

Schülerlabor: Bioinformatik Workshop

1 Pymol

1.1 Allgemeine Bedienung

- Rein- und rauszoomen: **[strg]** + Mausrädchen
- Struktur **rotieren**: Linksklick halten und dann die Maus bewegen
- Letzte Aktion **rückgängig** machen: **[strg]** + **[Z]**
- **Transparenz** der Struktur verändern: Mausrädchen
- Was tun, wenn du deine Struktur nicht mehr siehst:
 - Klicke: A > center (dritte Option bei A), so wird deine Struktur zentriert
 - Benutze das Mausrädchen (Richtung: von dir weg), falls das Protein transparent war
 - Falls du immer noch nichts siehst: S > cartoon (für das Protein) und S > sticks (für das Molekül)
- Dateien **öffnen**: File > Open... > 3w32_protein.pdbqt (navigiert dorthin, wo die Datei bei euch auf dem Laptop liegt (Desktop/schuelerlabor-main/data/input_data), siehe Bild 1)

1.2 Zusätzliche Funktionalitäten

- **Farbe** ändern: Bild 2
- **Oberfläche** anzeigen/verbergen: Klicke bei dem Protein auf S (zum Anzeigen) oder H (zum Verbergen) und danach auf **surface**, siehe Bild 3
- **Wasserstoffbrücken** anzeigen: Klicke auf dem Molekül A > find > polar contacts > to any atoms, siehe Bild 4

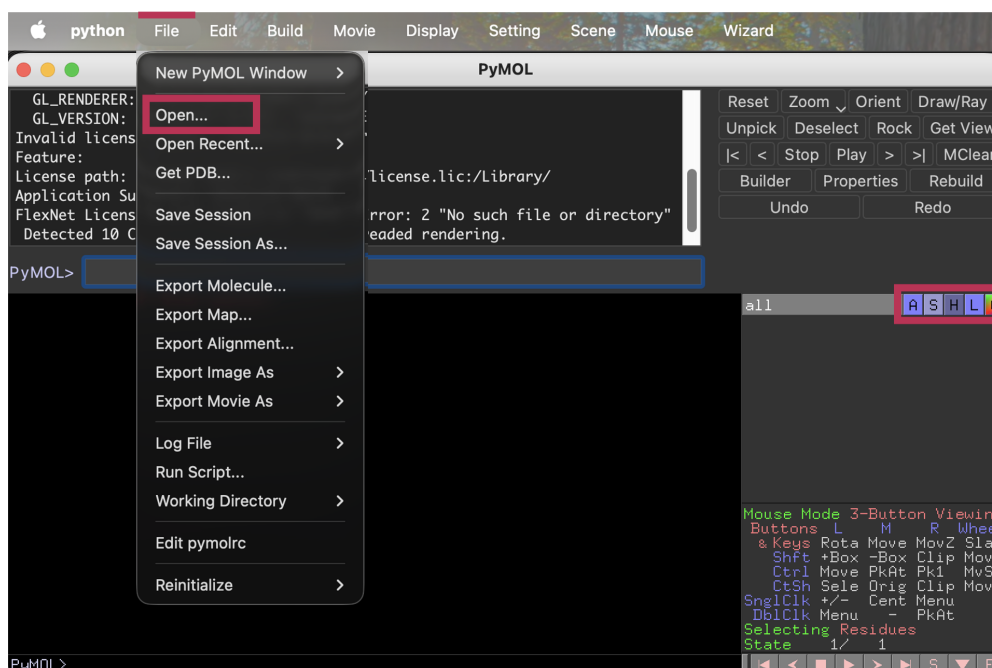


Figure 1: Datei in PyMOL öffnen.

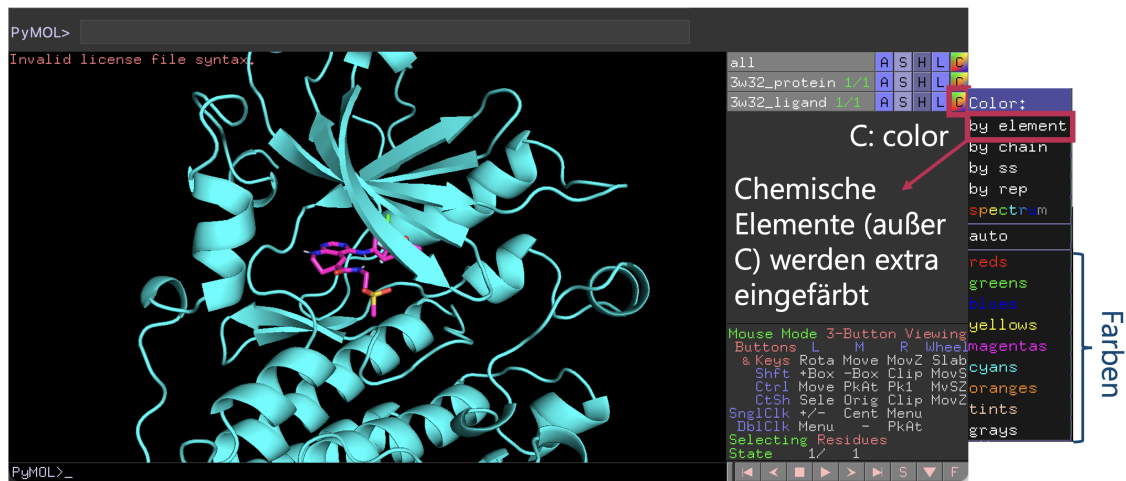


Figure 2: Farben in PyMOL. Es kann alles in einer Farbe angezeigt werden oder nur alle Kohlenstoffatome ('by element'). Bei letzterem werden alle anderen Atomtypen (z.B. Stickstoff, Chlor, Schwefel etc.) in anderen Farben angezeigt, sodass man diese unterscheiden kann.

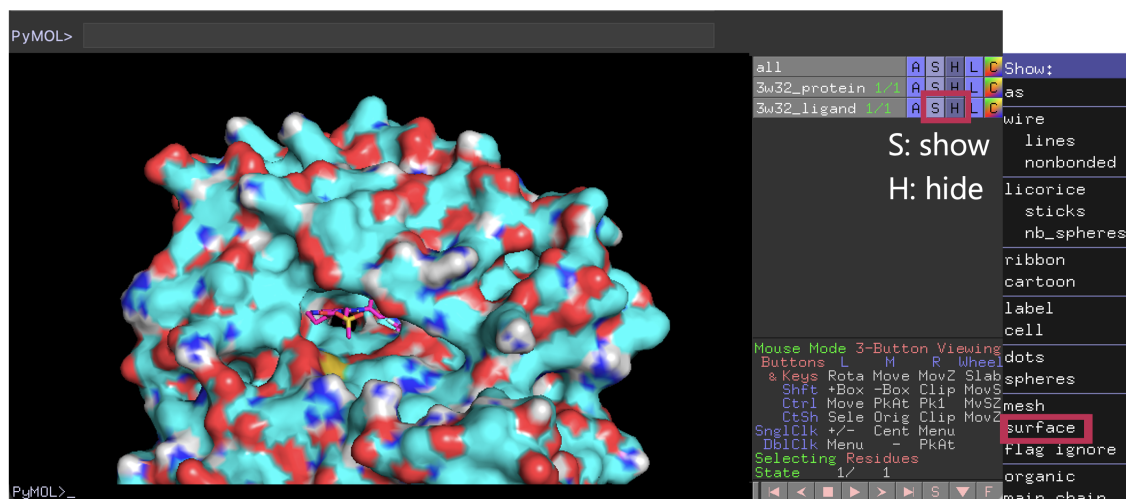


Figure 3: Proteinoberfläche in PyMOL anzeigen lassen.

2 Miniforge Prompt (Kommandozeile)

2.1 Allgemeine Befehle

- In einen Ordner wechseln: `cd ordner_name`
- In der Ordnerstruktur eins zurück: `cd ..`
- Alle Dateien in einem Ordner anzeigen: `dir`
- Durchrotieren von vorherigen Befehlen: Pfeiltasten $\uparrow + \downarrow$
- Innerhalb einer Zeile bewegen: Pfeiltasten $\leftarrow + \rightarrow$
- Kopieren von Text/Befehlen: Text markieren `strg + C`
- Einfügen von Text/Befehlen: An der gewünschten Stelle `strg + V`

2.2 Docking

- Wie kann ich das **Docking**-Programm starten?
 - Öffne die Miniforge Prompt (siehe Abbildung 5).
 - `cd Desktop`
 - `cd schuelerlabor-main`

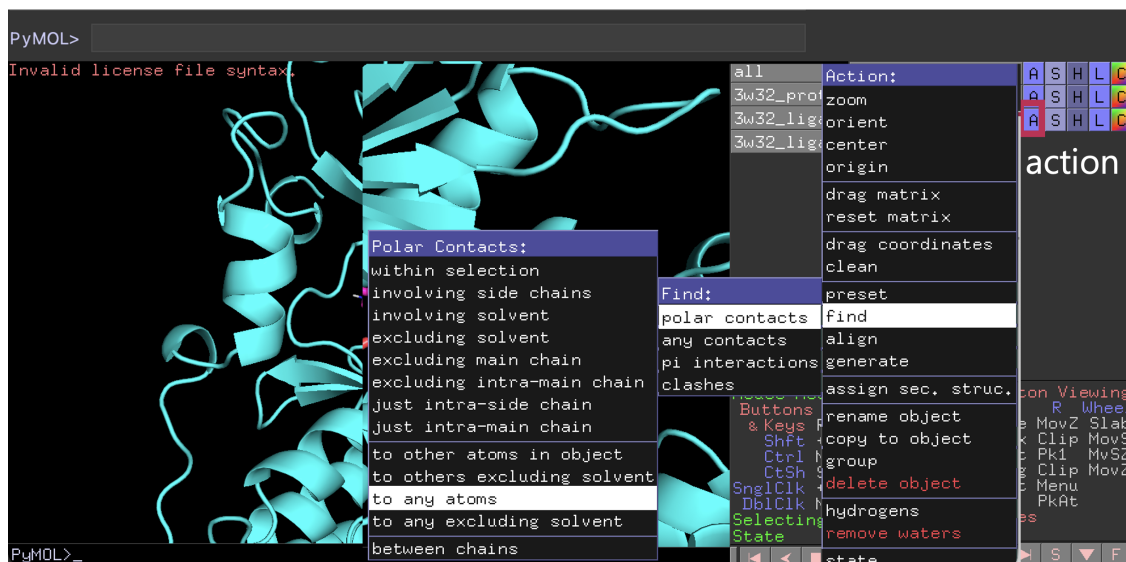


Figure 4: Wasserstoffbrückenbindungen in PyMOL einzeichnen.

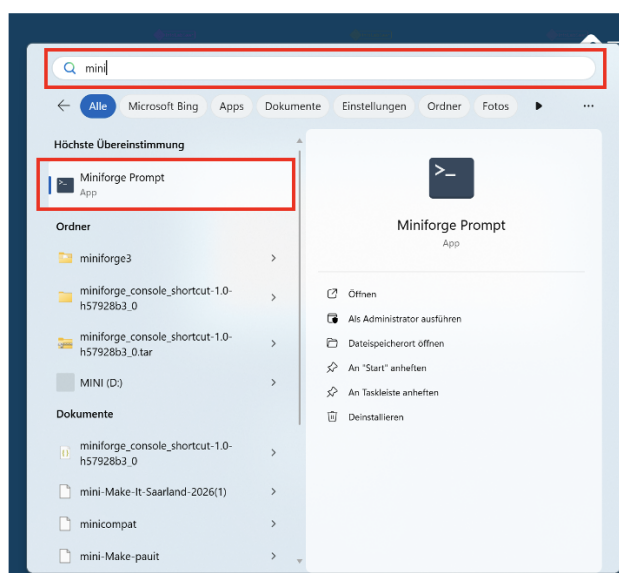


Figure 5: So findet ihr die Miniforge Prompt auf eurem Computer.

- `cd data`
- `cd input_data`
- `smina`
- Befehl für das Redocking: Am besten aus `redocking_befehl.txt` in die Miniforge Prompt kopieren


```
smina --ligand 3w32_ligand.pdbqt --receptor 3w32_protein.pdbqt
--out docking_poses.pdbqt --autobox_ligand 3w32_ligand.pdbqt --num_modes 3
```
- Befehl für das vollständige Docking: Am besten aus `docking_befehl.txt` in die Miniforge Prompt kopieren


```
smina --ligand test_ligands.sdf --receptor 3w32_protein.pdbqt
--out screened_molecules.sdf --autobox_ligand 3w32_ligand.pdbqt --num_modes 3
```