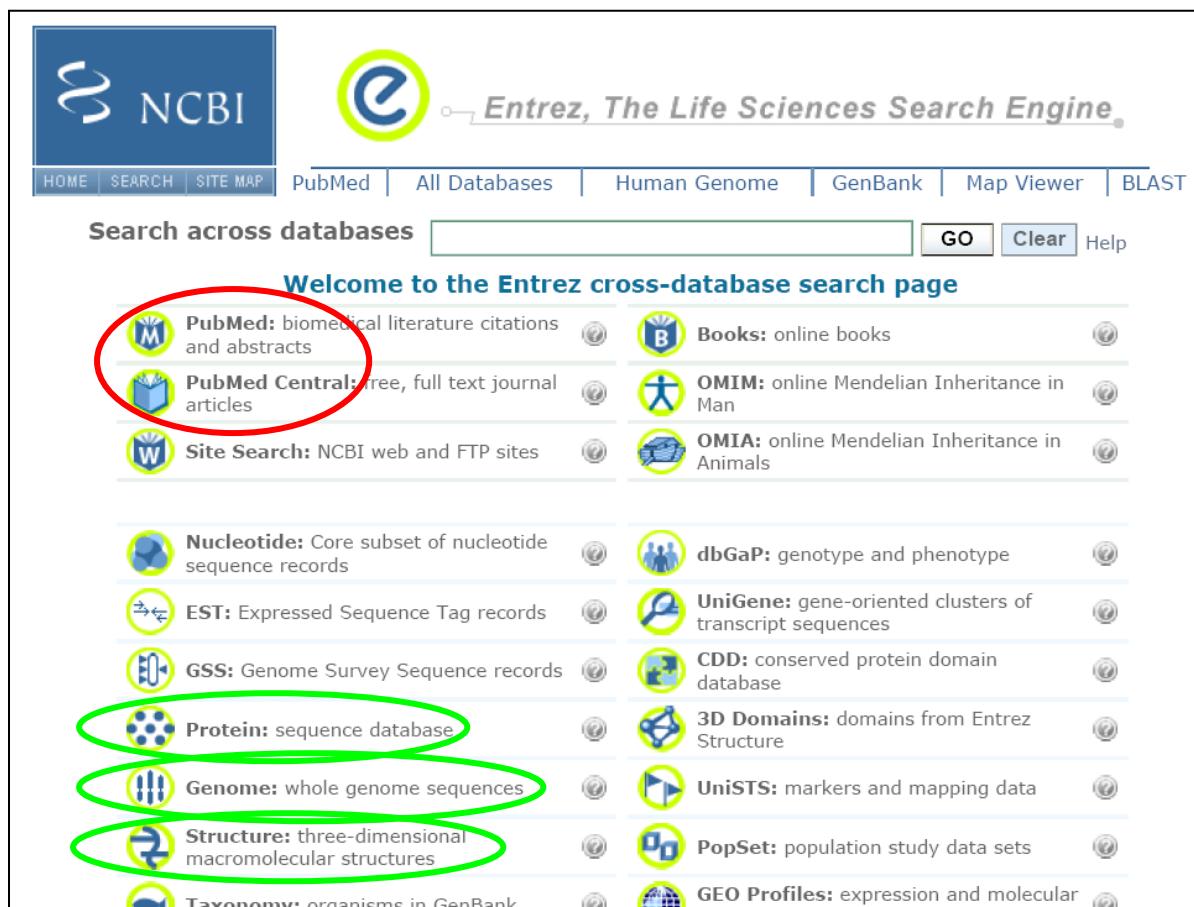


Information (Lehrer):

Kleiner Führerschein für Datenbanken und ein Programm zur 3D-Visualisierung

Mit der **Bioinformatik** hat sich ein eigener interdisziplinärer Wissenschaftszweig entwickelt, der Sequenzdaten für Nukleinsäuren und Proteine von Organismen sammelt und organisiert, 3D-Strukturdaten verschiedenster makromolekularer Moleküle analysiert und Visualisierungsprogramme für Biomoleküle und biologische Prozesse bereitstellt. Mittlerweile wurden weltweit Abermillionen solcher Datensätze generiert. Um diese Datenflut zu verwalten und auch allen Mitgliedern (vor allem) der Wissenschaftsgemeinschaft zugänglich zu machen, existieren Datenbanken; die umfangreichste befindet sich an den National Institutes of Health (NIH) in den USA (<http://www.ncbi.nlm.nih.gov/sites/gquery>). Diese Art „GOOGLE“-Suchmaschine für Wissenschaftler findet und vergleicht nicht nur Sequenzdaten (grüne Markierungen), sondern ermöglicht mit „PubMed“ auch die Suche nach Originalveröffentlichungen aus der biomedizinischen Forschung (rote Markierung).



The screenshot shows the NCBI Entrez search interface. At the top, there is a navigation bar with links for HOME, SEARCH, SITE MAP, PubMed, All Databases, Human Genome, GenBank, Map Viewer, and BLAST. Below the navigation bar, there is a search bar labeled "Search across databases" with a "GO" button and a "Clear" button. The main content area is titled "Welcome to the Entrez cross-database search page". It lists several databases with their icons and descriptions:

- PubMed:** biomedical literature citations and abstracts
- PubMed Central:** free, full text journal articles
- Site Search:** NCBI web and FTP sites
- Nucleotide:** Core subset of nucleotide sequence records
- EST:** Expressed Sequence Tag records
- GSS:** Genome Survey Sequence records
- Protein:** sequence database
- Genome:** whole genome sequences
- Structure:** three-dimensional macromolecular structures
- Taxonomy:** organisms in GenBank
- Books:** online books
- OMIM:** online Mendelian Inheritance in Man
- OMIA:** online Mendelian Inheritance in Animals
- dbGaP:** genotype and phenotype
- UniGene:** gene-oriented clusters of transcript sequences
- CDD:** conserved protein domain database
- 3D Domains:** domains from Entrez Structure
- UniSTS:** markers and mapping data
- PopSet:** population study data sets
- GEO Profiles:** expression and molecular

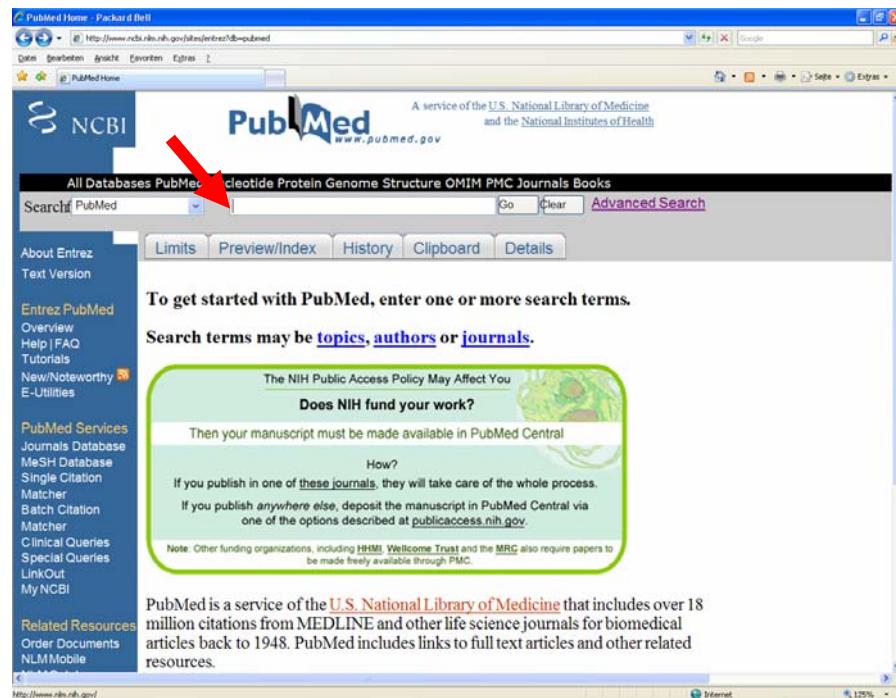
Two specific sections of the list are highlighted with colored circles: "Protein" (green circle), "Genome" (green circle), and "Structure" (green circle). Additionally, "PubMed" and "PubMed Central" are circled in red.

Inhalt:

- Kurzanleitung zur Suche von wissenschaftlichen Originalpublikationen
- Kurzanleitung zur Suche von Informationen über Proteine
- Kurzanleitung zur Nutzung des Visualisierungsprogramms PyMOL

(A) Kurzanleitung zur Suche von wissenschaftlichen Originalpublikationen:

- Mausklick links auf Zeile “PubMed: biomedical literature citations and abstracts” (s.o.)
- Suchbegriff eingeben (s. roten Pfeil): z.B. p53



HINWEIS: Man verliert sehr schnell den Überblick und verirrt sich in der Datenflut. So ergibt sich bei der Suche nach dem Tumorsuppressorprotein p53 ein Ergebnis von 48214 Treffern. Auch die Ergänzung von p53 um den Begriff „human“ resultiert in 41011 Treffern.

All: 48214 English: 45396 Free full text: 15052 Full text: 38784 Review: 6227

TP53 tumor protein p53 [Homo sapiens]
This gene encodes tumor protein p53, which responds to diverse cellular stresses to regulate target genes that induce cell cycle arrest or apoptosis. More
Location: 17p13.1
► p53 in Homo sapiens | Mus musculus | All 10 Gene records

Items 1 - 20 of 48214 Page 1 1 Next

□ 1: Protective effect of tripeptide in the presence of cyclophosphamide on the growth of cultured lymphoid tissue from rats of different age.
Chalísova NI, Lesnyak VV, Oganezova EV, Rizhak GA.
Bull Exp Biol Med. 2008 Jun;145(6):748-50. English, Russian.
PMID: 19110568 [PubMed - in process]
Related Articles

□ 2: Drug-virus interaction: effect of administration of recombinant adenoviruses on the pharmacokinetics of docetaxel in a rat model.

- Suche durch weitere Begriffe und Operatoren („and“, „or“, „not“) eingrenzen; erst die Eingrenzung mit „p53 human and crystal structure“ ergibt ein akzeptables und überschaubares Ergebnis.

p53 human and crystal structure - PubMed Results - Packard Bell

All Databases PubMed

Search: PubMed for p53 human and crystal structure

Display: Summary Show: 20 Sort By: Send to:

All: 72 English: 71 Free full text: 25 Full text: 66 Review: 5

TP53 tumor protein p53 [Homo sapiens]
This gene encodes tumor protein p53, which responds to diverse cellular stresses to regulate target genes that induce ce... More
Location: 17p13.1

human in Homo sapiens | All 2 Gene records

Items 1 - 20 of 72

□ 1: [p53 oligomerization is essential for its C-terminal lysine acetylation.](#)
Itahana Y, Ke H, Zhang Y.
J Biol Chem. 2008 Dec 23. [Epub ahead of print]
PMID: 19106109 [PubMed - as supplied by publisher]
[Related Articles](#)

□ 2: [Structure of Human MDM4 N-Terminal Domain Bound to a Single-Domain Antibody.](#)
Yu GW, Vaysburd M, Allen MD, Settanni G, Fersht AR.
J Mol Biol. 2009 May 20. [Epub ahead of print]

Recent Activities

- Mausklick links auf „Free full text“ (s. rote Markierung) zeigt eine Liste von Publikationen, auf deren Zusammenfassungen („abstracts“) direkt zugegriffen werden kann und die als Vollversion gebührenfrei heruntergeladen werden können. Dies ist durch „Final Version FREE“ oder „open access“ oben rechts gekennzeichnet und verlinkt (s. grüne Markierung).

p53 human and crystal structure - PubMed Results - Packard Bell

All Databases PubMed Nucleotide

Search: PubMed for p53 human and crystal structure

Display: Summary Show: 20 Sort By: Send to:

All: 72 English: 71 Free full text: 25 Full text: 66 Review: 5

Items 1 - 20 of 25

□ 1: [c-Abl phosphorylates Hdmx and regulates its](#)
Zuckerman V, Lenos K, Popowicz GM, Silverman MC, Holak TA, Jochemsen AG, Haupert JN.
J Biol Chem. 2008 Dec 15. [Epub ahead of print]
PMID: 19075013 [PubMed - as supplied by publisher]
[Related Articles](#)

□ 2: [The BARD1 C-terminal domain structure and polyadenylation factor CstF-50.](#)
Edwards RA, Lee MS, Tsutakawa SE, Williamson JN.
Biochemistry. 2008 Nov 4;47(44):11446-56. Epub 2008 Oct 16.
PMID: 18842000 [PubMed - indexed for MEDLINE]
[Related Articles](#)

□ 3: [TP53 mutations and survival in squamous-cell carcinoma of the head and neck.](#)
PMD: 15703170 [PubMed - indexed for MEDLINE]

Structures of p53 cancer mutants and mechanism of rescue by second-site suppressor mutations.
Joerger AC, Ang HC, Reprintsev DB, Blair CM, Fersht AR.
Centre for Protein Engineering, Medical Research Council, Cambridge, CB2 2QH, United Kingdom.
We have solved the crystal structures of three oncogenic mutants of the core domain of the human tumor suppressor p53. The mutations were introduced into a stabilized variant. The cancer hot spot mutation R273H simply removes an arginine involved in DNA binding without causing structural distortions in neighboring residues. In contrast, the "structural" oncogenic mutations H168R and R249S induce substantial structural perturbation around the mutation site in the L2 and L3 loops, respectively. H168R is a specific intragenic suppressor mutation for R249S. When both cancer mutations are combined in one molecule, Arg168 mimics the role of Arg249 in wild type, and the wild type conformation is largely restored in both loops. Our structural and biophysical data provide compelling evidence for the mechanism of rescue of mutant p53 by intragenic suppressor mutations and reveal features by which proteins can adapt to deleterious mutations.

Final Version FREE

Recent Activity

- Die Originalpublikation ist als pdf-Datei herunterladbar (s. rote Markierung).

Structures of p53 Cancer Mutants and Mechanism of Rescue by Second-site Suppressor Mutations -- Packard Bell

<http://www.jbc.org/cgi/reprint/280/16/16030>

Datei Bearbeiten Ansicht Favoriten Extras ?

THE JOURNAL OF BIOLOGICAL CHEMISTRY
© 2005 by The American Society for Biochemistry and Molecular Biology, Inc.

Vol. 280, No. 16, Issue of April 22, pp. 16030–16037, 2005
Printed in U.S.A.

Structures of p53 Cancer Mutants and Mechanism of Rescue by Second-site Suppressor Mutations*

Received for publication, January 6, 2005
Published, JBC Papers in Press, February 11, 2005, DOI 10.1074/jbc.M500179200

Andreas C. Joerger, Hwee Ching Ang‡, Dmitry B. Veprinsev, Caroline M. Blair,
and Alan R. Fersht§

From the Centre for Protein Engineering, Medical Research Council, Cambridge, CB2 2QH, United Kingdom

We have solved the crystal structures of three oncogenic mutants of the core domain of the human tumor suppressor p53. The mutations were introduced into a stabilized variant. The cancer hot spot mutation R273H simply removes an arginine involved in DNA binding without causing structural distortions in neighboring residues. In contrast, the "structural" oncogenic mutations H168R and R249S induce substantial structural perturbation around the mutation site in the L2 and L3 loops, respectively. H168R is a specific intragenic suppressor mutation for R249S. When both cancer mutations are combined in the same molecule, Arg¹⁶⁸ mimics the role of Arg²⁴⁹ in wild type, and the wild type conformation is largely restored in both loops. Our structural and biophysical data provide compelling evidence for the mechanism of rescue of mutant p53 by intragenic suppressor mutations and reveal features by which proteins can adapt to deleterious mutations.

The tumor suppressor p53 is a tetrameric multidomain transcription factor that has an essential role in maintaining the genomic integrity of the cell. In response to DNA damage, UV irradiation, hypoxia, and other stresses, p53 activates the expression of a variety of genes that encode proteins responsible for G₁ and G₂ cell cycle arrest and apoptosis (1–3). p53 is inactivated in virtually all human cancers. In about 50% of all human cancers, this inactivation is a direct result of mutations in the p53 gene. Most cancer-associated p53 mutations map to

(Arg¹⁷⁵, Gly²⁴⁵, Arg²⁴⁸, Arg²⁴⁹, Arg²⁷³, and Arg²⁸²) (4).

The crystal structure of the human p53 core domain in complex with consensus DNA has provided a framework for understanding the deleterious effect of many cancer mutants (5). A large immunoglobulin-like β -sandwich, forming a compact barrel-like structure, provides the basic scaffold for the conserved DNA binding surface (Fig. 1A). This extended surface, rich in basic amino acids, consists of a loop-sheet-helix motif and two large loops (L2 and L3). These two loops are stabilized by a zinc ion, which is coordinated by three cysteines and a histidine (Cys¹⁷⁶, His¹⁷⁹, Cys²³⁸, and Cys²⁴²) (Fig. 1B). On the basis of this structure, common cancer mutations have been classified as "structural" mutations resulting in structural perturbations of the core domain or "contact" mutations resulting in the loss of a DNA-contacting residue.

A more detailed picture has emerged from quantitative stability and DNA binding studies for wild type p53 and several cancer-associated mutants (6, 7). The core domain of human p53 has low intrinsic thermodynamic stability, and its melting temperature is only slightly above body temperature. Hence, even weakly destabilizing mutations can have a detrimental effect and result in a large population of unfolded protein under physiological conditions. On the basis of these studies, cancer-associated mutations in the core domain can be subdivided into three classes: (i) DNA contact mutations, such as R273H, with little effect on the overall stability of the protein but impaired function because of the loss of a residue mediating DNA contacts. (ii) Mutations causing local distortions that destabilize

jbc ONLINE

HOME HELP FEEDBACK

SUBSCRIPTIONS ARCHIVE

TABLE OF CONTENTS

This Article

PDF version of:
Joerger et al. 280 (16):
16030. (2005)

Full Text (HTML)

All versions of this Article:
280/16/16030 most recent
M500179200v2
M500179200v1

Alert me when this article is cited
Alert me if a correction is posted

Services

Email this article to a friend
Similar articles in this journal
Similar articles in PubMed
Alert me to new issues of the journal
Download to citation manager
Request Permissions

Citing Articles

Citing Articles via Google Scholar

Google Scholar

Downloaded from www.jbc.org by on December 28, 2008

Fertig

Dies ist nur ein Mikrospektrum der Möglichkeiten, die diese Datenbank der NIH bietet. Es macht sicher viel Freude, die anderen features zu erkunden und auszuprobieren. Jedoch wird schnell die Zeit zum limitierenden Faktor.

(B) Kurzanleitung zur Suche von Informationen über Proteine:

Die Datenbank Universal Protein Resource (kurz: UniProt; <http://www.uniprot.org/>) ist eine umfangreiche Sammlung von Sequenz- und Strukturdaten von Proteinen, die darüber hinaus auch Informationen über Vorkommen, Funktion oder beispielsweise Beteiligung an bestimmten Erkrankungen liefert.

Unter „SITE TOUR“ (s. rote Markierung unten rechts) wird ein Lernprogramm für die Nutzung der Datenbank zur Verfügung gestellt.

The screenshot shows the UniProt homepage. At the top, there is a search bar with "Query" and "Search" buttons. Below the search bar, there is a "WELCOME" section with a brief mission statement. To the right, there is a "NEWS" section with a link to "Release 14.6 – Dec 16, 2008". Further down, there is a "SITE TOUR" section with a thumbnail image and a red box highlighting it. The bottom of the page has a footer with links like "Downloads", "Contact", and "Documentation/Help".

- Suchbegriff unter „Query“ eingeben und „Search“ klicken (s. rote Pfeile): z.B. p53 human tumor suppressor protein

The screenshot shows the search results for "p53 human tumor suppressor protein" in UniProtKB. The results table has columns for Accession, Entry name, Status, Protein names, Genes, Organism, and Length. The first result is circled in red. The results table is as follows:

Accession	Entry name	Status	Protein names	Genes	Organism	Length
P04657	P53_HUMAN	★	Cellular tumor antigen p53 (Tumor suppressor p53) (Phosphoprotein p53) (Antigen NY-CO-13)	TP53 (P53)	Homo sapiens (Human)	393
P02340	P53_MOUSE	★	Cellular tumor antigen p53 (Tumor suppressor p53)	Tp53 (P53) (Trp53)	Mus musculus (Mouse)	387
P07193	P53_XENLA	★	Cellular tumor antigen p53 (Tumor suppressor p53)	tp53	Xenopus laevis (African clawed)	363

- Zugriffsnummer des gewünschten Proteins in Spalte „Accession“ auswählen (s. rote Markierung)

Cellular tumor antigen p53 - Homo sapiens (Human) - Packard Bell

Reviewed, UniProtKB/Swiss-Prot P04637 (P53_HUMAN)

Protein Knowledgebase (UniProtKB) | Search | Clear | Fields *

Search | Blast * | Align * | Retrieve | ID Mapping *

Clusters with 100%, 90%, 50% identity | Documents (6) | Third-party data | Customize display | TEXT XML RDF/XML GFF FASTA

Names and origin | Protein attributes | General annotation (Comments) | Ontologies | Binary interactions | Alternative products | Sequence annotation (Features) | Sequences | References | Web resources | Cross-references | Entry information | Relevant documents

Names and origin

Protein names

Recommended name: Cellular tumor antigen p53
Alternative name(s): Tumor suppressor p53, Phosphoprotein p53, Antigen NY-CO-13

Gene names

Name: TP53
Synonyms: P53

Organism

Homo sapiens (Human)

Taxonomic identifier

9606 [NCBI]

Taxonomic lineage

Eukaryota > Metazoa > Chordata > Craniata > Vertebrata > Euteleostomi > Mammalia > Eutheria > Euarchontoglires > Primates > Haplorhini > Catarrhini > Hominoidea > Homo

Protein attributes

Sequence length: 393 AA.
Sequence status: Complete.
Sequence processing: The displayed sequence is not processed.
Protein existence: Evidence at protein level.

HINWEIS: Gerade beim menschlichen Tumorsuppressorprotein p53 macht sich die bisher gesammelte Datenflut beim Durchwandern der Seite mal wieder unangenehm bemerkbar. Selbst die Unterteilung durch die grauen Querbalken ist nur bedingt hilfreich, wenn bisher von p53 z.B. über 1.500 Varianten in der Aminosäuresequenz bekannt sind und diese auch alle unter „Sequence annotation (Features)“ aufgelistet werden.

Durch die Funktion „Hide“ am rechten Rand des Balkens steigen Übersichtlichkeit und Bearbeitungsgeschwindigkeit (s. roten Pfeil).

Cellular tumor antigen p53 - Homo sapiens (Human) - Packard Bell

Reviewed, UniProtKB/Swiss-Prot P04637 (P53_HUMAN)

Last modified December 16, 2008. Version 153. History...

Clusters with 100%, 90%, 50% identity | Documents (6) | Third-party data | Customize display | TEXT XML RDF/XML GFF FASTA

Names and origin | Protein attributes | General annotation (Comments) | Ontologies | Binary interactions | Alternative products | Sequence annotation (Features) | Sequences | References | Web resources | Cross-references | Entry information | Relevant documents

Names and origin

Protein attributes

General annotation (Comments)

Ontologies

Binary interactions

Alternative products

Sequence annotation (Features)

Sequences

References

Web resources

Cross-references

Sequence databases

EMBL | X02469 mRNA, Translation: CAA26306.1.

Cellular tumor antigen p53 - Homo sapiens (Human) - Packard Bell

http://www.uniprot.org/uniprot/P04657

Date Bearbeiten Ansicht Favoriten Extras 2

Cellular tumor antigen p53 - Homo sapiens (Human)

Sequence annotation (Features)

Feature key	Position (s)	Length	Description	Graphical view	Feature identifier
Chain	1 – 393	393	Cellular tumor antigen p53		PRO_0000185703
Regions					
DNA binding	102 – 292	191			
Region	1 – 83	83	Interaction with HRMT1L2		
Region	1 – 44	44	Transcription activation (acidic)		
Region	66 – 110	45	Interaction with WWOX		
Region	100 – 370	271	Interaction with HIPK1 <small>[By similarity]</small>		
Region	116 – 292	177	Interaction with AXIN1 <small>[By similarity]</small>		
Region	241 – 248	8	Interacts with the 53BP2 SH3 domain		
Region	256 – 294	39	Interaction with E4F1		
Region	300 – 393	94	Interaction with CARM1		
Region	319 – 360	42	Interaction with HIPK2		
Region	325 – 356	32	Oligomerization		
Region	359 – 383	5	Interaction with USP7		
Region	368 – 387	20	Basic (repression of DNA-binding)		
Motif	305 – 321	17	Bipartite nuclear localization signal		
Motif	339 – 350	12	Nuclear export signal		
Motif	370 – 372	3	[KRK]-STA-K motif		
Sites					
Metal binding	176	1	Zinc		
Metal binding	179	1	Zinc		
Metal binding	238	1	Zinc		
Metal binding	349	4	Zinc		

HINWEIS: Unter „Sequence annotation (Features)“ findet man aber auch sehr interessante Informationen über die Positionen der verschiedenen Domänen innerhalb des Peptids oder Proteins.

Cellular tumor antigen p53 - Homo sapiens (Human) - Packard Bell

http://www.uniprot.org/uniprot/P04657

Date Bearbeiten Ansicht Favoriten Extras ?

Cellular tumor antigen p53 - Homo sapiens (Human)

UniGene Hs.654481

3D structure databases

PDB	Entry	Method	Resolution (Å)	Chain	Positions	PDBsum
	1A1U	NMR	-	A/C	324-358	[x]
	1AIE	X-ray	1.50	A	326-356	[x]
	1C26	X-ray	1.70	A	325-356	[x]
	1DT7	NMR	-	X/Y	367-388	[x]
	1GZH	X-ray	2.60	A/C	95-292	[x]
	1H26	X-ray	2.24	E	376-386	[x]
	1HS5	NMR	-	A/B	324-357	[x]
	1JSP	NMR	-	A	367-386	[x]
	1KZY	X-ray	2.50	A/B	95-289	[x]
	1MA3	X-ray	2.00	B	372-389	[x]
	1OLG	NMR	-	A/B/C/D	319-360	[x]
	1OLH	NMR	-	A/B/C/D	319-360	[x]
	1PES	NMR	-	A/B/C/D	325-355	[x]
	1PET	NMR	-	A/B/C/D	325-355	[x]
	1SAE	NMR	-	A/B/C/D	319-360	[x]
	1SAF	NMR	-	A/B/C/D	319-360	[x]
	1SAG	NMR	-	A/B/C/D	319-360	[x]
	1SAH	NMR	-	A/B/C/D	319-360	[x]
	1SAI	NMR	-	A/B/C/D	319-360	[x]
	1SAJ	NMR	-	A/B/C/D	319-360	[x]
	1SAK	NMR	-	A/B/C/D	319-360	[x]
	1SAI	NMR	-	A/B/C/D	319-360	[x]
	1TSR	X-ray	2.20	A/B/C	94-312	[x]
	1TOP	X-ray	2.20	A/B/C	94-312	[x]
	1UOL	X-ray	1.90	A/B	94-312	[x]
	1XQH	X-ray	1.75	B/F	369-377	[x]
	1YCQ	X-ray	2.30	B	13-29	[x]
	1YCR	X-ray	2.60	B	15-29	[x]
	1VFS	X-ray	2.20	A	94-302	[x]

- unter „Cross-references“ befindet sich eine Auflistung aller bisher ermittelten 3D-Strukturdaten; wenn wie im Falle von p53 keine Strukturdaten der Gesamtsequenz existieren, wählt man bspw. die längste aus (s. rote Markierung)

RCSB PDB : Structure Explorer - Packard Bell

http://www.pdb.org/pdb/cgi/explore.cgi?pdbId=1TSR

Datei Bearbeiten Ansicht Favoriten Extras ?

re: RCSB PDB : Structure Explorer

A MEMBER OF THE CPDB MyPDB: Login | Register
 An Information Portal to Biological Macromolecular Structures
 As of Tuesday Dec 23, 2008 there are 54956 Structures | PDB Statistics

CONTACT US | FEEDBACK | HELP | PRINT PDB ID or keyword Author Site Search | Advanced Search

Home Search Structure

Some chains and/or residues have been updated. Click here for details, or here for details about the remediation process

Help Structure Summary Sequence Details Biology & Chemistry Materials & Methods Geometry Remediation External Links

1tsr   

Learn more: [M] DOI 10.2210/pdb1tsr/pdb

Red - Derived Information

Title P53 CORE DOMAIN IN COMPLEX WITH DNA

Authors Cho, Y., Gorina, S., Jeffrey, P., Pavletich, N.

Primary Citation Cho, Y., Gorina, S., Jeffrey, P.D., Pavletich, N.P. (1994) Crystal structure of a p53 tumor suppressor-DNA complex: understanding tumorigenic mutations. *Science* **265**: 346-355
[\[Abstract\]](#) [PubMed](#)

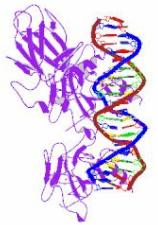
History Deposition 1995-07-28 Release 1996-01-29

Experimental Method Type X-RAY DIFFRACTION Data N/A

Parameters Resolution[Å] 2.20 R-Value 0.205 (obs.) R-Free n/a Space Group C 2 (C 1 2 1)

Unit Cell	Length [Å]	a	117.50	b	67.90	c	108.80
	Angles [°]	alpha	90.00	beta	105.50	gamma	90.00

Molecular Description Asymmetric Unit Polymer 1 Molecule: DNA (5'-D ("TP*TP*TP*CP*CPTP*AP*GP*AP*CP*TP*TP*GP*CP*CP*CP*A P*AP*TP*TP*A)-3') Chains E
 Polymer 2 Molecule: DNA (5'-D ("AP*TP*AP*TP*TP*GP*GP*GP*CPTP*AP*AP*GP*TP*CP*TP*A P*GP*GP*AP*A)-3')

Images and Visualization 

Display Options    MBT SimpleViewer® MBT Protein Workshop QuickPDB All Images

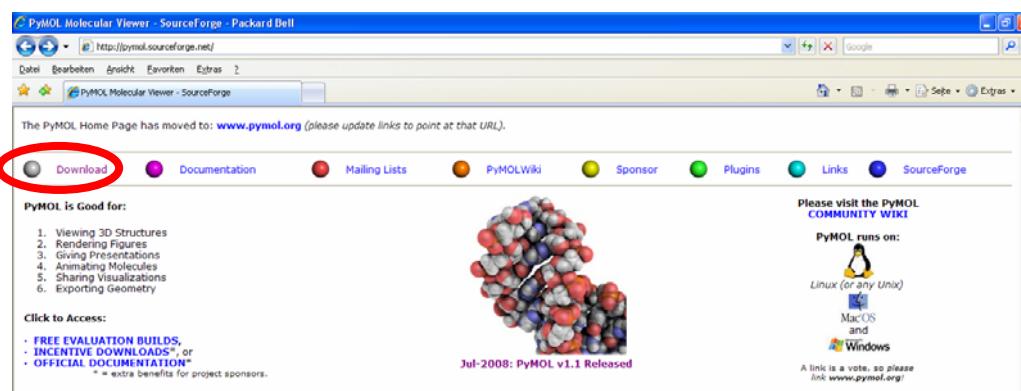
* Capable of displaying biological molecules.

- man gelangt direkt auf die Protein-Datenbank von Research Collaboratory for Structural Bioinformatics (RCSB) und kann sich die 3D-Strukturdaten von p53 als pdb-Datei herunterladen (s. roten Pfeil)

(C) Kurzanleitung zur Nutzung des Visualisierungsprogramms PyMOL:

Um komplexe Makromoleküle wie Nukleinsäuren oder Proteine am Computerbildschirm dreidimensional darstellen zu können, benötigt man Visualisierungsprogramme wie z.B. PyMOL. DeLano Scientifics ist ein kommerzieller Software-Anbieter, der im Internet eine veraltete Version des Programms kostenlos zum Herunterladen zur Verfügung stellt (<http://pymol.sourceforge.net/>).

- unter „Download“ kann man unter “Older PyMOL builds (pre-1.0) are still **FREELY accessible** but are no longer maintained” die voll funktionsfähige Version 0.99 herunterladen (Volumen: 11,4 MB) (s. rote Markierung)



The PyMOL Home Page has moved to: www.pymol.org (please update links to point at that URL).

PyMOL is Good for:

1. Viewing 3D Structures
2. Rendering Figures
3. Giving Presentations
4. Animating Molecules
5. Sharing Visualizations
6. Exporting Geometry

Click to Access:

- **FREE EVALUATION BUILDS,**
- **INCENTIVE DOWNLOADS*, or**
- **OFFICIAL DOCUMENTATION***

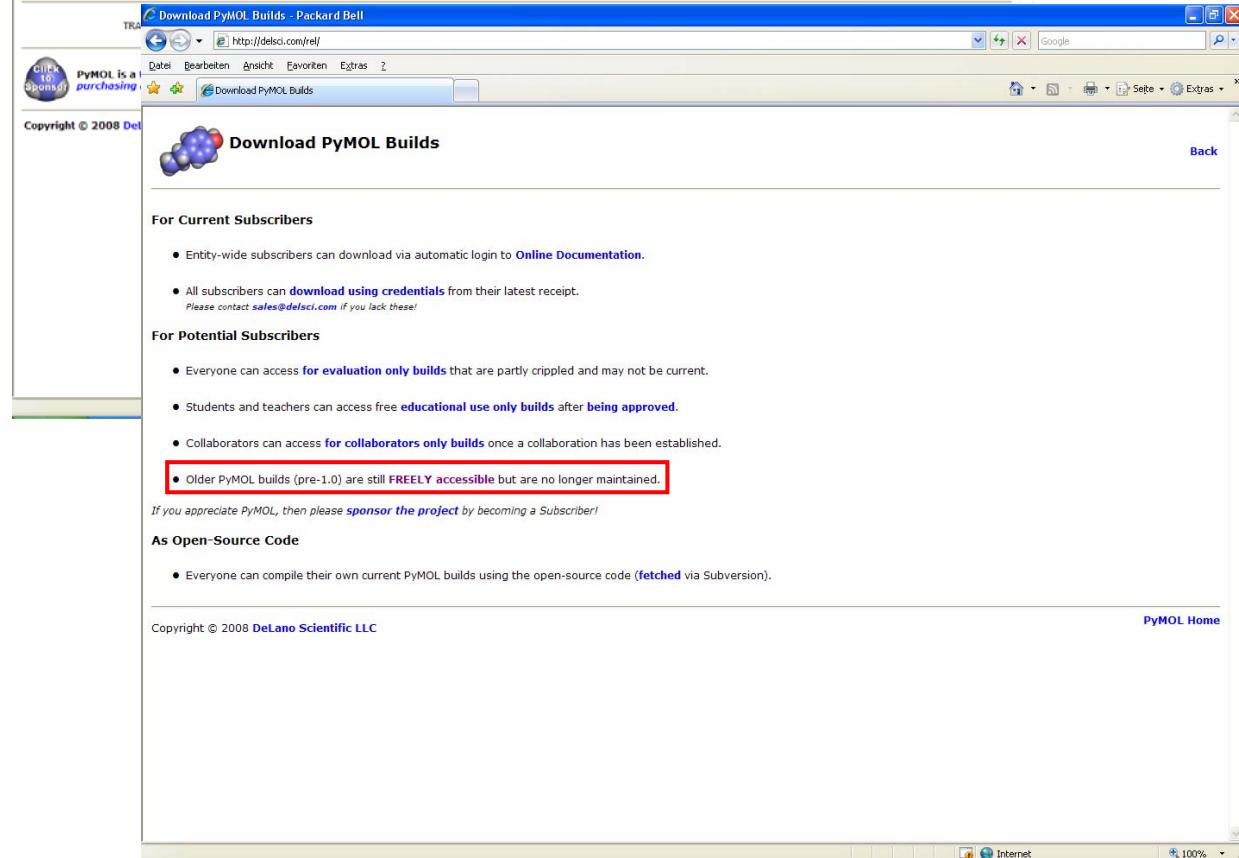
* = extra benefits for project sponsors.

Please visit the PyMOL COMMUNITY WIKI

PyMOL runs on:

Linux (or any Unix)
MacOS and Windows

A link is a vote, so please [link www.pymol.org/](http://www.pymol.org/)



Copyright © 2008 Delano Scientific LLC

Download PyMOL Builds

For Current Subscribers

- Entity-wide subscribers can download via automatic login to [Online Documentation](#).
- All subscribers can [download using credentials](#) from their latest receipt.
Please contact sales@delsci.com if you lack these!

For Potential Subscribers

- Everyone can access [for evaluation only builds](#) that are partly crippled and may not be current.
- Students and teachers can access free [educational use only builds](#) after being approved.
- Collaborators can access [for collaborators only builds](#) once a collaboration has been established.
- Older PyMOL builds (pre-1.0) are still **FREELY accessible** but are no longer maintained.**

If you appreciate PyMOL, then please [sponsor the project](#) by becoming a Subscriber!

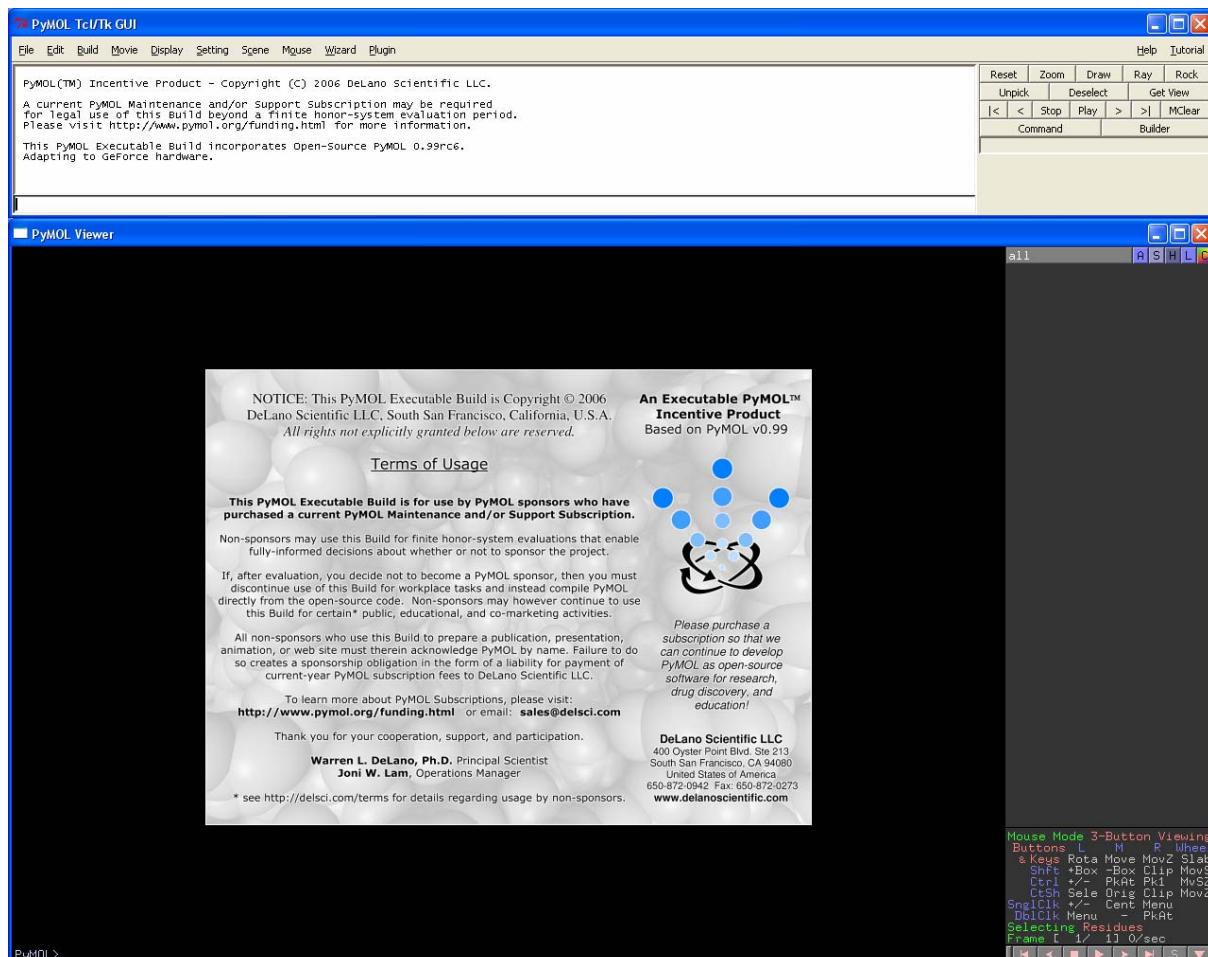
As Open-Source Code

- Everyone can compile their own current PyMOL builds using the open-source code ([fetched](#) via Subversion).

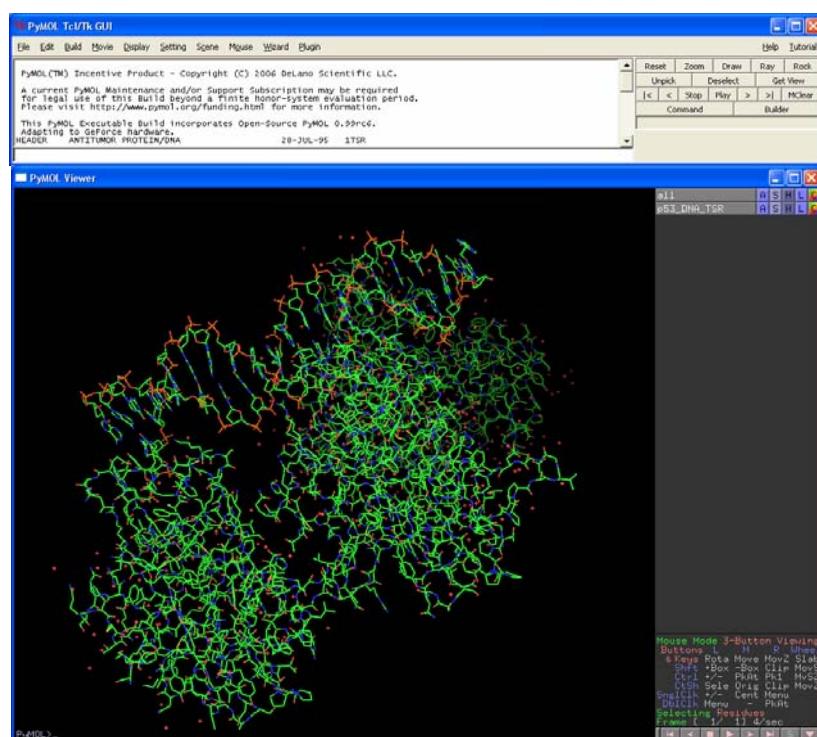
Copyright © 2008 Delano Scientific LLC

PyMOL Home

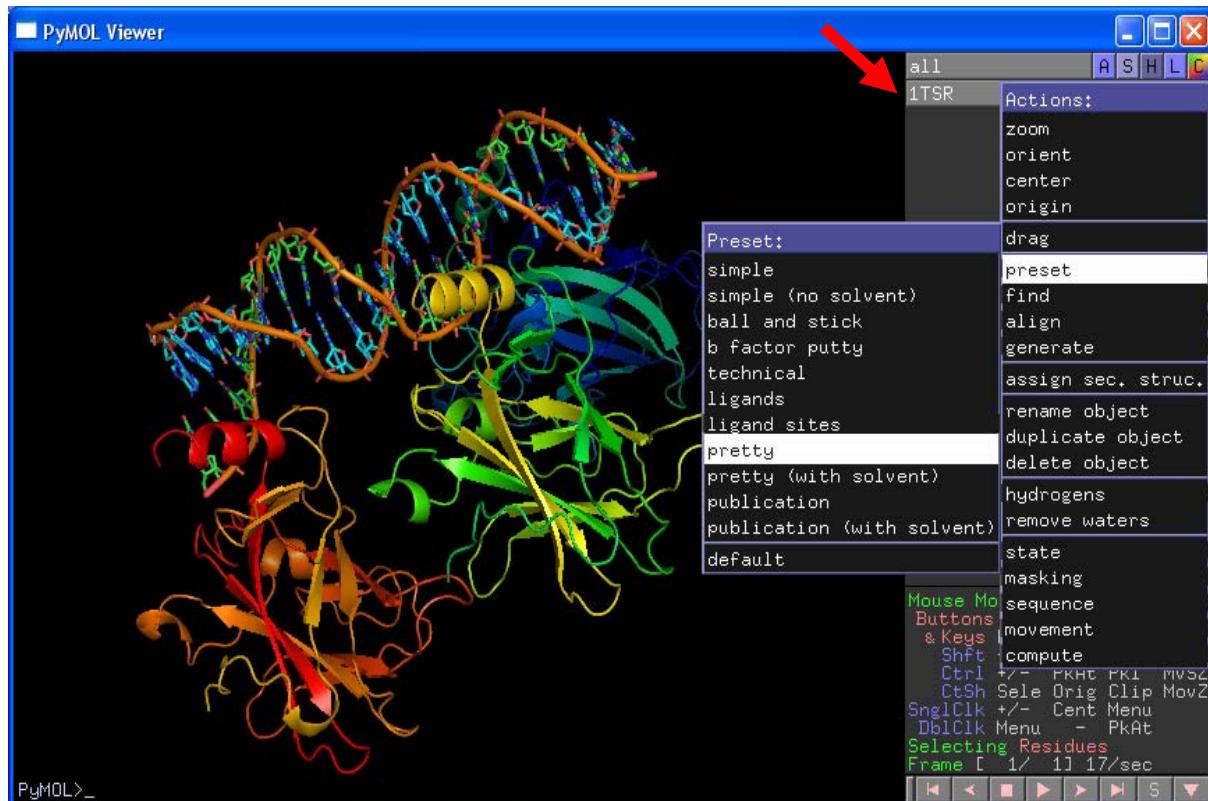
➤ nach Installation auf dem Rechner das Programm PyMOL starten



➤ gespeicherte pdb-Datei von p53 (= 1TSR.pdb) öffnen



- in der Zeile 1TSR „A“ für **Actions** anklicken (s. roten Pfeil), aus Liste „preset“ wählen und aus weiterer Liste „pretty“ wählen (andere Möglichkeiten einfach auch mal alle ausprobieren!)



- Bei Gedrückthalten der **linken Maustaste** kann das visualisierte Molekül durch Bewegen der Maus im Raum gedreht werden.
- Bei Gedrückthalten der **rechten Maustaste** kann das visualisierte Molekül durch Ziehen der Maus gezoomt werden.

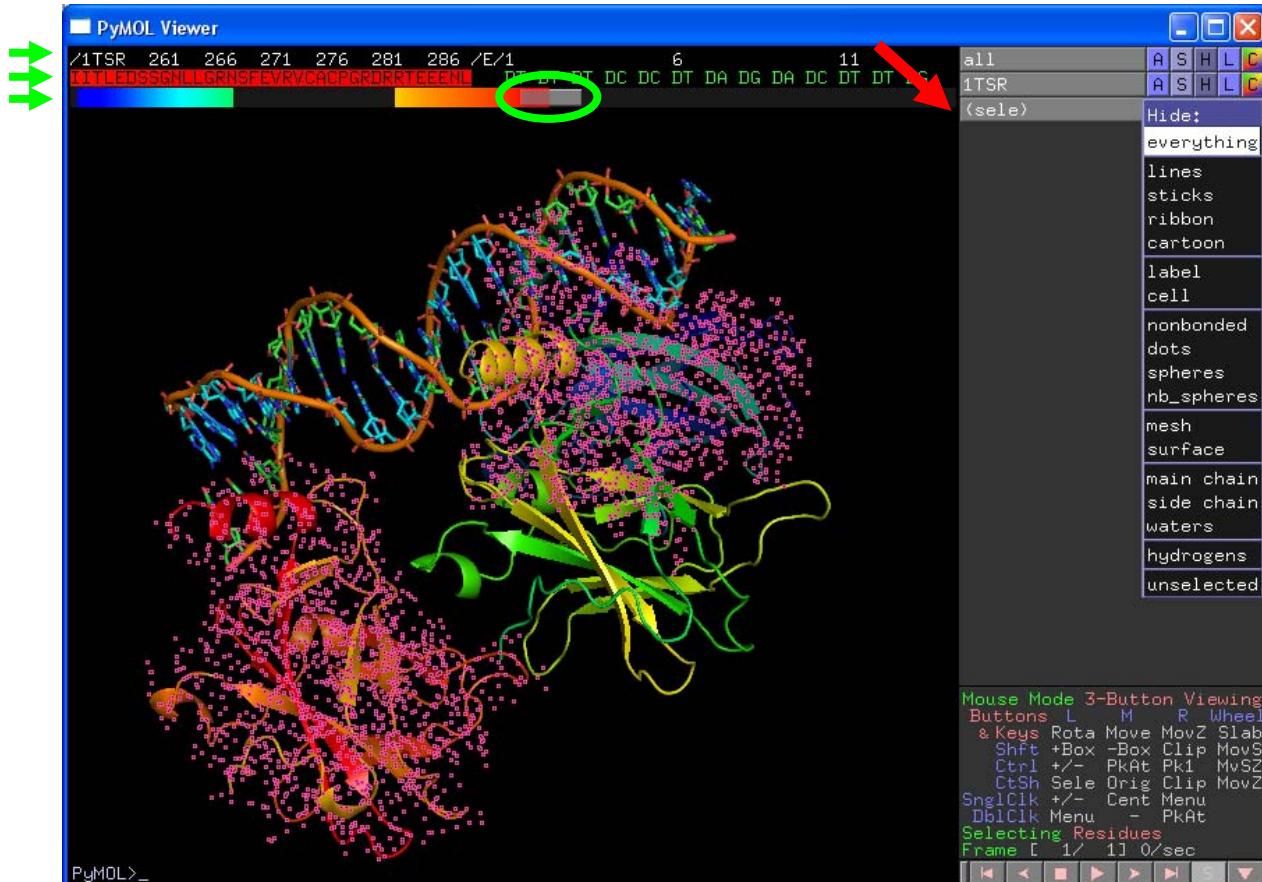
Molekülsequenzen ausblenden oder entfernen:

- aus Hauptmenüleiste unter „Display“ die Ansicht „Sequence“ auswählen



- es werden oberhalb der Molekülabbildung in 3 Zeilen die jeweiligen Aminosäurepositionen im Peptid/Protein bzw. Nukleotide in der DNA, die Aminosäure im Einbuchstabencode und ein hellgrauer Balken, der als Cursor genutzt werden kann, dargestellt (s. grüne Pfeile, grüne Markierung)
- durch Mausklick links können einzelne Aminosäuren ausgewählt werden; durch Umschalttaste (=shift) + Mausklick links können innerhalb von 2 begrenzenden Aminosäuren ganze Bereiche markiert werden

(die ausgewählten Bereiche werden entsprechend der Farbgebung in der Abbildung in der Cursorzeile wiedergegeben; rechts erscheint unterhalb der Zeile 1TSR eine weitere Zeile (sele), die die Bearbeitung ausgewählter Aminosäuresequenzen steuert (s. roten Pfeil))

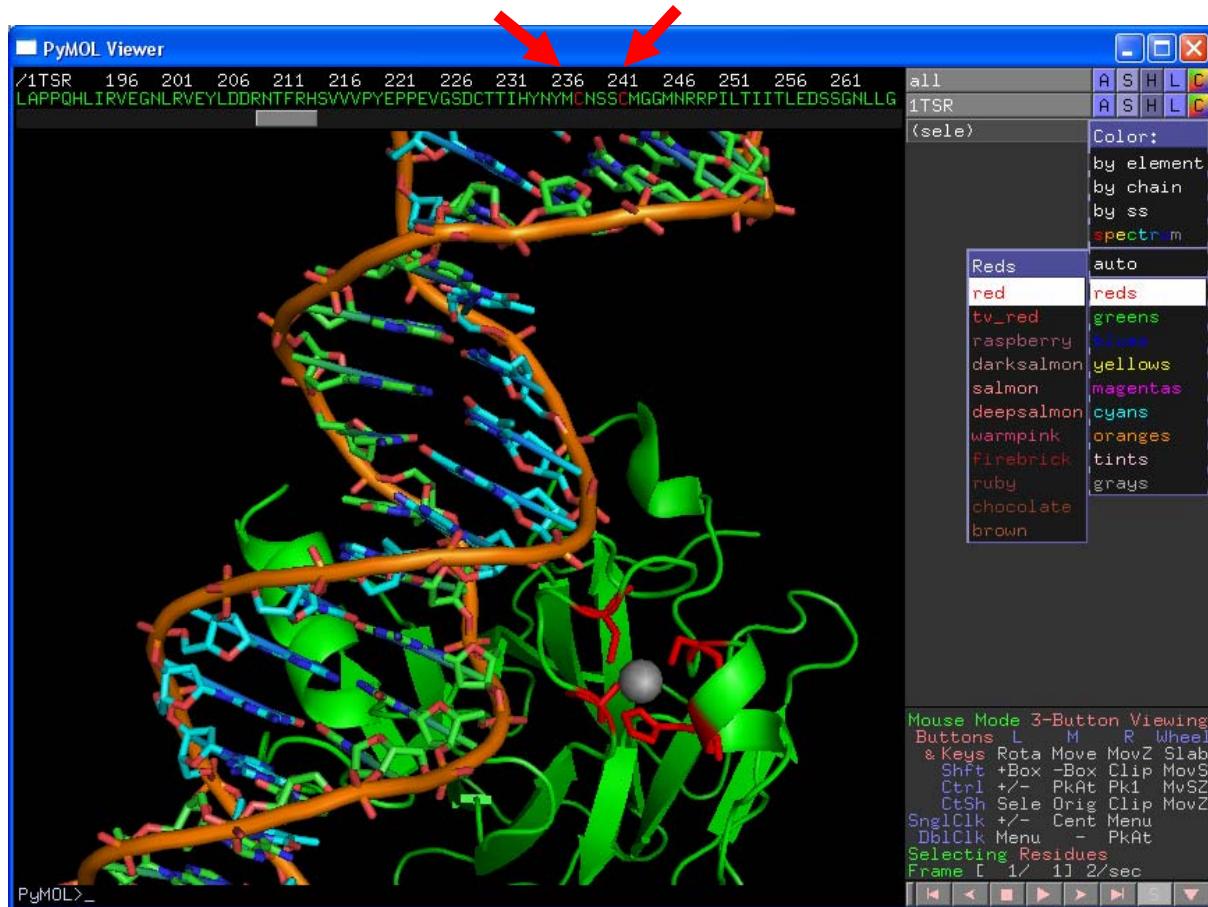


- in der Zeile (sele) „H“ für **Hide** anklicken und aus Liste „everything“ wählen (die ausgewählten Bereiche erscheinen in der Abbildung zunächst mit kleinen pinkfarbenen Quadraten; sie bleiben nach der Bearbeitung erhalten – können aber durch Mausklick links auf den schwarzen Hintergrund entfernt werden; die Molekülteile bleiben in der Sequenzzeile erhalten, werden aus der Molekülabbildung aber ausgeblendet)
- die markierten Molekülanteile können durch Anklicken von „A“ in Zeile (sele) und auswählen von „remove atoms“ auch aus Sequenzzeile entfernt werden

Farbgebungen / Moleküldarstellungen verändern:

- durch Mausklick links in Sequenzzeile Aminosäuren oder ganze Bereiche markieren
- in der Zeile (sele) „C“ für **Color** anklicken und aus Liste z.B. unter „greens“ weiteren Grün-Ton wählen
(gesamte Sequenz des dargestellten p53-Moleküls hellgrün gefärbt; die Zinkfinger-Aminosäuren an Positionen 176, 179, 238 und 242 rot gefärbt (s. rote Pfeile); das zentrale Zink-Ion grau gefärbt; Ansicht gedreht und gezoomt)

- in der Zeile (sele) „S“ für **Show** anklicken und aus Liste z.B. „sticks“ (hier für die Zinkfinger-Aminosäuren) oder „spheres“ (für das Zink-Ion) auswählen



Hintergrundfarbe variieren:

- in Menüleiste unter „Display“ → „background“ wählen (am Bildschirm ist schwarzer Hintergrund meist optimal; jedoch für Ausdrucke suboptimal)

Sicherung von Molekülbearbeitungen / als Grafik für Textverarbeitung:

- in Menüleiste unter „File“ → „Save Session“ wählen (Bearbeitungszustand kann parallel zur Original-pdb-Datei als pse-Datei gespeichert werden)
- in Menüleiste unter „File“ → „Save Image“ wählen (Bearbeitungszustand kann parallel zur Original-pdb-Datei als png-Bilddatei gespeichert werden; Einfügen als Grafik durch Textverarbeitungsprogramme möglich)

Auch hierbei handelt es sich nur um eine Kurzanleitung, die rasch erste Schritte im Umgang erlaubt, jedoch die vielfältigen Möglichkeiten, die dieses Visualisierungsprogramm bietet, nur oberflächlich ankratzt. Man sollte es einfach mal spielerisch ausprobieren und sich überraschen lassen, was am Bildschirm so alles passiert 😊.