

How to „Einlesen von HDX-B-Faktoren in PyMOL“

Anpassen der .pml File

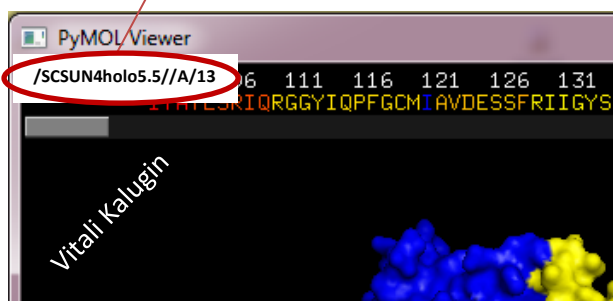
Achtet auf die korrekte Bezeichnung!

alter /Name//Chain/Residue, b = 0 bis 1

```
heatmap_holoScSUN4_pH5.5 5min.pml - Editor
Datei Bearbeiten Format Ansicht ?
#Lücken auf B=-1 setzen
alter /scsun4holo5.5//A/, b=-1

#Resten die jeweiligen B-Werte zuweisen
alter /scsun4holo5.5//A/13,b = 0.484
alter /scsun4holo5.5//A/14,b = 0.484
alter /scsun4holo5.5//A/15,b = 0.484
alter /scsun4holo5.5//A/16,b = 0.484
alter /scsun4holo5.5//A/17,b = 0.484
alter /scsun4holo5.5//A/18,b = 0.285
```

Vitalii Kalugin



Vitalii Kalugin

Laden der .pml File

.pml file muss im Pymol Ordner liegen

(ansonsten muss im Pymol Terminal durch „cd“ zum Zielordner navigiert werden)

PyMOL>cmd.do ('@PhyB_Fr 1 min.pml') oder -> RUN pml file

➔ Als Resultat erhält man:

```
PyMOL>az:/Promotion/HD-X/2015-11-12 ScSUN4 pH5.5,
o1oScSUN4_pH5.5 5min.pml
PyMOL>alter /scsun4holo5.5//A/, b=-1
Alter: modified 2139 atoms.
PyMOL>alter /scsun4holo5.5//A/13,b = 0.484
Alter: modified 0 atoms.
PyMOL>alter /scsun4holo5.5//A/14,b = 0.484
Alter: modified 8 atoms.
PyMOL>alter /scsun4holo5.5//A/15,b = 0.484
Alter: modified 7 atoms.
PyMOL>alter /scsun4holo5.5//A/16,b = 0.484
Alter: modified 7 atoms.
PyMOL>alter /scsun4holo5.5//A/17,b = 0.484
Alter: modified 11 atoms.
PyMOL>alter /scsun4holo5.5//A/18,b = 0.285
Alter: modified 4 atoms.
PyMOL>alter /scsun4holo5.5//A/19,b = 0.233
Alter: modified 6 atoms.
PyMOL>alter /scsun4holo5.5//A/20,b = 0.233
Alter: modified 10 atoms.
PyMOL>alter /scsun4holo5.5//A/21,b = 0.233
Alter: modified 5 atoms.
PyMOL>
```

Einfärben der B-Faktoren

PyMOL> select hdx, b>0

PyMOL>spectrum b, blue_white_red, selection=hdx

(Optional die range manuell setzen PyMOL>spectrum b, blue_white_red, selection=hdx, minimum=x, maximum=y)
x, y = je nach Ergebnis

Einfärben der Lücken

PyMOL> select leer, b<0

Die Auswahl "leer" nach belieben einfärben