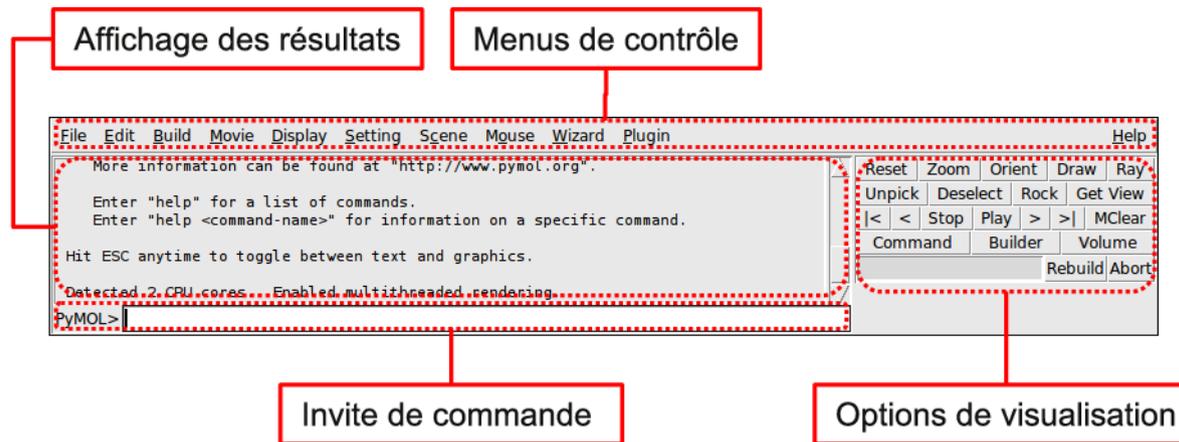


Le logiciel PyMOL

La fenêtre de commande



The screenshot shows the PyMOL command window interface. It features a menu bar at the top with options: File, Edit, Build, Movie, Display, Setting, Scene, Mouse, Wizard, Plugin, and Help. The main area contains text instructions: "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.", and "Hit ESC anytime to toggle between text and graphics." Below this is a status line: "Detected 2 CPU cores... Enabled multithreaded rendering." and a command prompt "PyMOL>". On the right side, there is a control panel with buttons for: Reset, Zoom, Orient, Draw, Ray, Unpick, Deselect, Rock, Get View, Command, Builder, Volume, Rebuild, and Abort. Red callout boxes point to specific parts: "Affichage des résultats" points to the text area, "Menus de contrôle" points to the menu bar, "Invite de commande" points to the command prompt, and "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
- ...

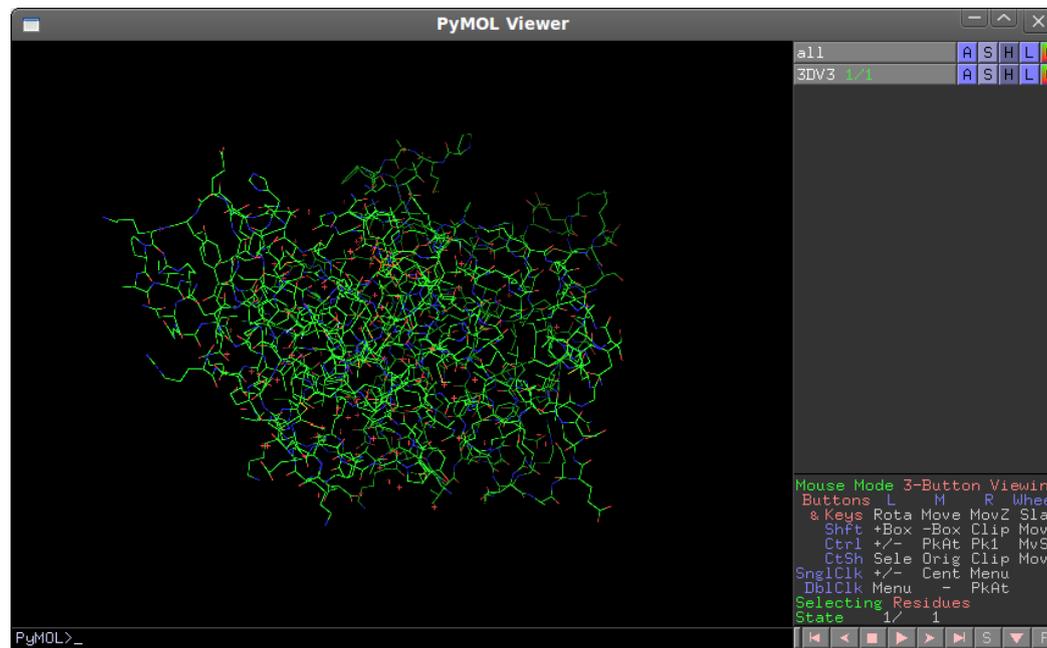
Le menu Help :

- Topics
- PyMOL Community Wiki

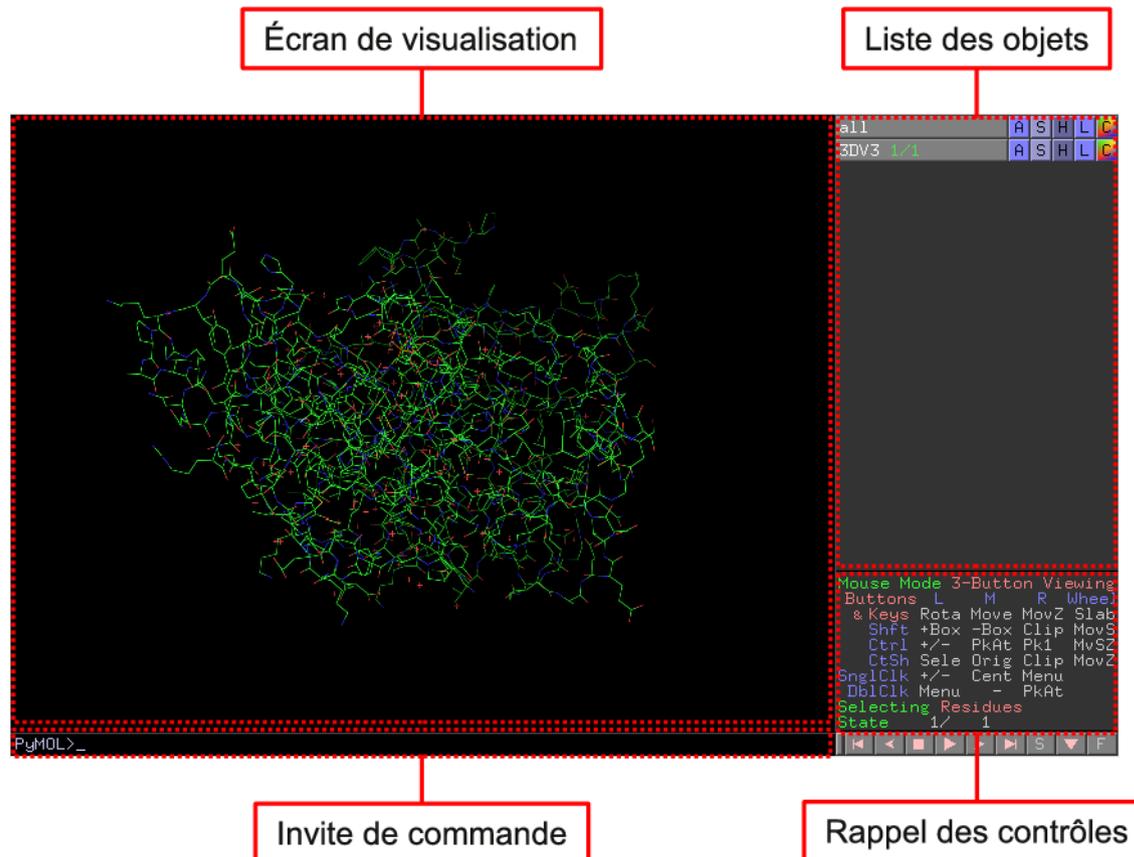
Chargement d'une molécule

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*) :

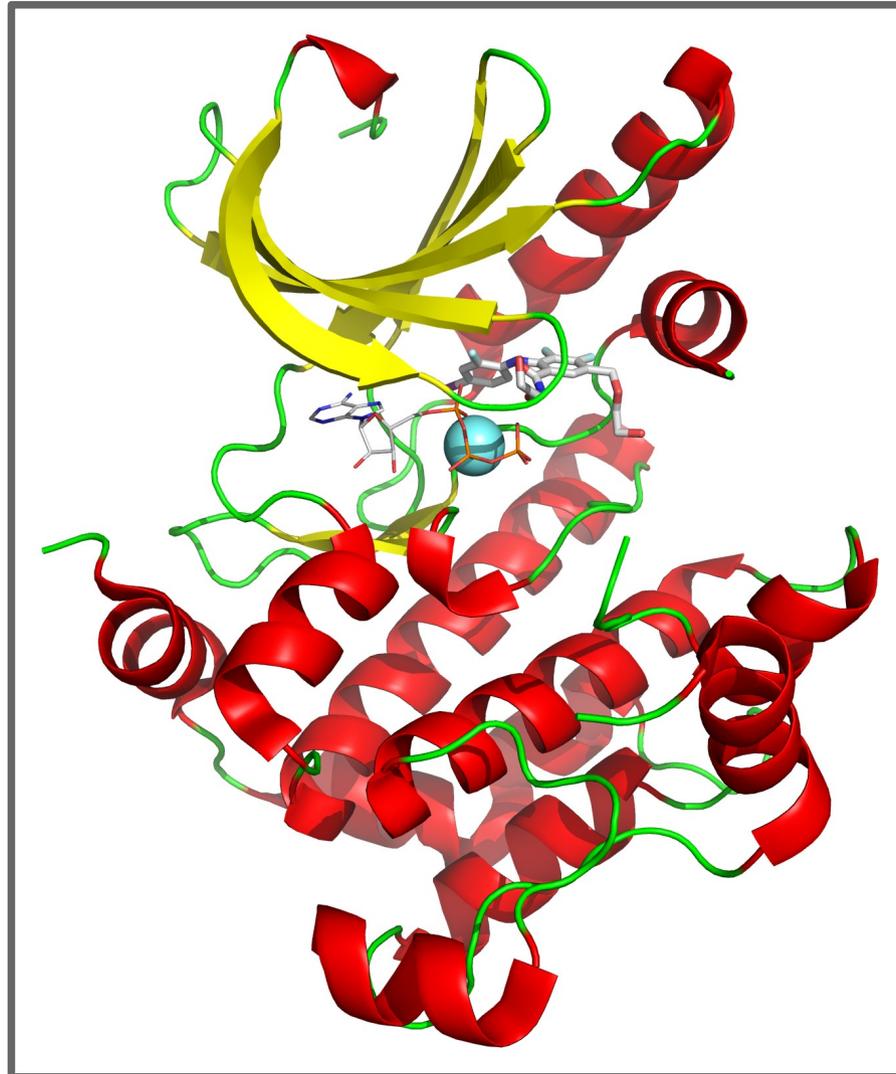
- delete selection – supprimer la sélection
- rename selection – renommer la sélection
- zoom – zoom sur la sélection
- orient – zoom sur la sélection et oriente la sélection afin d'occuper au mieux l'écran
- center – centre la vue sur la sélection
- origin – place l'origine (rotation, translation) sur 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

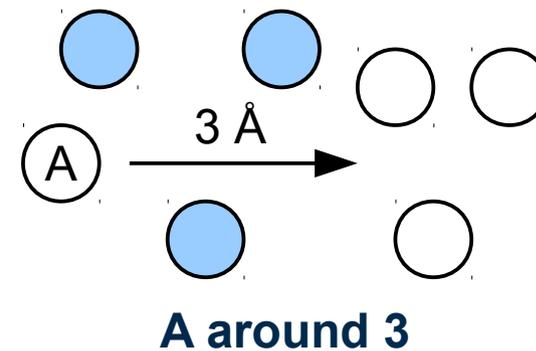
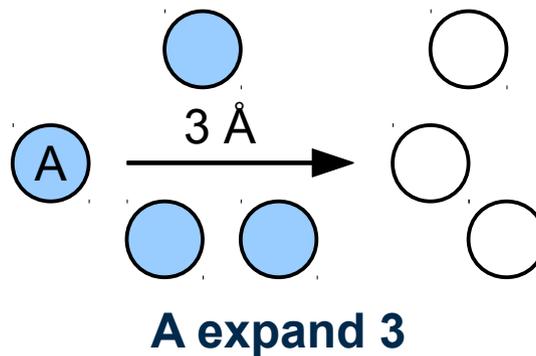
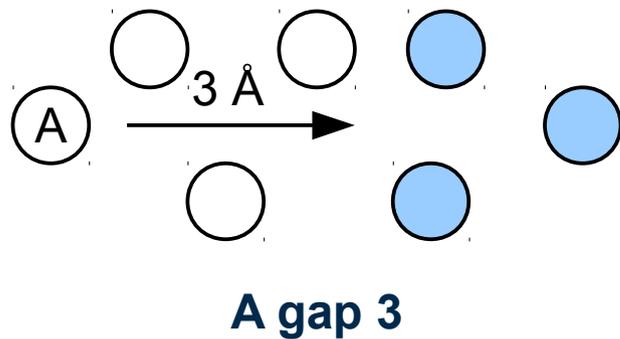
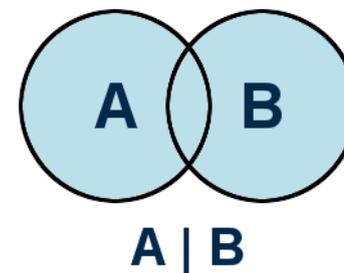
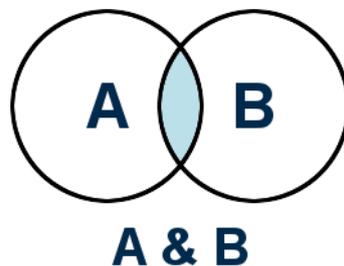
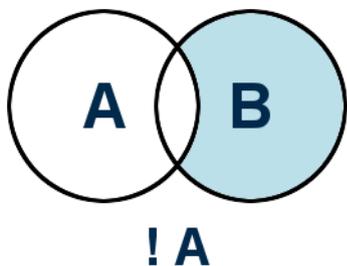
Résultat (en utilisant la souris)



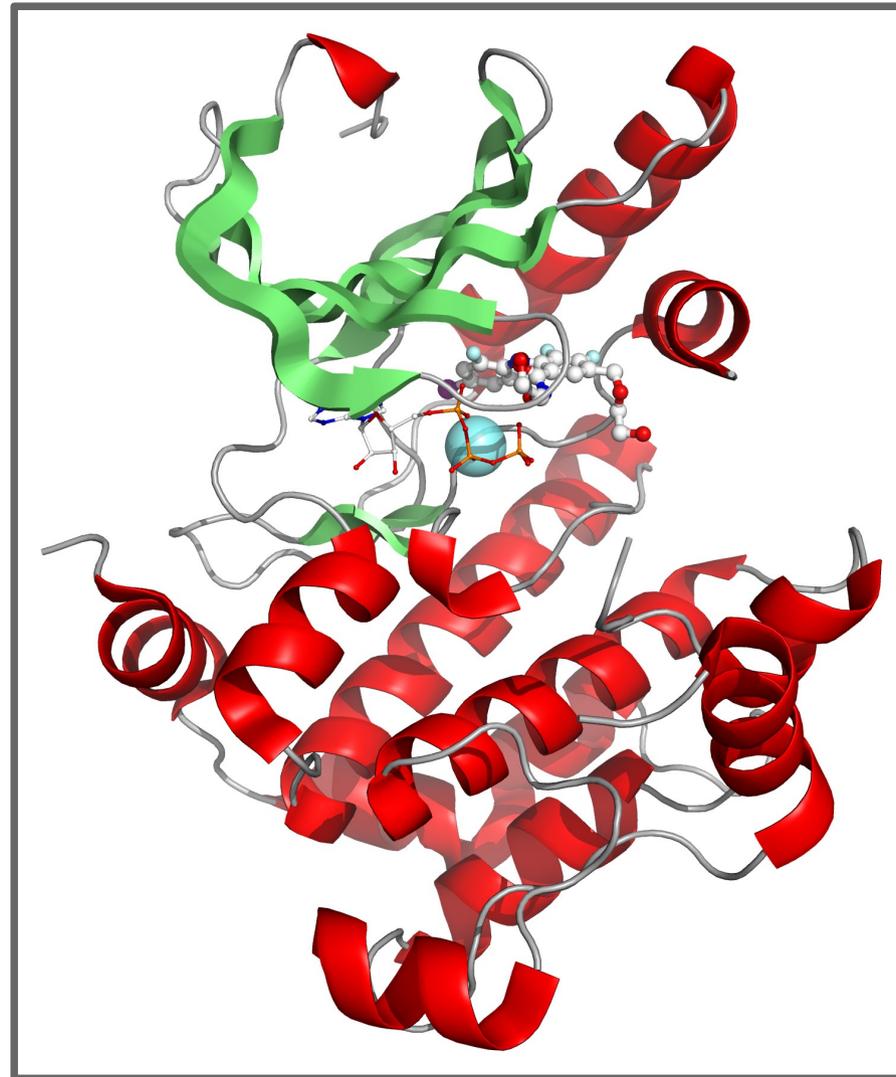
Les opérateurs de sélection

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/segid/chain-id/resid/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
```

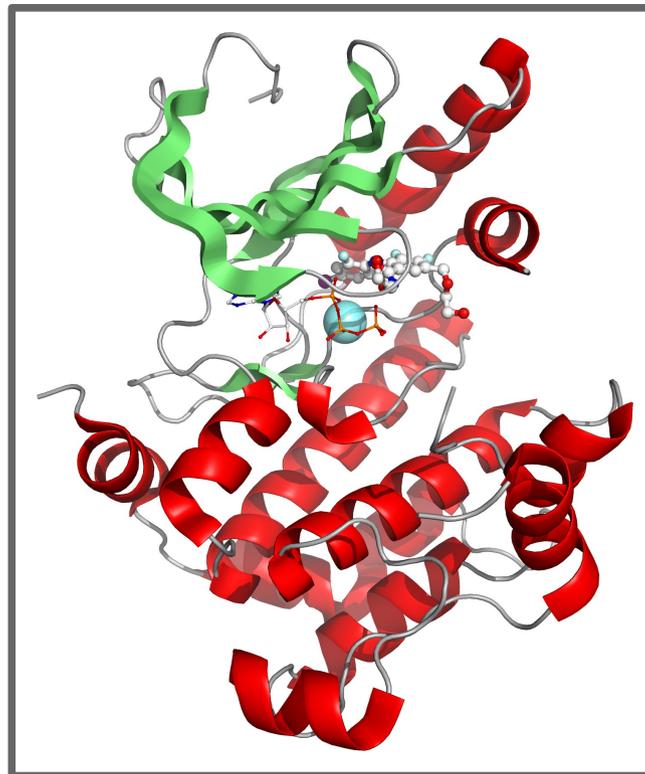
Modification du type de chaîne

La modification du type de sous-chaîne :

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

```
PyMOL> rebuild
```

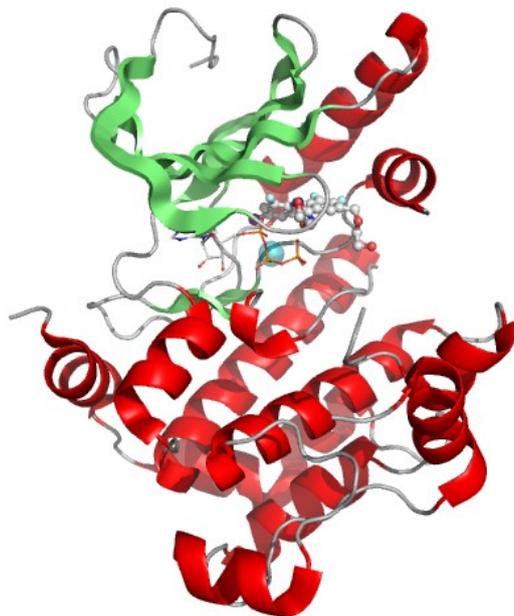
```
PyMOL> color grey70, A/61-66/
```



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.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.ebi.ac.uk/~gareth/pymol/pymol.shtml>