

TP pymol - rotamers

Rotamers d'un peptide cyclique

1. Télécharger le fichier
<http://www.impmc.upmc.fr/~stratmann/proteinStructure/TPpymolRotamers.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 TPpymolRotamers.tar.gz
3. Allez dans le dossier décompressé avec **cd TPpymolRotamers**
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 TPpymolRotamers
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 « cilengitideH.pdb » dans la liste.
7. Ouvrir le fichier PDB cilengitideH.pdb avec la commande pymol :
load cilengitideH.pdb
8. Charger les commandes pour travailler sur les rotamers avec pymol avec :
run rotamersCyc.py
9. Avec la commande suivante créer des fichiers PDBs avec différentes conformations des chaînes latérales (=rotamers), ici on prend jusqu'à 10 rotamers les plus probables :
createRotamerPDBs all, ncutoff=10
10. Vérifier qu'il y a un ensemble de fichiers PDB « ROTAMER***.pdb » crée par la commande createRotamerPDBs. Pour cela utiliser la commande **ls** (pour « list ») directement dans pymol.
11. Effacer la structure actuelle avec
delete all
12. Charger les fichiers PDB « ROTAMER***.pdb » dans un seul objet « ROTAMER_movie » avec la commande suivante qui est inclut dans rotamersCyc.py :
readRotamerPDBs
13. Choisir une vitesse de défilement des structures avec
set movie_fps=5
fps = frames per second (images par seconde, ici 5)
14. Lancer le défilement avec **mplay** ou alors avec les boutons type lecteur de musique en bas à droite. Vous pouvez bouger le peptide en même temps que les structures défilent.