

Introducción a Jmol

Jmol es un programa muy completo de visualización de moléculas en perspectiva. Recoge una gran cantidad de utilidades de su inmediato predecesor, **RasMol**, y añade muchas otras más. Reconoce, entre otros, archivos estructurales en formato **.pdb** (abreviatura de *Protein Data Bank*), que son la forma usual de representación tridimensional de moléculas. Jmol es un programa Java, y por ello requiere tener instaladas en el sistema las últimas actualizaciones de Java. Por esa razón es independiente de plataformas, y funciona perfectamente en todas ellas. Jmol puede incrustarse en forma de *applets* en páginas web (forma en la que se presentan las distintas demostraciones). Se trata, asimismo, de un programa *freeware* (es decir, gratuito y a disposición de quien lo quiera usar sin necesidad alguna de licencia).

Aquí se presentan las instrucciones más elementales de Jmol. Una información completa puede encontrarse en las siguientes direcciones web:

<http://www.jmol.org/>

<http://jmol.sourceforge.net/>

<http://biomodel.uah.es/Jmol/>

http://wiki.jmol.org:81/index.php/Main_Page

Uso elemental del programa Jmol

Esta actividad será desarrollada en las aulas de informática dentro del programa de prácticas de la asignatura.

1. Iniciación del programa y sus ventanas.

El archivo ejecutable Java para iniciar Jmol es

Jmol_files/**Jmol.jar**

(En Windows Internet Explorer suele aparecer una advertencia sobre la posibilidad de que el programa contenga software no deseado, como virus, gusanos, etc. Aceptar la iniciación del programa, que es completamente inocuo)

Aparecerá una ventana de fondo negro con el formato usual de las aplicaciones Windows, que contiene en la línea de arriba los menús desplegables **Archivo, Editar, Estilo, Vista, Herramientas, Macros**. Esta ventana aparece semidesplegada; puede desplegarse en su totalidad y ocupar toda la pantalla, pero durante el manejo del programa es preferible que esté semidesplegada. Se trata de la **ventana de visualización**, dado que en ella veremos las moléculas.

Al mismo tiempo aparece otra ventana de fondo blanco. Es la **Consola de guiones** (o **ventana de comandos**). Si no apareciera, pulsando el botón derecho del ratón sobre la ventana de visualización aparecerá un menú desplegable. Ir a la opción **Consola**, y aparecerá dicha ventana. En ella podemos introducir instrucciones desde teclado a partir del *prompt* **\$**. Esta ventana aparece también semidesplegada y conviene situarla de manera que no oculte a la ventana de visualización.

Para activar cualquiera de las dos ventanas no tenemos más que pinchar con el ratón la ventana deseada.

2. Apertura de un archivo

En la ventana de visualización, desplegar el menú **Archivo** y elegir la opción **Abrir**. Aparece un cuadro de diálogo. Ir al directorio **Demo_Jmol/Aminoácidos/estructuras**. En este directorio están, entre otros, las estructuras de los veinte aminoácidos proteicos, identificados con el código de una letra y la extensión **.pdb**. Abrid **m.pdb**, que corresponde al aminoácido metionina. Aparecerá la estructura tridimensional de la metionina en modelo de bolas y barras en la pantalla de visualización.

Los archivos **.pdb** (abreviatura de Protein Data Bank, Brookhaven, USA) son una forma estándar de almacenar información estructural de moléculas. Se trata de archivos de texto en el que se especifican, entre otras cosas, las coordenadas X, Y, y Z de todos y cada uno de los átomos presentes en la molécula.

Jmol no permite más de una molécula en pantalla. Si se desea visualizar otra, volver a **Abrir** en el menú **Archivo** y a continuación abrir la estructura deseada. De momento seguiremos en pantalla con la molécula de metionina. Obsérvese que el grupo amino aparece protonado (es decir, como $-\text{NH}_3^+$ y el grupo carboxilo disociado, es decir, como $-\text{COO}^-$). La representación (como en todos los aminoácidos, según veremos) es por tanto la de *ión anfótero*, que es como se presentan habitualmente a pH 7 en solución.

3. Información

Desplegando con el botón derecho el menú principal, elegir la opción **m** (nombre del archivo de metionina). Aparecerá un desplegable que informa del número de átomos y enlaces presentes en la estructura. Al tratarse de un compuesto de bajo peso molecular, esta información es bastante escasa. En el caso de las proteínas, la información, como veremos, es mucho más completa.

4. Formas de visualización

En la pantalla de visualización, desplegar el menú principal con el botón derecho del ratón. Ir al submenú **Estilo**, y de ahí al sub-submenú **Patrón**. En el mismo aparecen las distintas opciones de representación de la molécula. La que tenemos en pantalla es la que el programa ofrece por defecto **Bolas y Varillas** (abreviadamente, en lo sucesivo, la

ruta serán indicada como **Estilo > Patrón > Bolas y Varillas**). Explórense todas las posibilidades, que son las siguientes:

Esferas CPK: (**Estilo > Patrón > Esferas CPK**) Es la molécula con los átomos representados a su radio de Van der Waals, siendo ésta la forma de representación que más se acerca a la estructura real de la molécula. Los átomos en el código de colores CPK (Representación de Corey, Pauling y Kultun) en la que el carbono aparece en gris, el hidrógeno en blanco, el oxígeno en rojo, el nitrógeno en azul y el azufre en amarillo. El inconveniente de esta representación es que al no verse los enlaces interatómicos, es difícil ver la estructura 3D de la molécula a efectos didácticos.

Bolas y Varillas: Es la opción por defecto en el programa. Utiliza el mismo código de colores CPK, pero se visualizan los enlaces y aunque los átomos no aparecen a su radio real, se mantiene el tamaño relativo de unos y otros (así, el hidrógeno aparece más pequeño que los otros átomos). Es la forma más conveniente para visualizar moléculas pequeñas.

Varillas: Aparecen únicamente los enlaces interatómicos, representados como barras gruesas, y conservando el color CPK.

Alambres: Aparecen también únicamente los enlaces interatómicos con los colores CPK, pero representados como alambres finos (es la representación que equivale a los modelos *Dreiding* utilizados en Química Orgánica)

Las opciones **Esquemático** y **Cordón** sólo funcionan en macromoléculas, como veremos más adelante.

Seleccionar el modelo **Bolas y Varillas** para seguir con la práctica.

5. Rotación de la molécula

Podemos hacer rotar la molécula sobre el eje Y, vertical, o sobre el eje X, horizontal sobre ambos ejes **arrastrando el ratón manteniendo oprimido el botón izquierdo del mismo**.

La rotación sobre el eje Z (el que va desde el observador a la pantalla) se consigue **arrastrando con el botón derecho al tiempo que se mantiene oprimida la tecla de Mayúsculas**.

Igualmente, las rotaciones precisas pueden introducirse desde la ventana de comandos. Por ejemplo,

\$ rotate x 30 [Enter]

rotará la figura 30 grados sobre el eje x en sentido horario. La instrucción

\$ rotate z -60 [Enter]

girará la molécula 60 grados sobre el eje z en sentido antihorario.

6. Comando Zoom

Podemos acercar o alejar el punto de vista de la molécula **arrastrando con el botón izquierdo del ratón al tiempo que se mantiene oprimida la tecla de Mayúsculas**.

Podemos obtener valores más precisos de zoom introduciendo comandos en la ventana correspondiente. La molécula, por defecto, aparece en el valor **zoom 100**. Cifras mayores de 100 nos acercan a la molécula; cifras menores de 100 nos alejan de ella. Pasar a la ventana de comando. Escribir la orden

\$ zoom 50 [Enter]

y pasar a la pantalla de visualización. Observar el efecto.

Probar a continuación con otros valores de **zoom**. Una vez probado el efecto, volver a **zoom 100**.

7. Traslación de moléculas

Podemos trasladar la molécula sobre la pantalla **arrastrando con el botón derecho del ratón al tiempo que se mantiene oprimida la tecla Ctrl**.

8. Mediciones

Jmol permite realizar una serie de mediciones sobre la molécula dándonos sus dimensiones reales. Volver a la representación **Bolas y Varillas** a zoom 100.

8.1 Distancias

Vamos a medir la distancia entre el átomo de azufre y el nitrógeno del grupo amino. Ir al menú desplegable y elegir **Mediciones > Clic para medir distancia**. A continuación hacer clic sobre el átomo de azufre (amarillo) y a continuación, otro clic sobre el átomo de nitrógeno (azul). Aparece una línea recta uniendo los dos átomos e indicando **0.458 nm**, es decir, 4,58 angstroms.

En el menú desplegable, elegir **Mediciones > Borrar mediciones**. Desaparece la medición efectuada.

8.2 Ángulos

Para medir el ángulo entre tres átomos contiguos, tomaremos como ejemplo el ángulo formado por el átomo de azufre y sus dos carbonos contiguos. En el menú desplegable, elegir **Mediciones > Clic para medir ángulo**. Hacer clic sucesivamente (una sola vez) sobre el carbono metílico terminal, el azufre y el carbono contiguo. Aparece indicado el valor del ángulo, **105.0°**.

En el menú desplegable, elegir **Mediciones > Borrar mediciones**. Desaparece la medición efectuada.

8.3 Ángulos de torsión

Si tenemos una cadena de cuatro átomos consecutivos, un ángulo de torsión es el diedro formado por el plano determinado por los tres primeros átomos y el plano formado por los tres últimos. En otras palabras, el ángulo de torsión es la torsión en torno al enlace que une los dos átomos intermedios de los cuatro. Los ángulos de torsión son importantes en la determinación de la estructura secundaria de las proteínas.

Para medir ángulos de torsión, seleccionar en el menú **Mediciones > Clic para medir torsión (ángulo diedro)**. Pinchar en cuatro átomos consecutivos para obtener la medición.

En el menú desplegable, elegir **Mediciones > Borrar mediciones**. Desaparece la medición efectuada.

9. Reconocimiento de átomos

En el menú principal seleccionar **Átomo elegido > Identificar**.

Pinchando con el botón izquierdo del ratón en cualquiera de los átomos, aparecerá en la Consola de guiones la naturaleza del átomo seleccionado. Así, si pinchamos sobre el azufre, en la ventana de comandos aparecerá

```
S #4 -2.093 0.89599997 0.049999997
```

que nos indica que se trata de azufre (S) que es el átomo nº 4 (#4) en el archivo m.pdb y sus tres coordenadas espaciales. En las proteínas, como veremos, se obtiene mucha más información.

10. Practicar con otras moléculas

A continuación, opérese con todos los comandos descritos para familiarizarnos con los mismos. Llevar a pantalla otros aminoácidos u otras estructuras. En los directorios que se indican se pueden encontrar:

/Demo_Jmol/Estructuras_organicas/estructuras	Compuestos orgánicos básicos
/Demo_Jmol/Hidratos_de_Carbono/estructuras	Hidratos de Carbono

/Demo_Jmol/Lipidos/estructuras	Lípidos
/Demo_Jmol/Aminoacidos/estructuras	Aminoácidos
/Demo_Jmol/Proteinas/estructuras	Proteínas
/Demo_Jmol/Acidos_Nucleicos/estructuras	Ácidos Nucleicos
/Demo_Jmol/varios	Coenzimas, fármacos, hormonas, etc.

Aplicación de Jmol al estudio de proteínas

El programa Jmol fue diseñado para estudiar, sobre todo, estructuras macromoleculares. Veremos que las posibilidades del programa son mucho mayores que con moléculas pequeñas. Para iniciarnos en su uso vamos a utilizar una proteína muy pequeña, la **rubredoxina**, de 53 aminoácidos. Cuando hayamos practicado con ella, podremos pasar a estructuras más complejas.

La rubredoxina es una proteína de transporte electrónico que pertenece a una familia de proteínas que contienen hierro y azufre. Se conocen con el nombre de ferredoxinas, ferrosulfoproteínas o proteínas NHI (*Non-Heme Iron Proteins*, proteínas de hierro no hemínico). El hierro está coordinado tetraédricamente a átomos de azufre en estas estructuras.

La rubredoxina es la ferredoxina más sencilla, y se encuentra en bacterias. En todos los organismos vivientes hay ferredoxinas formando parte de sistemas de transporte electrónico (mitocondrial, microsomal, fotosintético, etc.)

1. Generalidades

El archivo ejecutable Java para iniciar Jmol es

Jmol_files/Jmol.jar

(En Windows Internet Explorer suele aparecer una advertencia sobre la posibilidad de que el programa contenga software no deseado. Aceptar la iniciación del programa, que es completamente inocuo)

En el menú **Archivo**, elegir **Abrir**. Aparece un cuadro de diálogo. Ir al directorio **Demo_Jmol/Proteinas/estructuras** y seleccionar y el archivo **rubredoxina.pdb**. Aparece en pantalla la estructura de la proteína en modelo de Bolas y Varillas. Obsérvese que **en las representaciones de proteínas, por lo general no aparecen los átomos de hidrógeno**.

En torno a la estructura aparece una multitud de átomos rojos aislados. Se trata, en realidad, de moléculas de agua contenidas en la celda cristalina unidad (Las estructuras proteicas se suelen determinar por difracción de rayos X sobre cristales de la proteína). Para hacerlos desaparecer, teclear en la ventana de comando:

\$ restrict not solvent [Enter]

Este comando **restrict not solvent** elimina de la visión los átomos del solvente, restringiendo la visión a los átomos propios de la proteína.

Desplegando con el botón derecho el menú principal, elegir la opción **1CAA** (éste es el código de la rubredoxina en la base de datos PDB, Protein Data Bank). Aparecerá la siguiente información: 475 átomos, 429 enlaces, 115 grupos, 1 cadenas, 1 polímero. Por el momento nos interesa saber que 1 cadenas indica que la proteína consta de un solo polipéptido (es decir, que no tiene estructura cuaternaria).

Podemos obtener mucha más información de la siguiente manera: En el menú principal, elegir **Mostrar > Cabecera del archivo**. En la ventana de comando aparecerán las primeras líneas del archivo **rubredoxina.pdb** con información sobre la molécula, su procedencia y los datos cristalográficos básicos:

COMPND	Compuesto: una descripción del modelo
SOURCE	Procedencia biológica: en este caso, la arquea <i>Pyrococcus furiosus</i>
AUTHOR	Autor(es) del archivo estructural
REVDAT	Fecha de las revisiones del modelo
JRNL	Revista de publicación
REMARK	Datos generales estructurales, principalmente cristalográficos
SEQRES	Secuencia de aminoácidos de la proteína
HET	Moléculas hetero (no proteicas) presentes en el archivo estructural
HELIX	Residuos que forman α -helicoides
SHEET	Residuos que forman hojas plegadas β
TURN	Residuos que forman giros β

2. Formas de representación

En el menú principal, (**Estilo > Patrón > Esferas CPK**) nos da la representación espacial a radio de van der Waals, como en las moléculas pequeñas. Lo mismo podemos decir de la representación **Bolas y Varillas**, **Varillas** y **Alambres**.

Para las proteínas, en este mismo menú hay otras dos posibilidades:

Estilo > Patrón > Esquemático: Es un modelo en cinta de la estructura de la proteína. Se muestra en el mismo únicamente el esqueleto proteico, sin cadenas laterales. Las zonas en cinta son las que tienen estructura secundaria en hélice o lámina. Las puntas de las flechas señalan la dirección hacia el C-término de la proteína. Asimismo, las diferentes estructuras secundarias llevan un código específico de color: α -helicoides en rojo, estructuras β en amarillo y giros β en azul, quedando en blanco las zonas sin estructura secundaria. Ésta es la representación de las proteínas más usual en libros y en la literatura bioquímica en general.

Estilo > Patrón > Cordón: Similar al anterior, pero las zonas con estructura secundaria no aparecen como cintas. Toda la proteína aparecen como un cordón que se extiende desde el N-término hasta el C-término.

3. Colores

Existe la posibilidad de cambiar de colores desde el menú principal. Ahora bien, nosotros lo haremos a partir de la Consola de guiones (Ventana de Comandos).

- El comando

\$ color group

Nos da la representación en color según sea la posición del aminoácido en la cadena peptídica; sigue el espectro del arco iris de manera que el N-término se representa en azul y el C-término en rojo, con toda la gama intermedia.

- El comando

\$ color chain

Representa con distintos colores las diferentes cadenas polipeptídicas de que consta la proteína. En el caso de la rubredoxina nos da un solo color dado que ésta no tiene estructura cuaternaria.

- El comando

\$ color shapely

Representa los distintos aminoácidos según el código Shapely (no lo utilizaremos)

- El comando

\$ color temperature

Representa los *factores anisotrópicos* de temperatura de las distintas partes de la molécula, de manera que las zonas más "calientes", es decir, las más sometidas a agitación térmica, aparecen en rojo y las más "frías" en azul, con toda la gama intermedia.

- El comando

\$ color structure

Distingue las zonas según su estructura secundaria. Así, las zonas en hélice aparecen en rojo, las zonas en lámina en amarillo, las zonas en vuelta en azul, y las zonas sin estructura secundaria en blanco.

Volver a la representación en color **CPK** mediante el comando

\$ color cpk

4. Reconocimiento de átomos y residuos

De la misma manera que vimos en el modelo de metionina, Jmol reconoce los átomos en las proteínas.

En primer lugar, recuperamos la situación y el zoom inicial de la molécula con el comando

\$ reset

Pinchar con el ratón el átomo de oxígeno (rojo) que aparece en la parte inferior extrema de la molécula. Pasar a la ventana de comando y nos informa de los siguiente:

[GLU]31.OE1 #238 9.875999 -10.771 5.058

Lo cual nos indica:

- Que pertenece al residuo Glu 31
- Que está en la posición $\epsilon 1$ (E1) de la molécula del aminoácido. Recuérdese que en los ácidos orgánicos se llama carbono α al adyacente al carboxilo, β al siguiente, y así sucesivamente con el alfabeto griego: γ , δ , ϵ , ζ , η , θ , etc. Se utiliza el equivalente latino de la letra griega; así, CA significa carbono α , CB carbono β , CG carbono γ , etc.
- Que es el átomo listado en la posición 238 del archivo estructural **rubredoxina.pdb**.

Igualmente, señalando (sin hacer clic) con el puntero ese mismo átomo en la ventana de visualización aparece en una ventanita la misma información estructural (sin las coordenadas espaciales)

Practicar este comando con otros átomos de la estructura. Los carbonos y nitrógenos pertenecientes a los enlaces peptídicos se representan simplemente como C y N (y no CA, CB, etc.), pero sí se indica el residuo de aminoácido al que pertenecen.

Recuérdese que en la mayoría de las proteínas no se representan los átomos de hidrógeno.

5. Selección previa de átomos y estructuras

Jmol permite seleccionar átomos o conjuntos de átomos con alguna propiedad en común. Una vez seleccionados, todos los comandos que se ejecuten a continuación operarán únicamente sobre el conjunto seleccionado. Vamos a ver únicamente los más importantes.

5.1 Selección de aminoácidos

Supongamos que queremos visualizar todas las isoleucinas presentes en la molécula. Pasamos a la ventana de comando y tecleamos

\$ select ile

El programa nos informa que el programa ha seleccionado 32 átomos pertenecientes a todas las isoleucinas de la molécula. A partir de ahora, todos los comandos que tecleemos o seleccionemos operarán únicamente sobre el conjunto de las isoleucinas.

Por ejemplo, si queremos que las isoleucinas aparezcan en color blanco tecleamos el comando

\$ color white

con lo cual aparecen en dicho color las cuatro isoleucinas de la molécula.

Para volver a la situación inicial, tecleamos sucesivamente

\$ select not solvent (o bien **\$ select all**)

\$ color cpk

La molécula contiene un átomo de hierro coordinado a cuatro cisteínas. Para ver bien esta estructura, tecleamos sucesivamente:

\$ color green (toda la molécula queda en color verde)

\$ select cys (seleccionamos las cisteínas)

\$ color cpk (las coloreamos en código cpk)

\$ select fe (seleccionamos el hierro)

\$ color cpk (coloreamos cpk al hierro)

Esta misma secuencia de comandos puede introducirse en una misma línea, con los comandos separados por punto y coma (;). Por ejemplo,

\$ color green; select cys; color cpk; select fe; color cpk

Con las maniobras que hemos hecho, tenemos seleccionado únicamente el átomo de hierro. Para volver a seleccionar toda la molécula, tecleamos

\$ select not solvent (o bien **\$ select all**)

y volvemos al color cpk:

\$ color cpk

Practicar seleccionando otros aminoácidos (se introduce el código de tres letras en minúsculas).

Podemos seleccionar también aminoácidos por el lugar que ocupan en la cadena peptídica. Por ejemplo, para seleccionar el aminoácido que contiene el N-término y colorearlo en blanco, las órdenes serían:

\$ select 1; color white

De esta manera podemos seleccionar todos los residuos (del 1 al 53) de esta proteína.

Volvemos a la representación inicial:

\$ select all; color cpk

5.2 Heteroátomos

Conocemos con el nombre de *heteroátomos* aquéllos que no pertenecen a la estructura peptídica propiamente dicha, aunque formen parte de la misma (por ejemplo, átomos metálicos y grupos prostéticos) así como las numerosas moléculas de solvente (normalmente agua) que aparecen en la estructura dado que quedan incluidas en los cristales de proteína a partir de los que se obtiene la estructura tridimensional. Para visualizarlos, coloreamos en verde toda la molécula, seleccionamos los heteroátomos y los representamos en color cpk:

\$ color green; select hetero; color cpk

En este caso, aparecerá únicamente el átomo de hierro. (Tenemos desde el principio excluida el agua de cristalización mediante el comando **\$ restrict not solvent**)

Volvemos a seleccionar toda la molécula (excepto el agua) con el comando

\$ select not solvent; color cpk

5.3 Selección de estructuras secundarias

Jmol permite visualizar las zonas que tienen una estructura secundaria determinada. Para ello se emplean las palabras clave **helix** (helicoides), **sheet** (lámina) y **turn** (vuelta). Por ejemplo, la secuencia de comandos

\$ color green; select helix; color cpk

Selecciona las zonas de la molécula que están formando parte de α -helicoides.

Volver a la representación inicial:

\$ select all; color cpk

5.4 Conjuntos predefinidos en Jmol

La instrucción **\$ restrict** funciona como **\$ select**, pero con la particularidad de que elimina la visión de todo aquello que no esté comprendido en la instrucción.

La instrucción **\$ select** (así como **\$ restrict**) nos permite seleccionar una serie de grupos de átomos o residuos con propiedades en común. Éstos son los llamados **conjuntos predefinidos**. Para su conocimiento, los clasificamos en tres grupos:

5.4.1 Conjuntos predefinidos de átomos

alpha: el conjunto de carbonos α de la molécula
amino: el conjunto de átomos que pertenecen a una estructura peptídica
backbone: los átomos del esqueleto proteico N - C α - C de todos los aminoácidos
hetero: conjunto de átomos no peptídicos en la estructura
ligand: heteroátomos no pertenecientes al solvente: cofactores, grupos prostéticos, substratos, etc.
nucleic: átomos pertenecientes a un ácido nucleico
protein: átomos pertenecientes a la proteína, con las modificaciones postraduccionales más comunes (similar a **amino**)
solvent: el conjunto de átomos del solvente
water: átomos que forman parte de moléculas de agua.

5.4.2 Conjuntos predefinidos de aminoácidos

acidic: El conjunto de aminoácidos dicarboxílicos Asp y Glu
acyclic: El conjunto de aminoácidos que no tienen estructura cíclica.
aliphatic: El conjunto de aminoácidos alifáticos Gly, Ala, Val, Leu, Ile.
aromatic: el conjunto de aminoácidos aromáticos Phe, Tyr, Trp, His.
basic: el conjunto de aminoácidos básicos Lys, Arg, His
charged: el conjunto de aminoácidos con carga eléctrica
cyclic: aminoácidos con estructura cíclica: Pro, His, Phe, Tyr, Trp
cystine: las cisteínas unidas por enlace -S-S-
large: aminoácidos con cadena lateral grande
hydrophobic: residuos con cadena lateral hidrofóbica
medium: aminoácidos de tamaño medio
neutral: aminoácidos neutros
polar: aminoácidos polares o hidrofílicos
small: aminoácidos de cadena lateral corta

5.4.3 Conjuntos predefinidos de estructuras

buried: el conjunto de átomos que radican en el interior de la molécula, alejados del solvente
helix: residuos que forman α -helicoides
sheet: aminoácidos formando parte de una estructura secundaria en lámina β
surface: átomos que radican en la superficie de la molécula, en contacto con el solvente.
turn: aminoácidos formando parte de una estructura secundaria en giro β

Practicar selecciones a partir de estos conjuntos.

6. Hemoglobina

Practiquemos ahora con moléculas más grandes. En la carpeta **Demo_Jmol > Proteínas > estructuras** hay una gran cantidad de archivos con estructuras de proteínas.

Abrir el archivo **Demo_Jmol > Proteínas > estructuras > 1rvw.pdb**. este archivo contiene un modelo de Hemoglobina en el estado oxi- (forma R). En realidad se trata de carbomonoxihemoglobina, esto es, unida a monóxido de carbono en lugar de oxígeno.

En primer lugar, suprimanse las moléculas de solvente con el comando **\$ restrict not solvent**. Cambiar la representación a Estilo > Patrón > Esquemático. Nótese que la estructura secundaria predominante es α -helicoides.

6.1 Subunidades y grupo hemo

El comando **\$ color chain** atribuye un color diferente a cada una de las subunidades de la proteína: Subunidad **a** ($\alpha 1$) en azul, subunidad **b** ($\beta 1$) en verde, subunidad **c** ($\alpha 2$) en rosa y subunidad **d** ($\beta 2$) en amarillo.

En el archivo estructural, los átomos del grupo hemo aparecen como HETATM (heteroátomos). Para visualizar los grupos hemo, utilizar el comando **\$ select ligand** y cambiar la representación a Bolas y Barras. Aparecen los cuatro grupos hemo, uno en cada subunidad.

6.2 Una subunidad aislada

Podemos restringir la visión a la subunidad $\alpha 1$ con el comando

\$ restrict *a

(o ***b** la $\beta 1$, ***c** la $\alpha 2$ y ***d** la $\beta 2$). Conviene centrar el modelo en la subunidad ***a**. En el menú principal, seleccionar **Átomo elegido > Centrar**. Pinchar en el átomo de hierro en el centro del grupo hemo. El modelo se centrará entonces sobre dicho átomo. Cambiar inmediatamente a **Átomo elegido > Identificar** (si no se hace, el modelo se centrará a cada clic del ratón).

7. Inmunoglobulinas

Abrir el archivo **Demo_Jmol > Proteínas > Estructuras > 1igt.pdb**. es un archivo estructural de Inmunoglobulina G.

En este archivo están representados los átomos de hidrógeno. Cambiar la representación a **Esquemático** y el color a **chain**. Identificar las cadenas ligeras y pesadas, así como los fragmentos Fab (2) y Fc (1). En el centro del modelo aparece una zona sin estructura secundaria: es la región *bisagra* (*Hinge*), el punto en el que la enzima papaína rompe la molécula en los tres fragmentos citados.

7.1 La cadena ligera

El comando **\$ restrict *a** restringe la visión a la cadena ligera L1. Se ven claramente los dos dominios, en variable (VL) en la mitad N-terminal y el constante (CL) en la C-terminal. Centrar la molécula en la región comprendida entre los dos dominios. Para

distinguirlos, utilícese el **\$ color group**. El dominio VL contiene el N-término (azul) y el CL el C-término (rojo). Nótese la estructura secundaria característica de ambos dominios, una doble lámina β antiparalela.

Seleccionar la molécula completa con el comando **\$ select all**

7.2 The Heavy chain

Restringir la visión a una de las cadenas pesadas con el comando **\$ restrict *b**. Podemos ver claramente los cuatro dominios de la cadena pesada. Son el dominio variable VH y los tres constantes CH1, CH2 y CH3. Centrar la molécula en la región comprendida entre CH1 y CH2. El dominio variable contiene el N-término y el CH3 el C-término. Pueden ser distinguidos con el comando **\$ color group**.

El dominio CH2 aparece unido a un polisacárido complejo. Para visualizarlo, utilice el comando

\$ select ligand and *b

Y cambiar la representación a **Bolas y Barras**.

Jmol en páginas web

Jmol puede incluirse en páginas web. Se puede acceder a las demostraciones de este curso a través del archivo

Jmol_files > Demo_Jmol > Indice.html