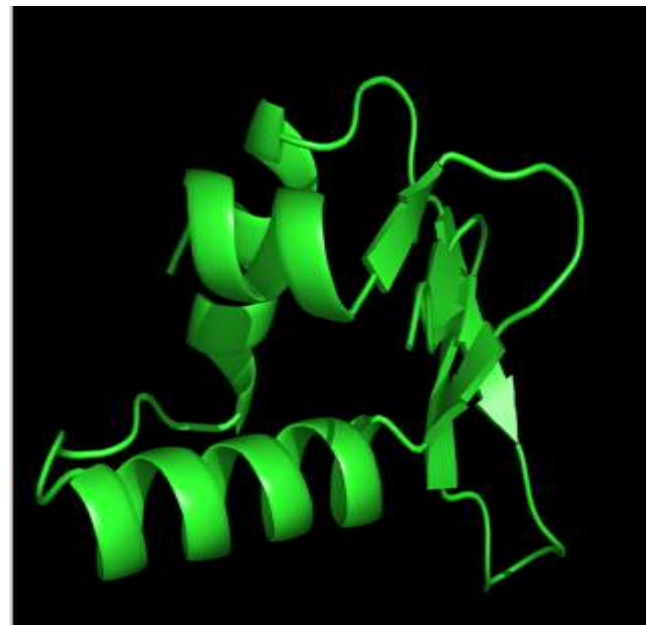
```
RasMol> load  
C:\PDB\1ncx.pdb  
RasMol> restrict none  
No atoms selected!  
RasMol> select all  
1433 atoms selected!  
RasMol> cartoons  
RasMol> color group  
Atom CA 694 Group: Lys  
91  
RasMol> restrict 1-91  
RasMol> center selected  
RasMol> zoom 250  
RasMol> select all  
1433 atoms selected!  
RasMol> color structure
```

Мысалы

```
Atom CA 549 Group: Asp 74
Atom CA 534 Group: Thr 72
Atom CA 279 Group: Ser 38
Atom CA 255 Group: Gly 34
RasMol> select (72-74,34-38)
53 atoms selected
RasMol> color green
RasMol> select Asp74
8 atoms selected
RasMol> wireframe 100
RasMol> color cpk
RasMol>
```



- ✓ **RasMol** молекулалық биологтар мен биоинформатиктерді белсенді қолдануды жалғастыруда.
- ✓ Пайдаланушы интерфейсінің **қарапайым және логикалық** құрылымы арқасында, бағдарлама игеру үшін оңай.
- ✓ Бағдарлама үшін әзірленген командалар жүйесі (**Rasmol "тілі"**) басқа бағдарламаларда қолданылады, мысалы, **Jmol**.
- ✓ **RasMol** барлық функционалдығын қамтиды және кейбір қосымша мүмкіндіктерге ие.



Сонымен Jmol макромолекулалардың кеңістіктік құрылымын визуализациялауға арналған бағдарлама болып табылады. Және де RasMol молекулалық биологтар мен биоинформатиктерді белсенді қолдануды жалғастыруда. Сондай ақ пайдаланушы интерфейсінің қарапайым және логикалық құрылымы арқасында, бағдарлама игеру үшін оңай.

- <https://www.youtube.com/watch?v=luzyd468CLg&t=76s>
- <https://www.youtube.com/watch?v=RFg9fsFMvms&t=2301s>