

## Gráficas moleculares

7.51 Septiembre, 2001

### RasMol y archivos PDB

El programa de gráficos más sencillo para Athena se llama RasMol. Para utilizar este programa, es necesario copien en su directorio los archivos que contienen las coordenadas de una molécula (archivos PDB). Algunos de ellos se encuentran en el directorio 7.51. En la actualidad, incluyen:

BPTI.pdb	(inhibidor de la tripsina pancreática bovina)
bDNA.pdb	(modelo de la forma B del ADN)
1PAR.pdb	(represor Arc unido al operador ADN)
5rsa.pdb	(ribonucleasa A)
256b.pdb	(citocromo b562)
1mbn.pdb	(mioglobina del cachalote)
4gcr.pdb	(gamma cristalina)
1rbp.pdb	(proteína enlazante de retinol)
1tim.pdb	(triosa fosfato isomerasa)
4fxn.pdb	(flavodoxina)
2cro.pdb	(represor bacteriófago Cro 434)
lake.pdb	(adenilato quinasa con inhibidor)
lhgj.pdb	(hemaglutinina del virus de la gripe)
lhtm.pdb	(el ectodominio de la hemaglutinina del virus de la gripe)
loel.pdb	(groEL)
lrno.pdb	(ribonucleasa A)
lrpg.pdb	(ribonucleasa A con inhibidor)
2zta.pdb	(cremallera de leucina)
4ake.pdb	(adenilato quinasa)
6cha.pdb	( $\alpha$ -quimotripsina con inhibidor)
trp_apo.pdb	(represor trp)
trp_rep.pdb	(represor trp)
trypsin_bpti.pdb	(complejo tripsina-BPTI)

Para copiar uno o más archivos, iniciar sesión en Athena (por ejemplo, en el sótano del edificio 66) y, a continuación del *prompt* de Athena (Athena %), introducir por teclado lo siguiente:

```
add 7.51
```

Para obtener un listado de los archivos, escribir:

```
ls /mit/7.51
```

Para copiar el archivo bDNA.pdb en el directorio propio:

```
cp /mit/7.51/bDNA.pdb .
```

Obsérvese que el punto al final de la línea es importante. Significa copiar al directorio actual (en el que nos encontramos).

Para copiar todos los archivos pdb, escribir:

```
cp /mit/7.51/*.pdb .
```

Para abrir el programa de gráficos RasMol:

```
add rasmol
```

Y a continuación, escribir:

```
rasmol
```

Ahora deberían ver la ventana de RasMol. Para cargar una estructura, se selecciona **Open** (abrir) en el menú **File** (archivo) y se escribe el nombre del archivo pdb en la ventana de comandos, a continuación del *prompt*:

```
RasMol >  
PDB file name:
```

La estructura debería aparecer entonces en la ventana de gráficos. Se puede rotar y mover la estructura con el ratón. Para identificar un átomo, basta con hacer clic sobre él y observar la ventana de comandos. Experimenten con distintas vistas, colores, etc.; mediante el uso de los menús **Display**, **Color** y **Option**. Hay un buen tutorial de Andrew Coulson (Univ. Edinburgh, UK). Se encuentra en el directorio 7.51, en un archivo de texto llamado *rasmol.tutorial*. Para acceder a la ayuda en línea mientras se utiliza RasMol, escribir:

```
help commands
```

Así se obtiene un listado de los diversos comandos (*Backbone*, *Load*, *Select*, etc.). Para obtener información sobre un determinado comando (por ejemplo, *Select*), escribir:

```
help select
```

Para más información sobre RasMol o temas relacionados con él, visitar la página principal de RasMol en internet (<http://www.umass.edu/microbiol/rasmol/>). Si alguien desea instalar su propia versión de RasMol en un Mac, PC o Unix, en esta página encontrará toda la información necesaria.

## **CÓMO OBTENER ARCHIVOS PDB POR CUENTA PROPIA**

Las coordenadas de la mayoría de las estructuras de NMR y rayos-X conocidas (y las de algunas estructuras teóricas) se encuentran en el *Protein Data Bank* (banco de datos de proteínas) en la dirección: <http://www.rcsb.org/pdb/>. Se pueden obtener archivos PDB de este banco utilizando Netscape. Para abrir Netscape desde Athena, escribir:

*add infoagents*

Y a continuación:

*netscape &*

Pulsar todos los botones necesarios e introducir la dirección: <http://www.pdb.bnl.gov>. Cuando se abra la página principal del banco de datos de proteínas (PDB) introducir algunas palabras clave en el motor de búsqueda proporcionado para localizar las estructuras en cuestión.

Utilizar {EXPLORE} y, luego, el *Download/Display File* (archivo de visualización/descarga) para obtener las coordenadas. Para algunos oligómeros, el archivo PDB sólo incluirá un subconjunto de las subunidades (las otras se obtienen por simetría cristalográfica). Para conseguir un archivo que contenga todas las subunidades, utilizar la opción **Other Sources** que se encuentra en el **Structural Explorer** y, a continuación, hacer clic en el código del PDB situado bajo el encabezado del **EBI MSD Macromolecule File Server** (servidor de archivos de macromoléculas). Esto nos lleva a una base de datos en la que los archivos con la extensión .mmol deberían contener las coordenadas del oligómero nativo. AVISO: en algunas ocasiones, no está claro si un oligómero cristalográfico existe o funciona en disolución.