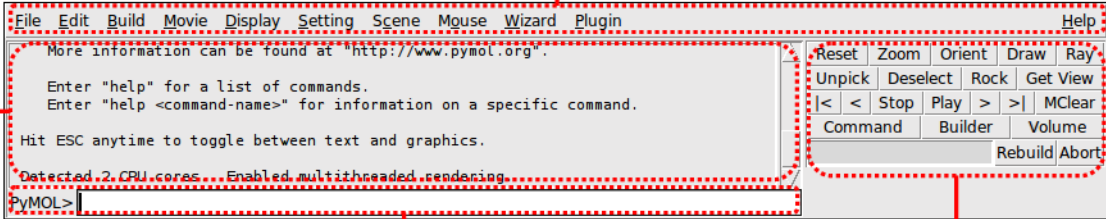


## Le logiciel PyMOL

## La fenêtre de commande



The screenshot shows the PyMOL command window with the following components:

- Menu bar:** File, Edit, Build, Movie, Display, Setting, Scene, Mouse, Wizard, Plugin, Help.
- Text area:**
  - More information can be found at "<http://www.pymol.org>".
  - Enter "help" for a list of commands.
  - Enter "help <command-name>" for information on a specific command.
  - Hit ESC anytime to toggle between text and graphics.
  - Detected 2 CPU cores... Enabled multithreaded rendering.
- Command prompt:** PyMOL>
- Control panel:**
  - Buttons: Reset, Zoom, Orient, Draw, Ray, Unpick, Deselect, Rock, Get View, Command, Builder, Volume, Rebuild, Abort.
  - Navigation: < < Stop Play > > | MClear

Annotations in the image point to:

- Affichage des résultats:** Points to the text area.
- Menus de contrôle:** Points to the control panel.
- Invite de commande:** Points to the command prompt.
- Options de visualisation:** Points to the control panel.

## Les menus

### Le menu File :

- Open
- Save Session
- Save Molecule
- Save Image As
- Log...
- Run...
- Quit
- Reinitialize
- Skin

### Le menu Edit :

- Undo
- Redo

### Le menu Build :

- Fragment
- Residue
- Sculpting

### Le menu Movie :

- Append (30 images / s)
- Program
- Remove Last Program
- Reset
- Ray Trace Frame

### Le menu Display :

- Sequence
- Sequence Mode
- Quality
- Show Valence

### Le menu Setting :

- Edit All...
- Colors...
- Label
- Cartoon
- Surface
- Transparency

## La fenêtre de commande

### Le menu Scene :

- Next
- Previous
- Insert
- Cache

### Le menu Mouse :

- Selection Mode
- ...

### Le menu Wizard :

- Measurement
- Mutagenesis
- Charge

### Le menu Plugin :

- Plugin Manager
- ...

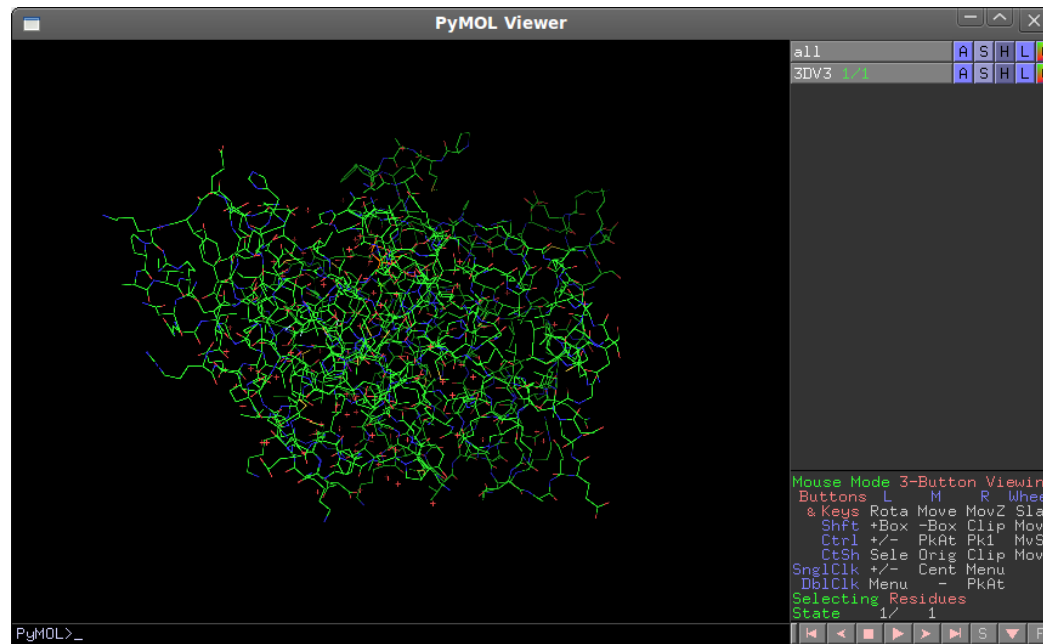
### Le menu Help :

- Topics
- PyMOL Community Wiki

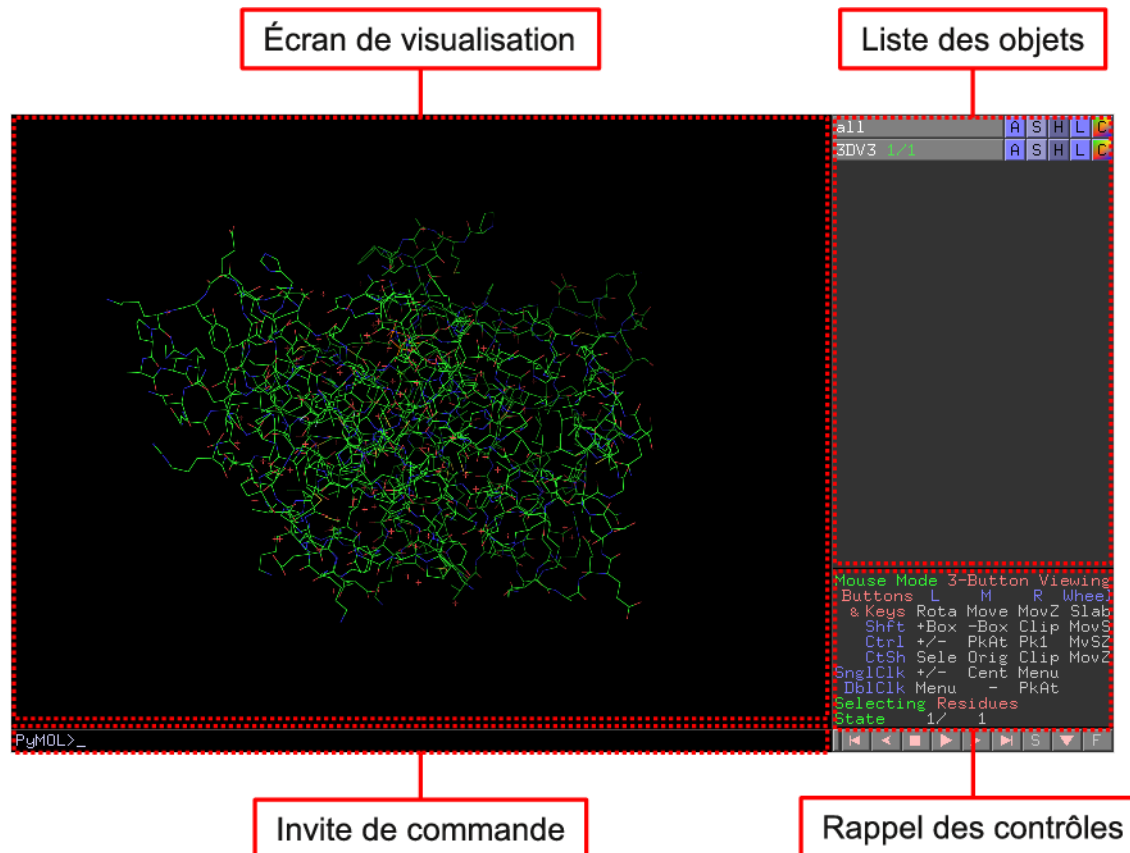
## Chargement d'une molécule

Pour charger une molécule :

- File → Open...
- **PyMOL>** load 3DV3.pdb
- Plugin → PDB Loader Service
- **PyMOL>** fetch 3DV3



## La fenêtre de visualisation



**Note :** La zone *rappel des contrôles* permet de modifier le comportement de la souris

## Les modes de visualisation

### Le menu 'S' (`show`, `show_as`) et son antonyme 'H' :

- Lines – fil de fer
- Sticks – bâton
- Ribbon – ruban
- Cartoon – cartoon
- Label – label (étiquette)
- Cell – cellule cristallographique
- Nonbonded – non lié
- Dots – sphère représentée par des points
- Spheres – sphère (proportionnel à van der Waals)
- Nb\_spheres – sphère pour les atomes isolés
- Mesh – surface sous forme de fil de fer
- Surface – surface pleine
- Organic – mode d'affichage pour les molécules organiques
- Main chain – mode d'affichage pour la chaîne principale
- Side chain – mode d'affichage pour les chaînes latérales
- Disulfide – liaison disulphure

## Les sélections

### Plusieurs méthodes :

- sélection avec la souris (structure ou séquence) ;
- sélection précise à l'aide des opérateurs de sélection ;
- extension à partir d'une sélection existante.



## Utilisation de la souris (mode *Viewing*)

Combinaison	Bouton de la souris		
	Gauche	Milieu	Droite
Aucun	Rotation libre	Translation axe x et y	Translation axe z (zoom)
Shift	Agrandissement d'une sélection	Réduction d'une sélection	Déplacement du plan de coupe
Ctrl	Modification libre de la sélection	Sélection de type PkAt	Sélection de type Pk1
Shift+Ctrl	Sélection unique	Sélection de l'origine	Déplacement du plan de coupe
Simple-clic	Modification libre de la sélection	Centrer la vue sur un atome	Menu
Double-clic	Menu de contrôle	Centrer la vue sur un atome	Sélection de type PkAt

## Modification des sélections

### Le menu 'A' (*Action*) :

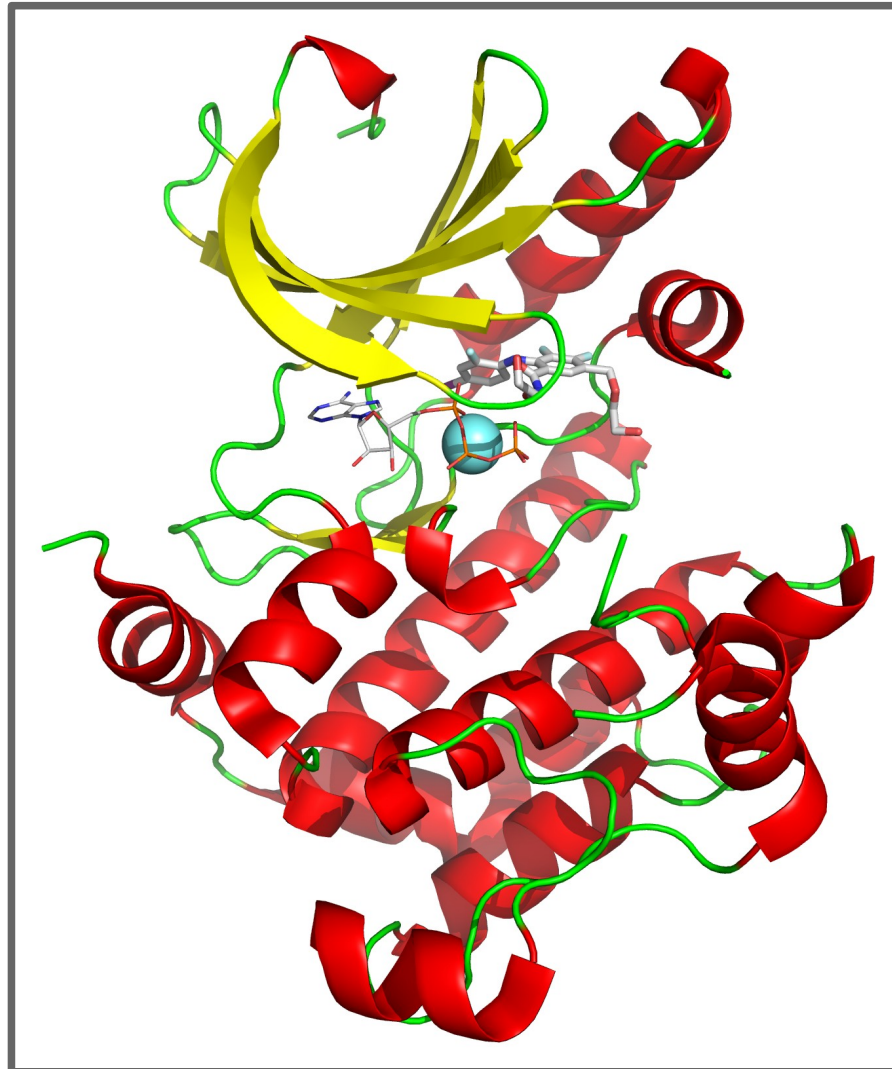
- delete selection – supprimer la sélection
- rename selection – renommer la sélection
- zoom – zoom sur la sélection
- orient – zoom sur la sélection et oriente la sélection afin d'occuper au mieux l'écran
- center – centre la vue sur la sélection
- origin – place l'origine (rotation, translation) sur la sélection
- modify – ensemble d'outils pour modifier la sélection
- preset – appliquer un style prédéfini
- remove atoms – supprimer des atomes de l'objet parent
- copy to object – créer un objet avec la sélection
- extract to object – créer un objet avec la sélection et supprime la sélection de l'objet parents
- movement – permet de fixer la sélection lors du mouvement de l'objet (translation, rotation)

## Cas concret : reproduction d'une illustration

### Étapes à suivre :

- Cacher toutes les structures
- Afficher la séquence
- Créer des sélections avec les différentes molécules
- Appliquer des styles différents aux différentes sélections
- Orienter la protéine
- Effectuer un lancer de rayon

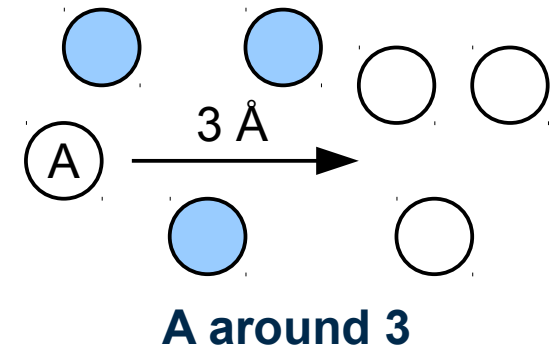
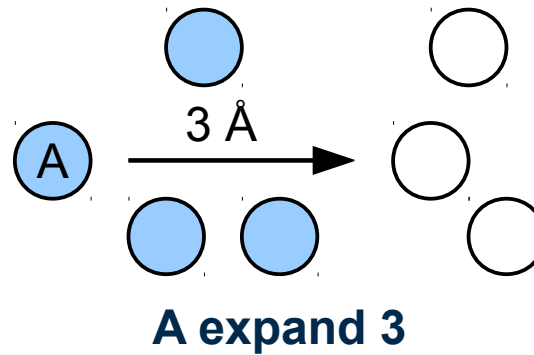
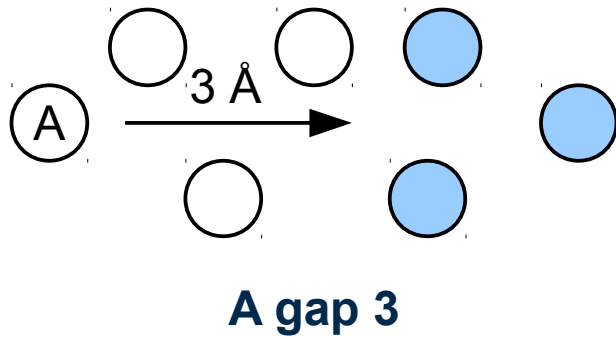
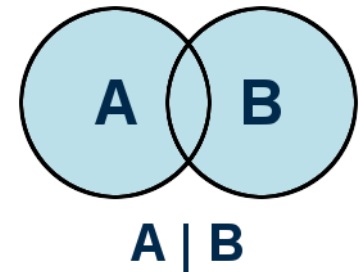
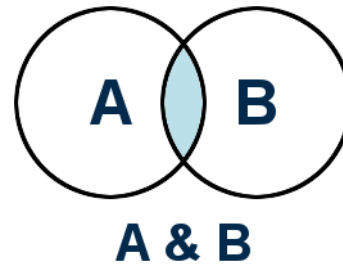
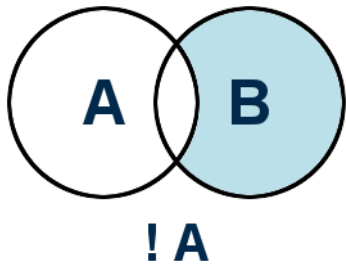
## Résultat (en utilisant la souris)



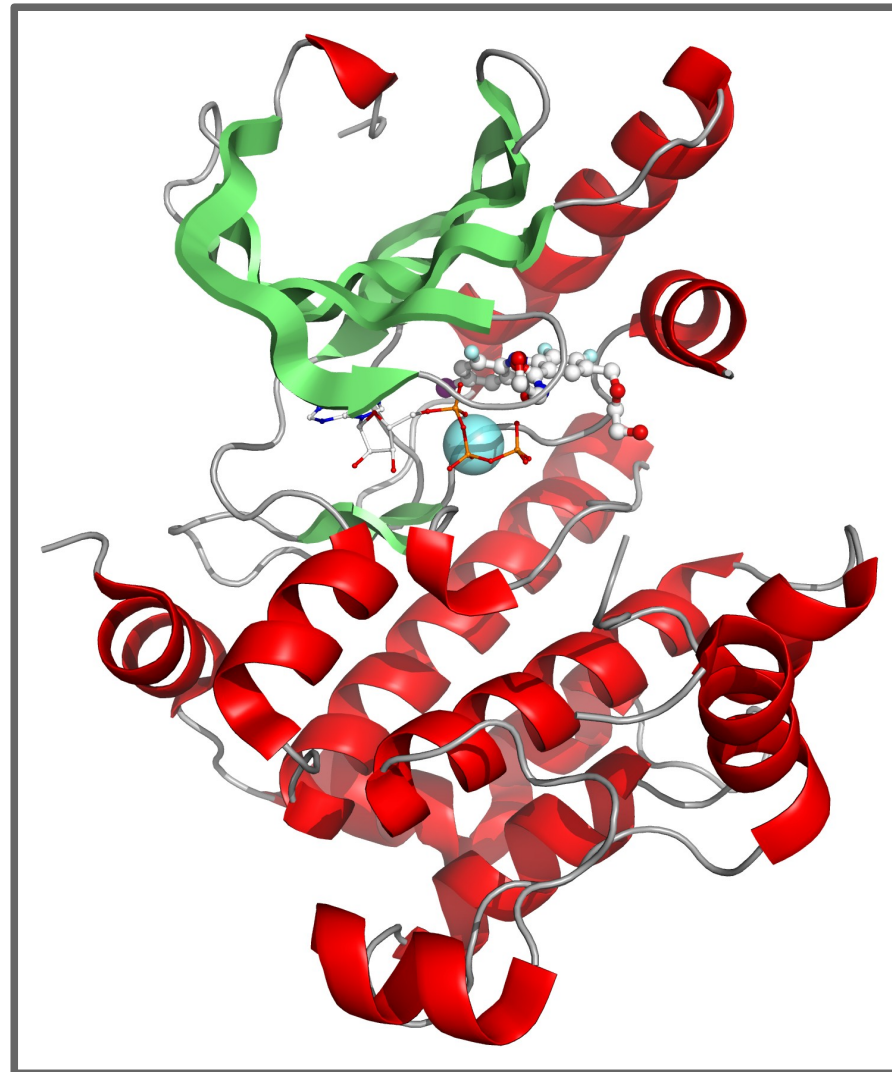
## Les opérateurs de sélection

Opérateur	Raccourci	Description
not s1	!s1	Sélectionne les atomes qui ne sont pas dans <i>s1</i> .
s1 and s2	s1 & s2	Sélectionne les atomes appartenant à la fois à la sélection <i>s1</i> et à la sélection <i>s2</i> .
s1 or s2	s1   s2	Sélectionne les atomes appartenant aux sélections <i>s1</i> et <i>s2</i> .
s1 in s2	s1 in s2	Sélectionne les atomes de <i>s1</i> dont les identifiants <i>name</i> , <i>resi</i> , <i>resn</i> , <i>chain</i> et <i>segi</i> correspondent aux identifiants d'atomes de <i>s2</i> .
s1 like s2	s1 l. s2	Sélectionne les atomes de <i>s1</i> dont les identifiants <i>name</i> et <i>resi</i> correspondent aux identifiants d'au moins un atome de <i>s2</i> .
s1 gap X	s1 gap X	Sélectionne tous les atomes dont le rayon de van der Waals est séparé du rayon de van der Waals de <i>s1</i> par un minimum de <i>X</i> Angströms.
s1 around X	s1 a. X	Sélectionne les atomes dont le centre est à moins de <i>X</i> Angströms du centre de n'importe quel atome de <i>s1</i> .
s1 expand X	s1 e. X	Étend <i>s1</i> avec tous les atomes à moins de <i>X</i> Angströms du centre de n'importe quel atome de <i>s1</i> .
s1 within X of s2	s1 w. X of s2	Sélectionne les atomes de <i>s1</i> qui sont à moins de <i>X</i> Angströms de <i>s2</i> .
byres s1	br. s1	Étend la sélection aux résidus complets.
byobject s1	bo. s1	Étend la sélection aux objets complets.
neighbor s1	nbr. S1	Sélectionne les atomes directement reliés à <i>s1</i> .

## Théorie des groupes



## Résultat



## Applications des sélections

- object-name/segi-id/chain-id/resi-id/name-id ;
- name, chain, resi, resn et segi

```

PyMOL> hide everything
PyMOL> select mg, resn MG
PyMOL> select atp, resn ATP
PyMOL> select mek, resn MEK
PyMOL> select protein, chain a & !mg & !atp & !mek
PyMOL> show spheres, (atp or mek or mg)
PyMOL> set sphere_scale, 0.2, atp
PyMOL> show lines, atp
PyMOL> set sphere_scale, 0.4, mek
PyMOL> show sticks, mek
PyMOL> set sphere_transparency, 0.2, mg
PyMOL> show cartoon, protein
PyMOL> color red, ss h & protein
PyMOL> color lime, ss s & protein
PyMOL> color grey70, ss ' ' & protein
PyMOL> bg_color white
  
```



## Applications des sélections

```
PyMOL> color white, elem c & (atp or mek)
PyMOL> color cyan, mg
PyMOL> set cartoon_discrete_colors, 1
PyMOL> deselect
```

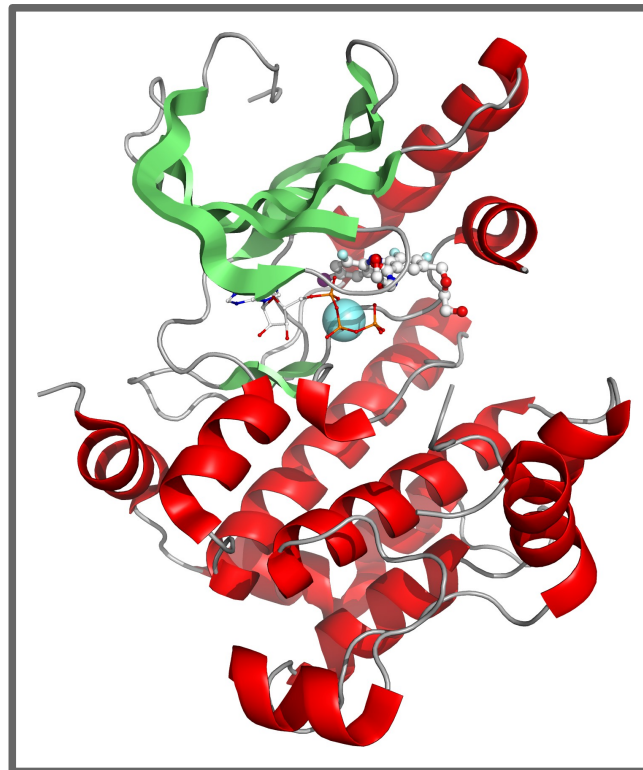
## Modification du type de chaîne

La modification du type de sous-chaîne :

```
PyMOL> alter A/61-66/, ss=''
```

```
PyMOL> rebuild
```

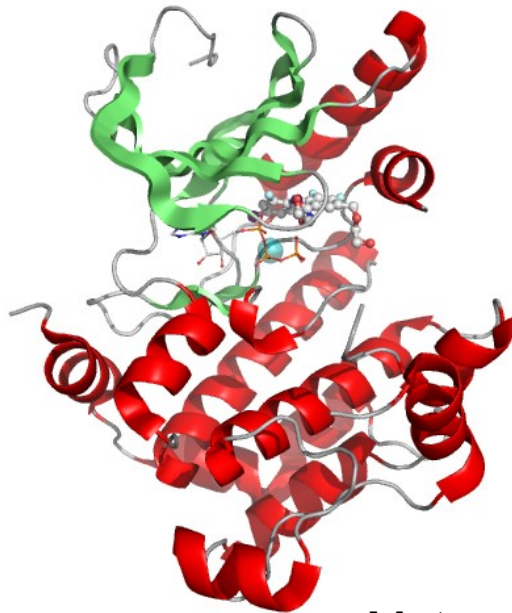
```
PyMOL> color grey70, A/61-66/
```



## Le lancer de rayons

Pour effectuer un lancer de rayons :

- Bouton `ray`
- File → Save Image As → Pov-Ray...
- **PyMOL>** `ray`
- **PyMOL>** `ray 1280` (défaut: 640x480)



Moteur interne



Pov-Ray

## Utilisation de la souris (mode *Editing*)

Combinaison	Bouton de la souris		
	Gauche	Milieu	Droite
Aucun	Rotation libre	Translation axe x et y	Translation axe z (zoom)
Shift	Rotation objet	Translation objet	Translation axe z objet
Ctrl	Déplacement atome	+/- sélection	Modification d'un angle dièdre
Shift+Ctrl	Déplacement atome Z	Sélectionner l'origine	Déplacement du plan de coupe
Simple-clic	Sélection de type PkAt	Centrer un atome	Menu
Double-clic	Déplacement atome	-	Modification d'un angle dièdre

## Sauvegarde

### Pour effectuer une sauvegarde :

- File → Save Session
- File → Save Molecule
- **PyMOL>** `save molecule.pse` (défaut : pdb)

### Pour effectuer une image :

- File → Save Image As → PNG...
- **PyMOL>** `png fichier` (ajoute l'extension automatiquement)
- **PyMOL>** `png fichier, dpi=300`

## **Ressources complémentaires**

---

## Ressources complémentaires

### Général :

<http://www.pymol.org>

<http://www.pymolwiki.org>

### Tutoriaux :

<http://pymol.sourceforge.net/newman/userman.pdf>

[http://www.pymolwiki.org/index.php/Practical\\_Pymol\\_for\\_Beginners](http://www.pymolwiki.org/index.php/Practical_Pymol_for_Beginners)

[http://www.alchem.org/article.php3?id\\_article=25](http://www.alchem.org/article.php3?id_article=25)

<http://www.carlyhuitema.com/pymol.html>

[http://www.mrc-lmb.cam.ac.uk/rlw/text/MacPyMOL\\_tutorial.html](http://www.mrc-lmb.cam.ac.uk/rlw/text/MacPyMOL_tutorial.html)

<http://www.ebi.ac.uk/~gareth/pymol/pymol.shtml>