



Swiss-PDB Viewer 4.0.1 的使用

组别：G08

报告人：屈平平

组员：史学晖、李晓、赵德辉、屈平平

Swiss-PDB Viewer 4.0.1 的简介

- Swiss-Pdb又名DeepView是一个可以同时分析几个蛋白应用程序。
- 通过蛋白质叠加以推断结构比对和比较它们的活性部位或任何其他相关的部分。
- 通过直观的图形和菜单界面很容易获得氨基酸的突变、氢键、角度和原子之间的距离。
- Swiss-Pdb也可以阅读电子密度图，并提供了各种工具来构建密度图。另外，不同的建模工具可以集成和残基可被突变。

Load protein

- 载入一个蛋白质分子常用到以下方法：
- 1.可以直接在菜单file → open PDB file
- 2.也可以在打开PdbViewer 之后再直接把 文件拖进去即可
- 说明：以上两种方法除可以打开PDB格式外也可以直接打开txt或fasta格式

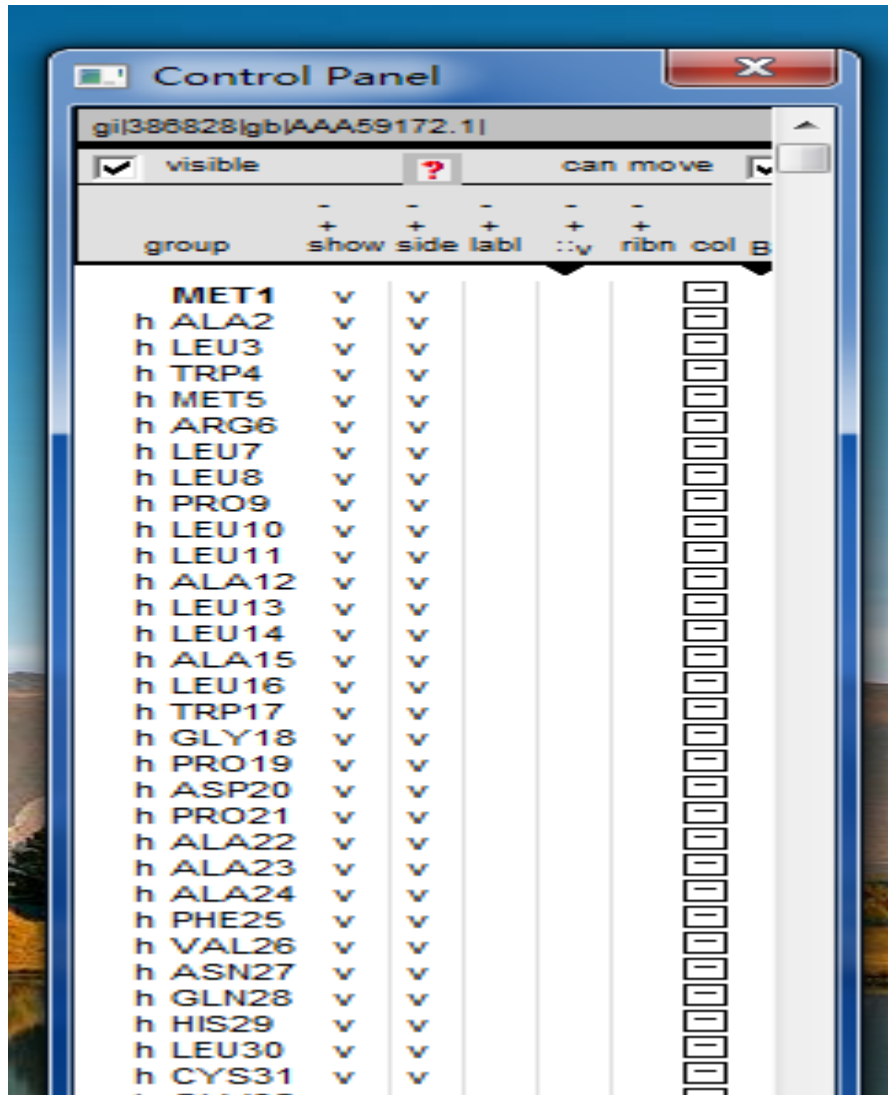
Windows选项卡作用

在windows 下有如下各种功能control panel, layers infos, alignment

(I)Control Panel

刚刚打开文件之后然后点击wind下 Control Panel 选项，如图所示：

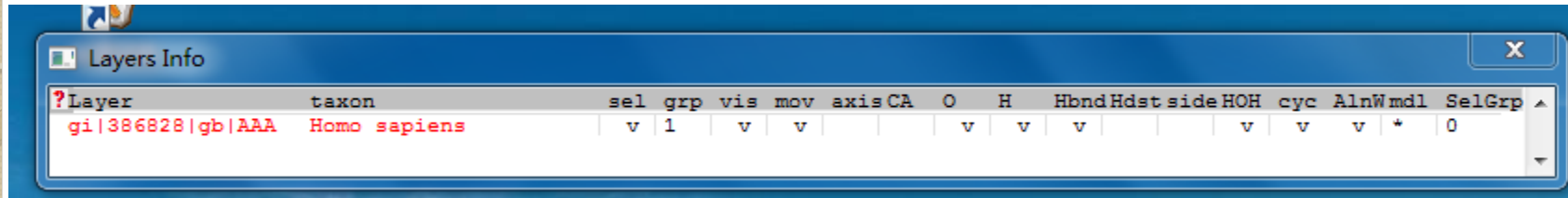
Control Panel功能介绍



- 氨基酸残基(show)
- 显示侧链(side)
- 标注残基(lable)
- 显示分子表面()
- 螺旋和折叠(ribbons)
- 颜色修饰(color)
- ribn: 是否以丝状显示螺旋和折叠

wind选项卡的功能

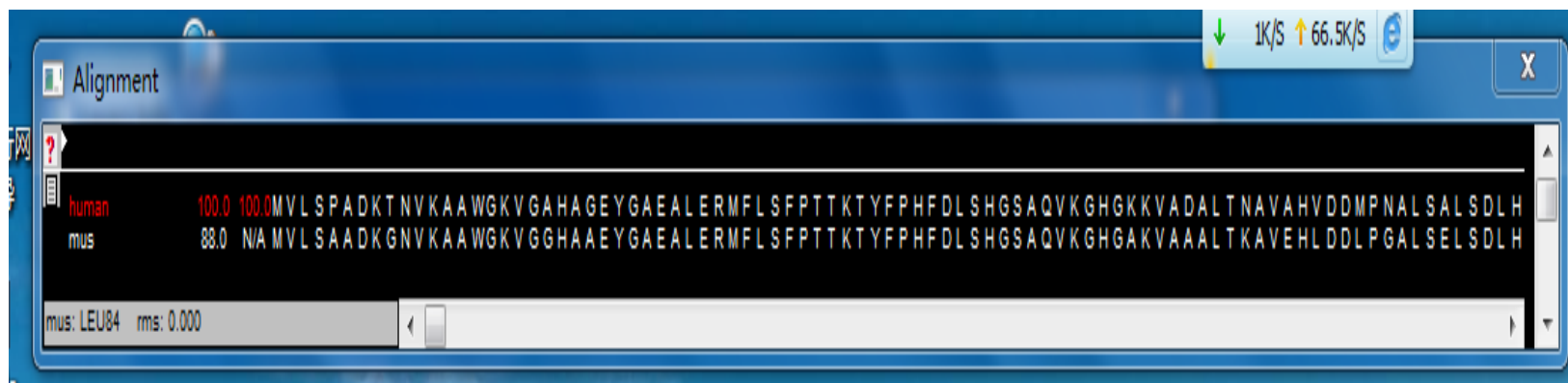
(2) Layers infos



- 当前活动分子用红色表示
- 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（可将两条重合的肽链分开）
- xs 给该图形加一个坐标轴，该坐标轴有三个方向，x，y，z
- A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：先选择 Tool→Compute H-Bonds，再选择 Layers Info中的 Hbnd，氢键就会以绿色的形式表现出来。或者选择 Display→show H-bonds，如果想进一步查看H键的长度，可以选择Display show H bonds distances Display-----show H-bonds distances
- OH表示水分子或者是溶剂

(3) Alignment

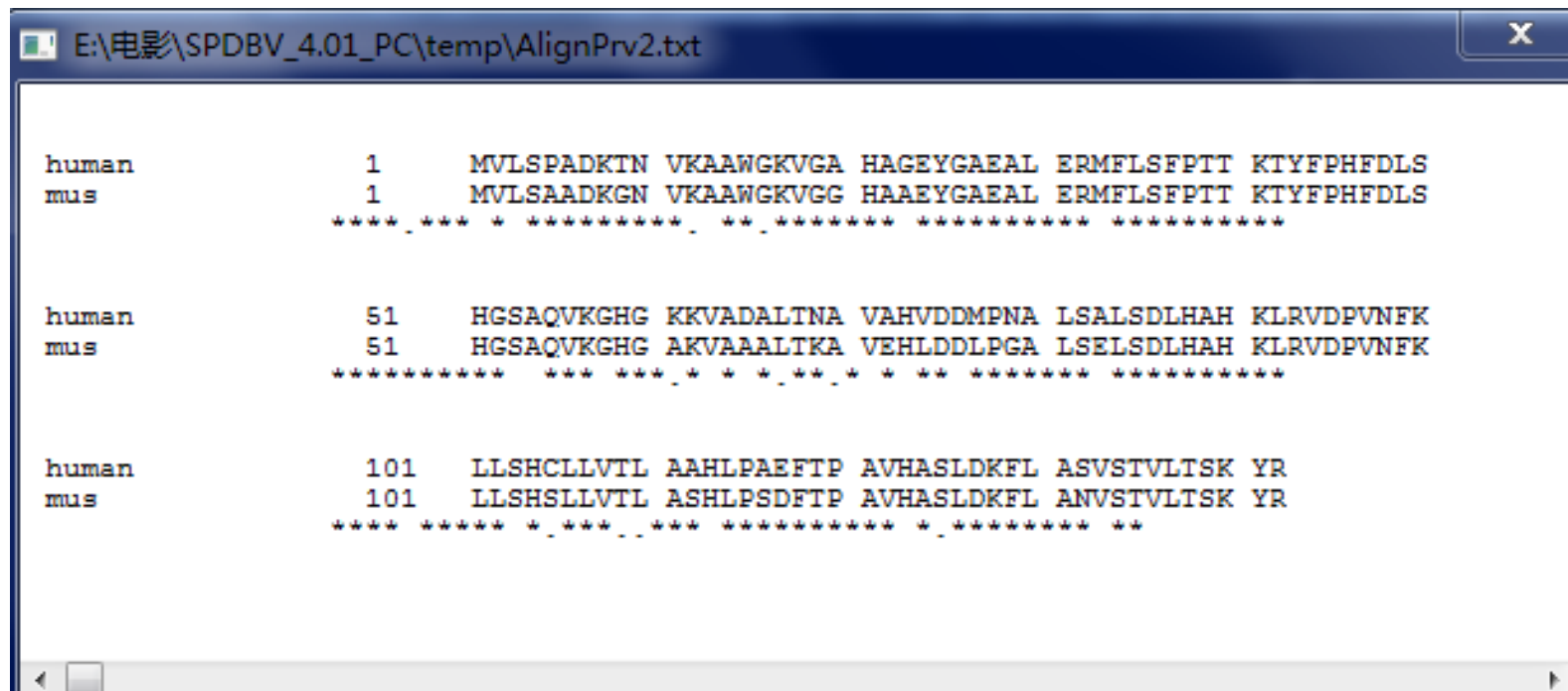
应用Alignment进行序列比对。点击左侧的小图标以文本形式显示比对的结果 可以以文本形式显示比对的结果：



The screenshot shows a window titled "Alignment" with a blue header. In the top right corner, there are status indicators: a green downward arrow, "1K/S", a red upward arrow, and "66.5K/S". The main area displays a sequence alignment between "human" and "mus". The human sequence is "MVLSPADKTNVKAAWGKVGAHAGEYGAELERMFLSFPTTKTYFPHFDLSHGSAQVKGHGKKVADALTNAVAHVDDMPNALSALSDLH" and the mus sequence is "MVL SAADKGNV KAAWGKVG GHA AEYGAELERMFLSFPTTKTYFPHFDLSHGSAQVKGHGAKVAAALT KAVEHLDDLPGALSELSDLH". The alignment shows a high degree of similarity, with a score of 100.0 for the human sequence and 88.0 for the mus sequence. At the bottom left, it indicates "mus: LEU84 rms: 0.000".

```
Alignment
1K/S 66.5K/S
?
human 100.0 100.0 MVLSPADKTNVKAAWGKVGAHAGEYGAELERMFLSFPTTKTYFPHFDLSHGSAQVKGHGKKVADALTNAVAHVDDMPNALSALSDLH
mus    88.0   NA MVL SAADKGNV KAAWGKVG GHA AEYGAELERMFLSFPTTKTYFPHFDLSHGSAQVKGHGAKVAAALT KAVEHLDDLPGALSELSDLH
mus: LEU84 rms: 0.000
```


(3)Alignment

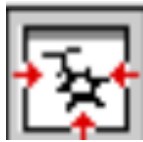
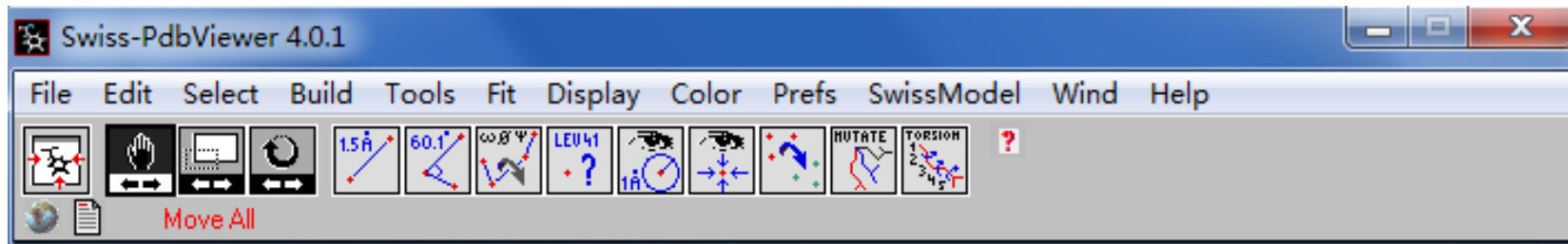


```
E:\电影\SPDBV_4.01_PC\temp\AlignPrv2.txt X

human          1      MVLSPADKTN VKAAWGKVGA HAGEYGAEAL ERMFLSFPTT KTYFPDFDLS
mus            1      MVLSAADKGN VKAAWGKVG G HAAEYGAEAL ERMFLSFPTT KTYFPDFDLS
****_*** * *****_**_***** ***** *****

human          51     HGSAQVKGHG KKVADALTNA VAHVDDMPNA LSALSDLHAH KLRVDPVNFK
mus           51     HGSAQVKGHG AKVAAALTKA VEHLDDLPGA LSELSDLHAH KLRVDPVNFK
***** ** *_* *_*_* * ** ***** *****

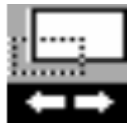
human          101    LLSHCLLVTL AAHLP AEFTP AVHASLDKFL ASVSTVLT SK YR
mus           101    LLSHSLLVTL ASHLPSDFTP AVHASLDKFL ANVSTVLT SK YR
**** *****_*_*_*_* *****_*_****** **
```



居中显示



移动蛋白质, 但不能旋转



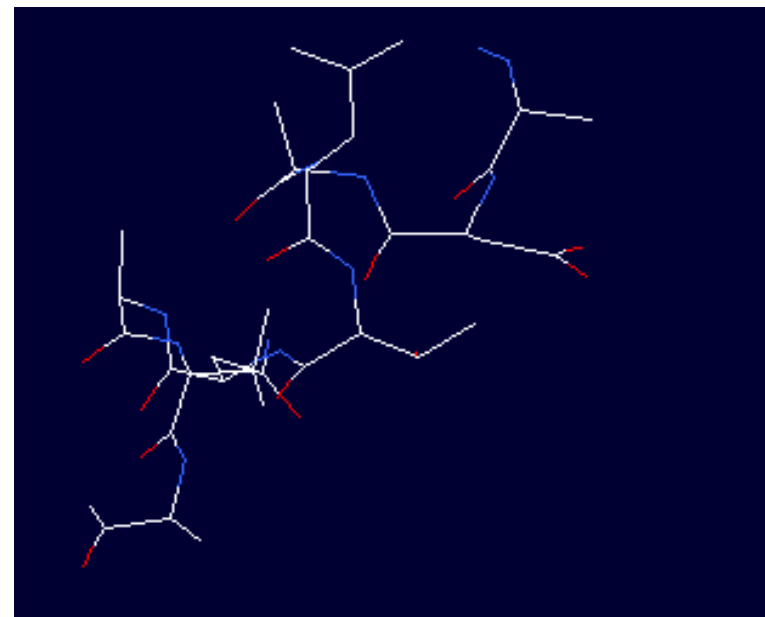
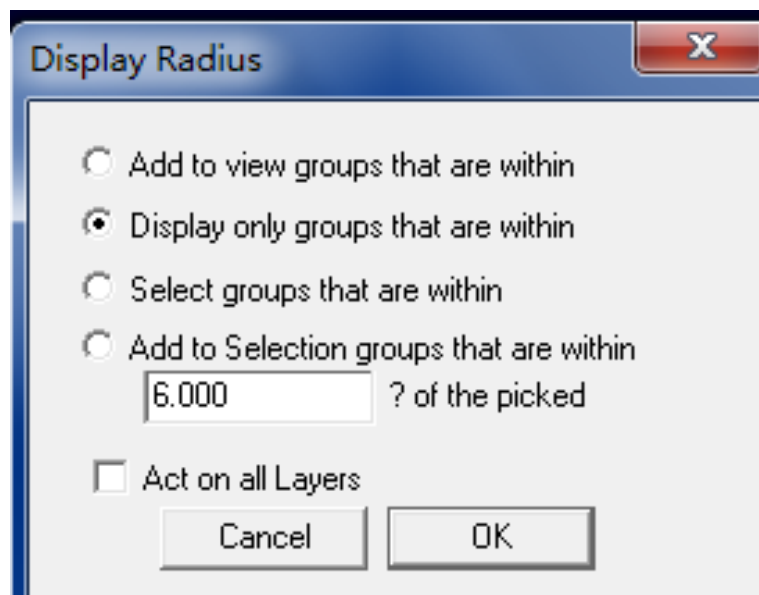
放大或缩小蛋白质



旋转蛋白质结构图形



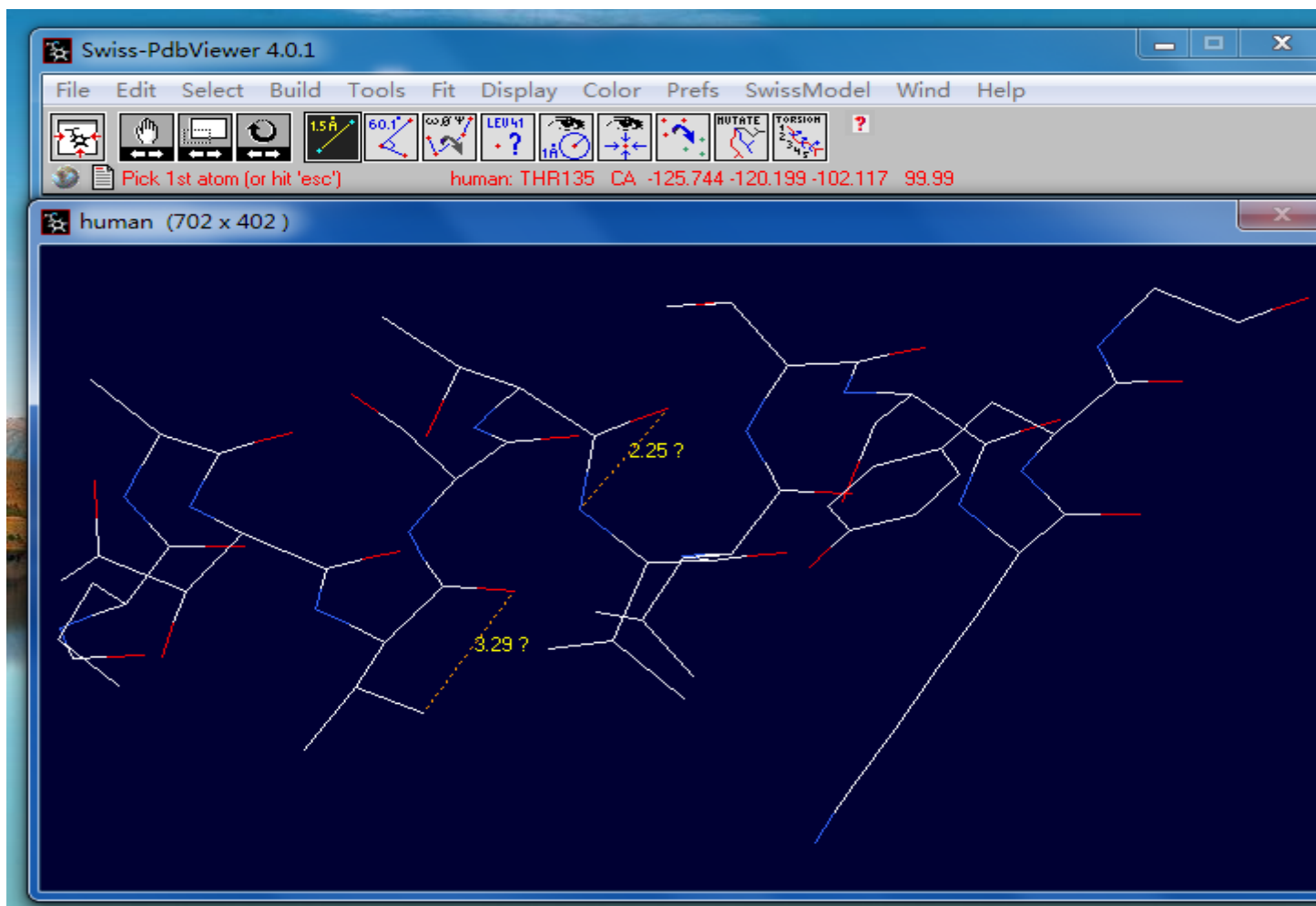
是以某个氨基酸残基为中心, 显示在一定范围内的所有氨基酸基。



用来测量两个原子间的距离

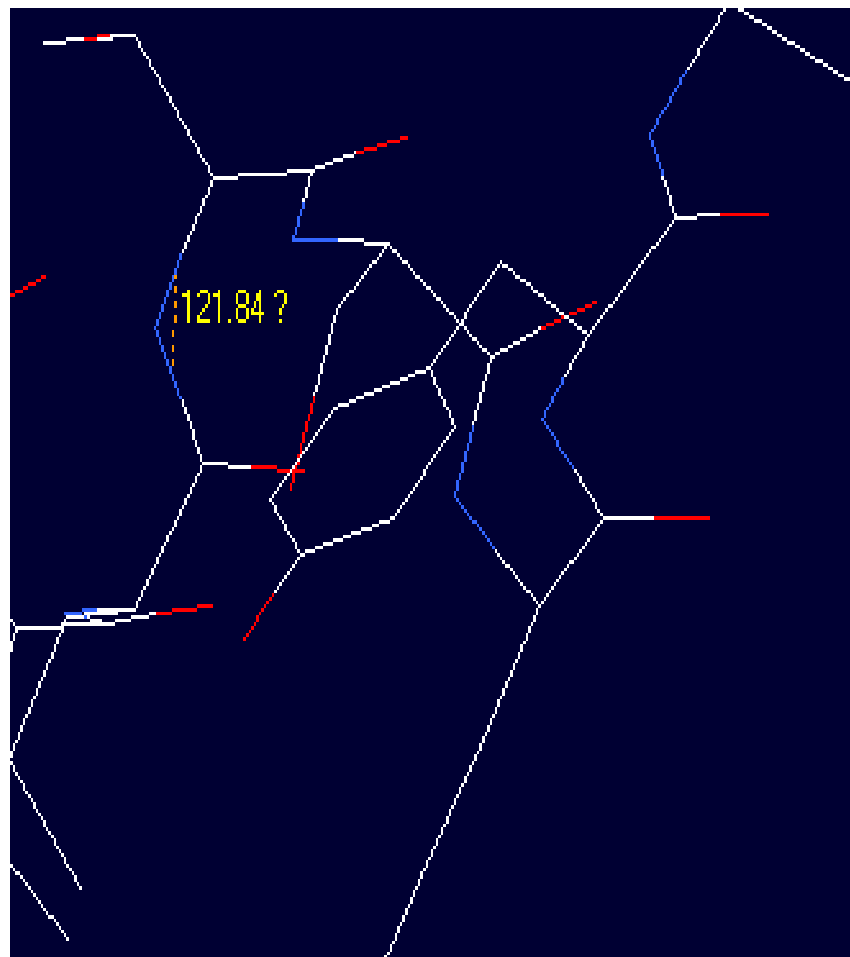


- 用来测量两个原子间的距离
- 选取任意两点，即可测得这两点间的距离




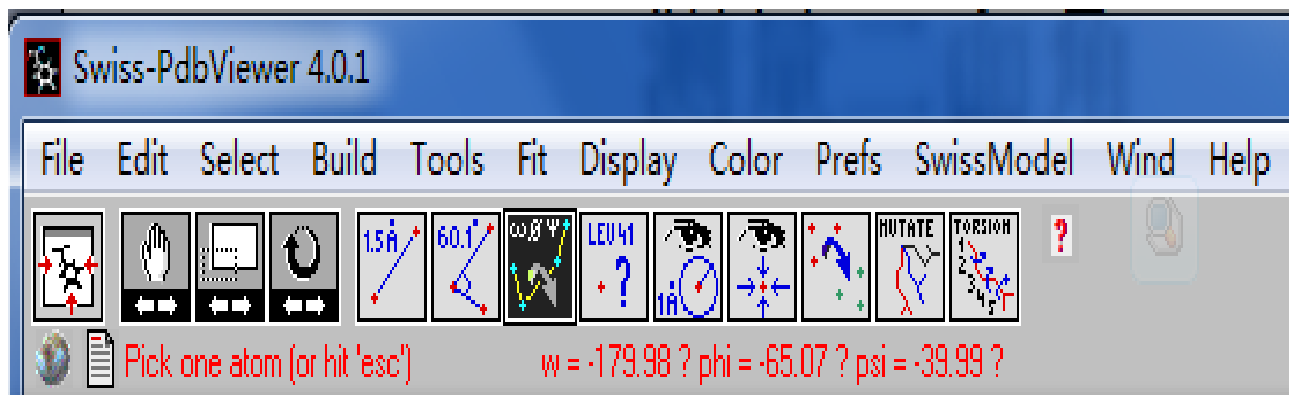
测量三个相邻原子的角度

- 点击图标
- 先点击角的顶点，再点击余下两点，即可测得夹角值。



测量二面角

单击该按钮  并选定一个原子，则该原子所处的氨基酸残基的 ω 、Phi、psi角的值会依次显示在信息栏里。





注意：

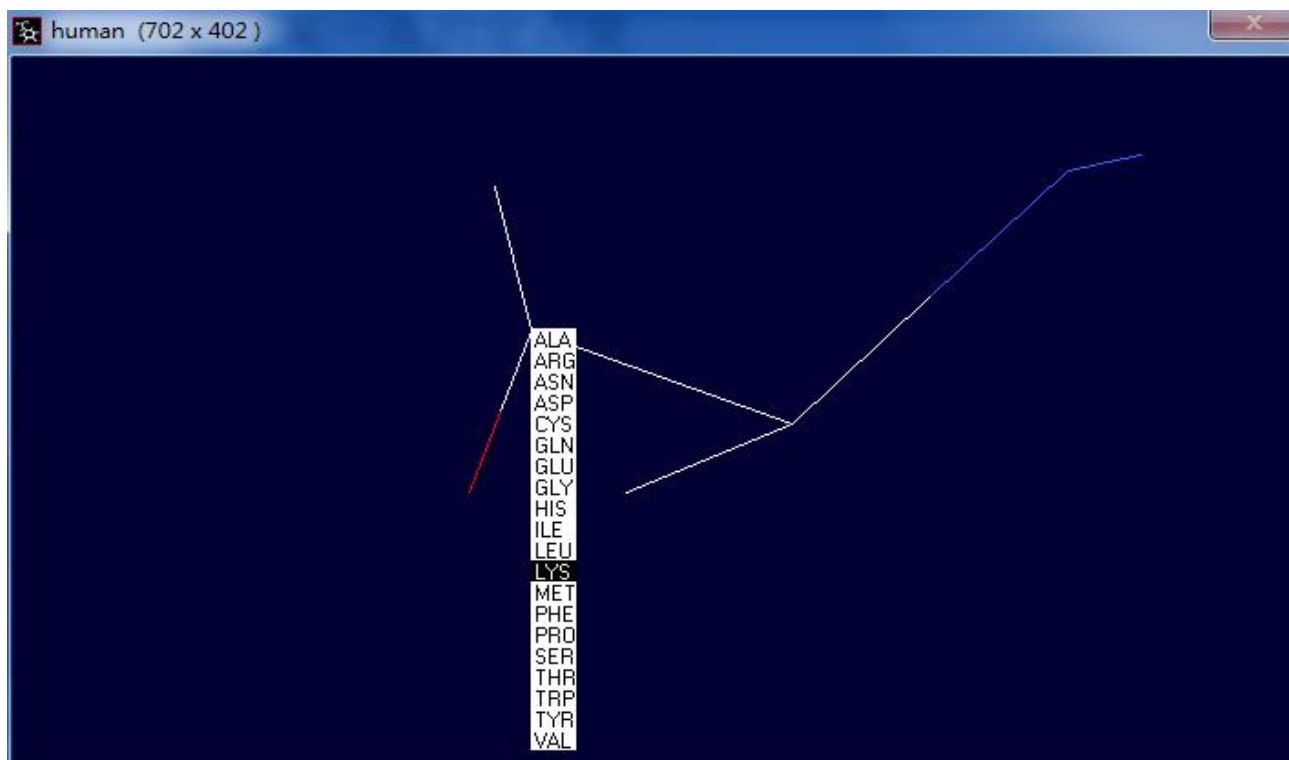
如果发现以上测量的数据不是你想要的，可以清除，重新测量。

选择： Display→Labels→Clear User Labels

对某一点的定点突变



可以应用这个工具对某一点的定点突变

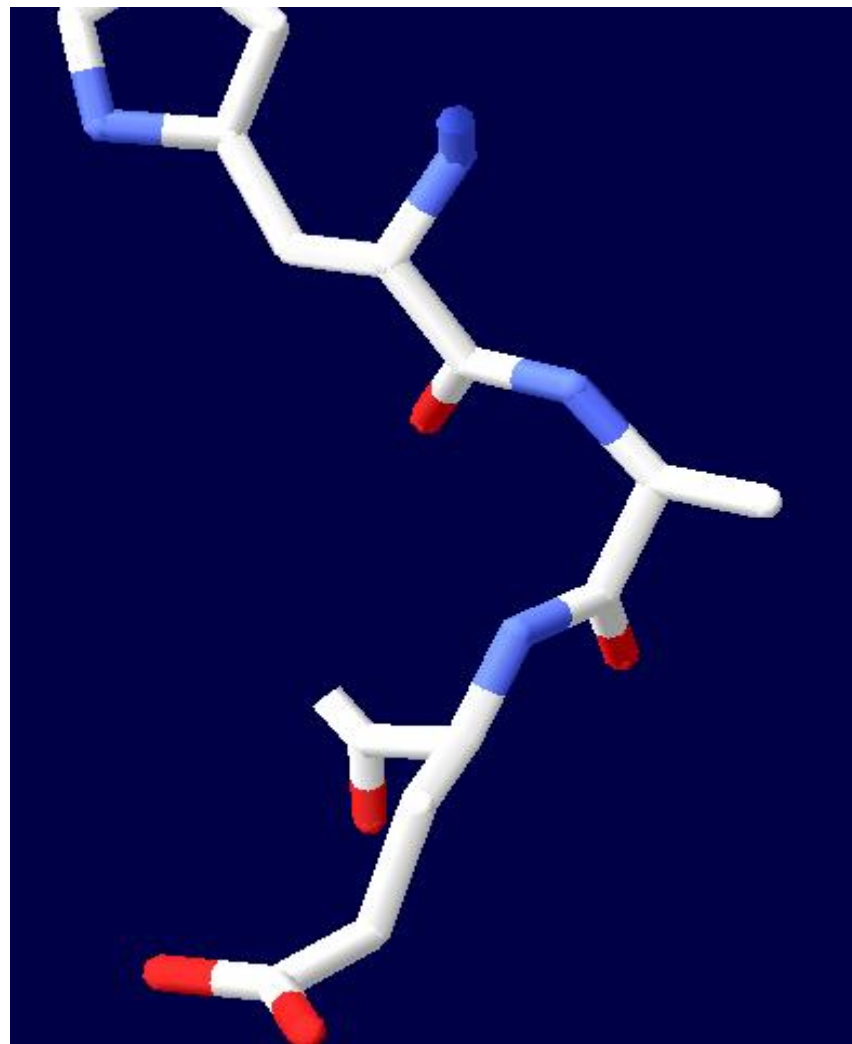


Select选项

- None
 - All
 - Inverse selection
 - Group kind
 - Group property
 - Secondary structure
- 螺旋 (helix)
- 折叠 (strand)
- 无规卷曲 (coil)

Display选项

- 可显示或隐藏所选择的
的目标分子
- Label
- Render in solid 3D



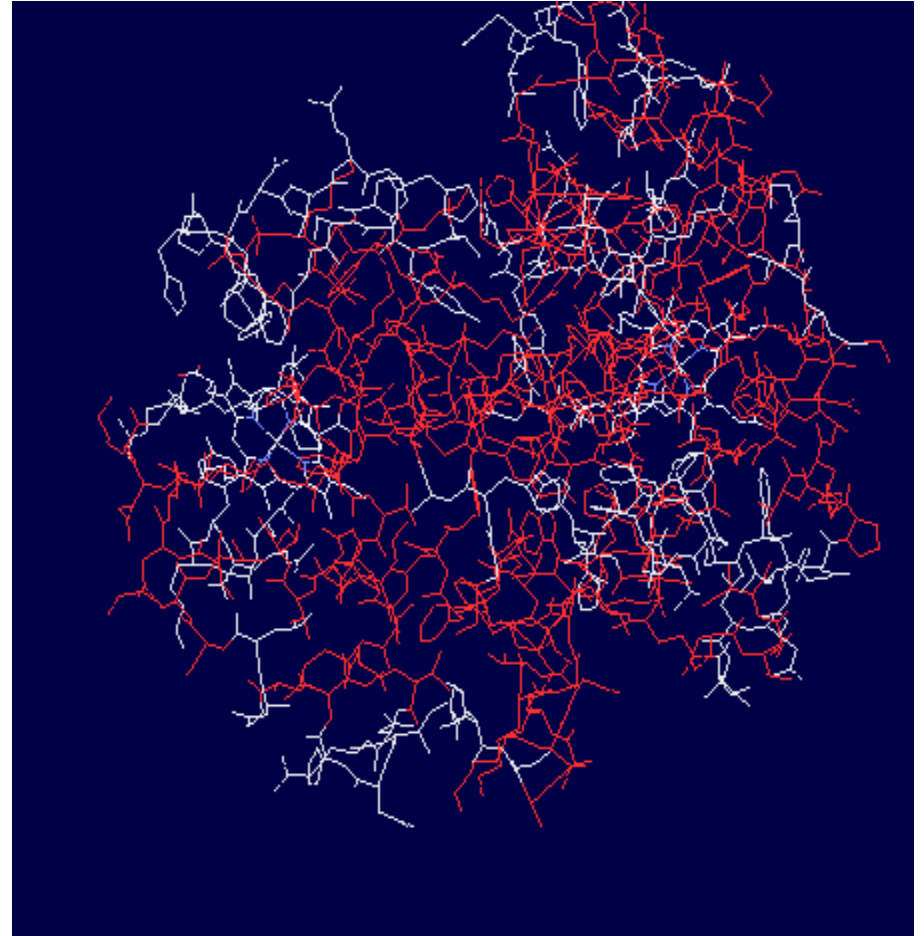
Color选项

- Color选项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Ia4f为例：

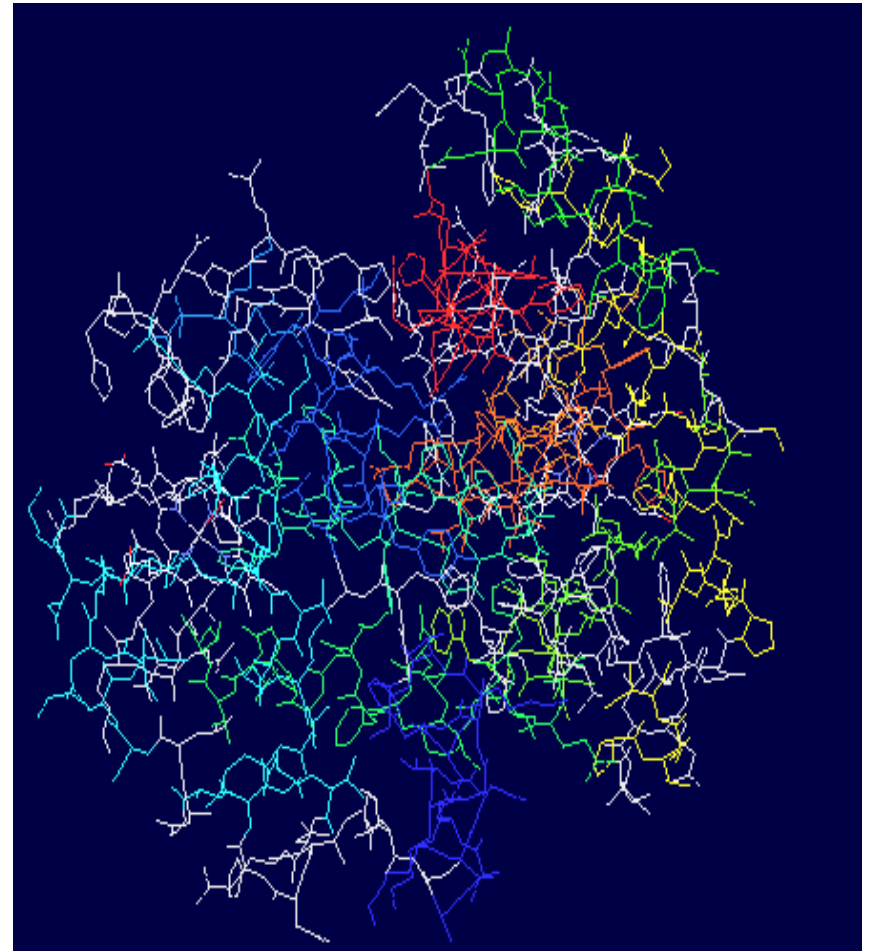
Color-----Secondary Structure

- 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



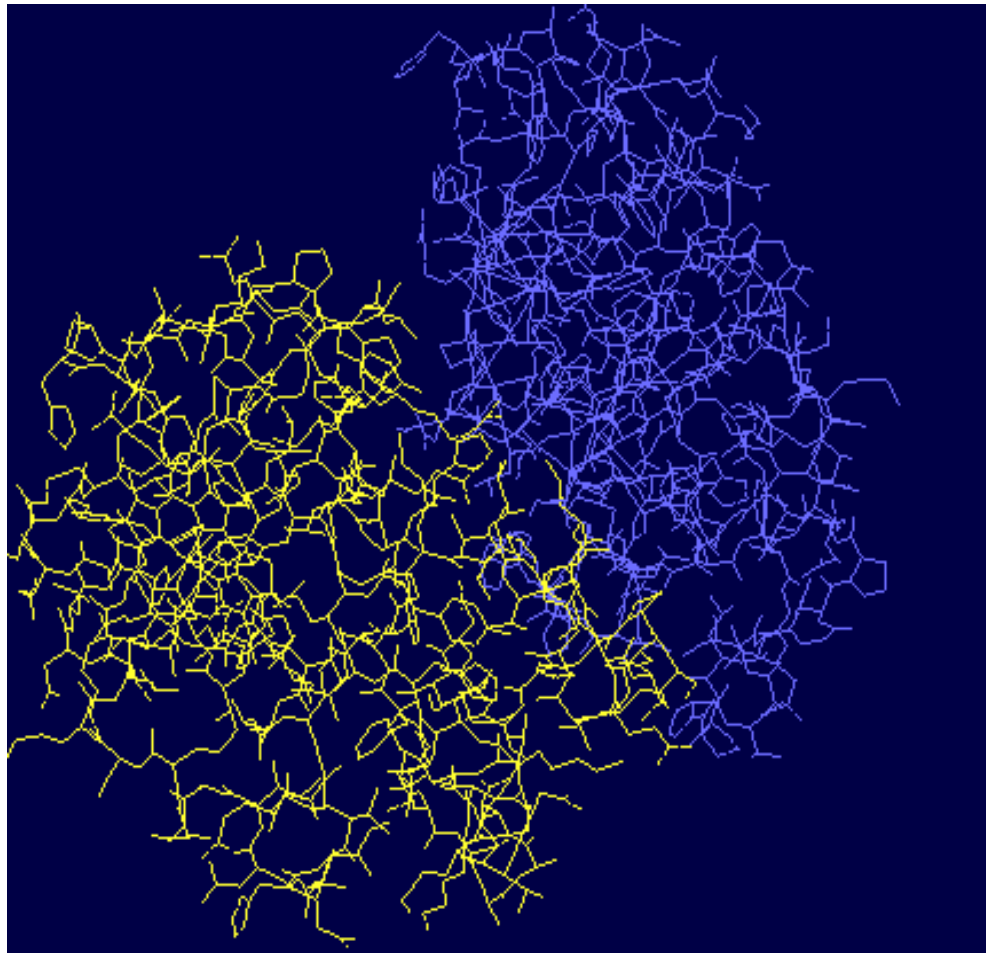
Color选项

- Secondary Structure Succession
整个序列的每个二级结构用不同的颜色显出来



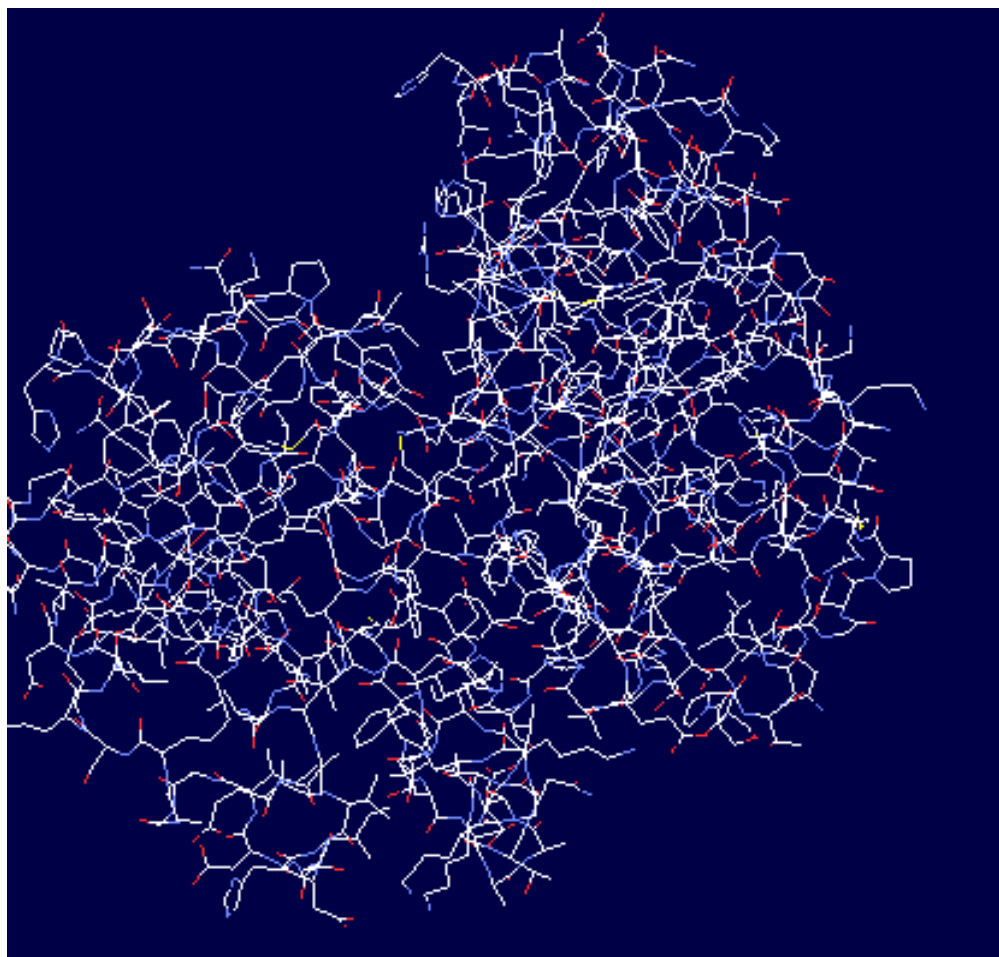
Color选项

by Chain 不同的链用不同的颜色表示出来



Color选项

by CPK 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



关闭与保存PDB文件

一、 关闭pdb文件

关闭一个PDB文件，可以点击file—close

二、 保存pdb文件

1、 file→Save→ Current Layer(Ctrl+S)保存在显示窗口活动的蛋白分子的 PDB文件。

关闭与保存PDB文件

- 2、 Save selected residues of Current Layer
保存被选择的氨基酸残基。
- 3、 还可以保存蛋白序列的 fasta 格式和
当前蛋白质的图像。

谢谢

