

TP pymol – H-bonds

Liaisons d'hydrogène à l'interface de E9-Im9

1. Télécharger le fichier
<http://www.imPMC.upmc.fr/~stratmann/proteinStructure/TPpymolHbonds.tar.gz>
dans votre dossier personnel (« home-directory »).
2. Décompresser ce fichier dans votre dossier personnel (« home-directory ») avec cette commande dans une fenêtre Terminal (Ctrl+Alt+T) :
tar xvzf TPpymolHbonds.tar.gz
3. Allez dans le dossier décompressé avec **cd TPpymolHbonds**
4. Lancer pymol avec la commande **pymol**
5. Il y a deux fenêtres qui s'ouvrent. On n'utilisera uniquement la fenêtre avec le fond noir et le titre « PyMOL Viewer ». En bas de cette fenêtre vous avez une invite de commande. Allez dans le dossier où se trouvent les fichiers du TP avec la commande **cd** (« change directory ») qu'on peut aussi utiliser directement dans pymol :
cd TPpymolHbonds
6. Vérifier que vous avez les bons fichiers avec la commande **ls** (« list »), puis en appuyant sur « echap » (« esc » en anglais) du clavier pour basculer entre l'affichage 3D de pymol et l'affichage des retours de la ligne de commande. Vous devrez voir un fichier « 1EMV_Hatoms.pdb » dans la liste. Il s'agit du même hétéro-dimère qu'on avait déjà utilisé dans le premier TP d'introduction à pymol, mais ici les hydrogènes ont été ajoutés avec le logiciel **reduce** :
<http://kinemage.biochem.duke.edu/software/reduce.php>
Il fallait aussi renuméroter les numéros d'atomes avec la commande **babel input output** de OpenBabel : <http://openbabel.org>
7. Ouvrir le fichier PDB .pdb avec la commande pymol :
load 1EMV_Hatoms.pdb
8. Lancer le script suivant pour avoir un rendu plus joli et d'avoir deux sélections, « interfaceA » et « interfaceB » qui sont les résidus à l'interface du dimère de la chaîne A et B respectivement. :
@1EMV.pymol
9. Utiliser la commande **distance** en « mode 2 » pour trouver les liaisons hydrogènes entre deux sélections, ici les interfaces des deux chaînes. On nomme ici l'ensemble de ces distances « hbonds » :
distance hbonds, interfaceA, interfaceB, mode=2
10. Agrandir la vue sur l'interface avec la commande **zoom** :
zoom interfaceA
11. On voit des numéros indiquant la distance en Angström des liaisons hydrogènes. Par contre les pointillés jaunes se voient mal sur un fond blanc, mais on peut changer leur couleur :
set dash_color = red

12. On voit que le mode cartoon ne montre pas les atomes impliqués dans les liaisons hydrogènes. On peut ajouter un affichage en mode « sticks » pour les chaînes latérales de l'interface :

show sticks, sidechain and (interfaceA or interfaceB)

13. Pour identifier les types d'atomes on peut les colorier avec cette commande qui ne change pas la couleur des carbones :

util.cnc

14. Mais certaines liaisons hydrogènes se forment entre le squelette (backbone) d'une chaîne et une chaîne latérale de l'autre chaîne, comme ici :

zoom (chain B and resi 77) or (chain A and resi 23)

Pour voir aussi les atomes du backbone, on ajoute encore des sticks :

show sticks, interfaceA or interfaceB

Pour revenir à une vue complète de la protéine sans coupes, faire :

zoom

15. Pour afficher la liste des atomes impliqués dans les liaisons hydrogènes de l'interface, on charge une nouvelle commande :

run list_dist.py

list_dist

Appuyer sur Echap pour voir la liste des atomes. Pour la copier&coller il faut utiliser l'autre fenêtre de pymol.

list_dist crée aussi deux sélections **distAtoms** et **distRes** qui sont respectivement les atomes ou les résidus impliqués dans les liaisons hydrogènes qu'on avait trouvés avec la commande **distance**.

16. On peut utiliser ces deux sélections, **distAtoms** et **distRes**, pour n'afficher uniquement les sticks qui sont intéressants par rapport aux liaisons hydrogènes :

hide sticks

show sticks, distRes

hide sticks, hydrogens

show sticks, hydrogens near_to 2 of distAtoms

show sticks, distAtoms

Pour avoir plus d'informations sur les possibilités avancées de sélection dans pymol, voir ici :

https://pymolwiki.org/index.php/Selection_Algebra