



Ο Κώστας είναι ιδρυτικό μέλος του GREEKLUG.

## Χημεία στο Linux (Μέρος 2ο)

Το ταξίδι στο μαγικό κόσμο των μορίων και της Χημείας συνεχίζεται με το PyMOL, με το οποίο μπορούμε να δημιουργήσουμε τρισδιάστατες αναπαραστάσεις των χημικών μορίων...



Οδηγοί  
χρήσης

Εργαλεία: Python, PyMol

Δυσκολία: ★★★★★

URL: <http://pymol.org>

Στο πρώτο μέρος αυτής της σειράς άρθρων (τεύχος 5), είχα γράψει ότι την επόμενη φορά θα παρουσιάζα τα εργαλεία gcu, chemical calculator, spectrum viewer και gnome crystal του Gnome. Παρ' όλα αυτά, προτιμώ τελικά να παρουσιάσω πρώτα κάτι πιο εντυπωσιακό και με λίγο περισσότερο «κώδικα» από τις άλλες φορές. Υπόσχομαι όμως ότι στο επόμενο άρθρο τα παραπάνω εργαλεία του Gnome θα έχουν την τιμητική τους. :)

### Τι είναι η ψηφιακή απεικόνιση μορίων

Η ψηφιακή απεικόνιση μορίων (Molecular Visualization) είναι η διαδικασία της ερμηνείας οπτικών εικόνων των μορίων στην οθόνη ενός υπολογιστή. Πρέπει να τονιστεί το γεγονός ότι η ερμηνεία είναι κάτι πιο πολύπλοκο από την απλή προβολή εικόνων σε ένα PC. Γι' αυτόν το λόγο υπάρχουν εξειδικευμένα προγράμματα που μπορούν να βοηθήσουν τα μέλη της πανεπιστημιακής κοινότητας και να καταστήσουν τη διαδικασία συγγραφής ενός επιστημονικού άρθρου πιο εύκολη. Αν μάλιστα συνυπολογίσουμε την ύπαρξη λογισμικού ανοικτού κώδικα υψηλής ποιότητας στον τομέα αυτό, τότε έχουμε ένα πραγματικό δώρο για τους επιστήμονες των βιολογικών, κυρίως, επιστημών.

### PyMOL

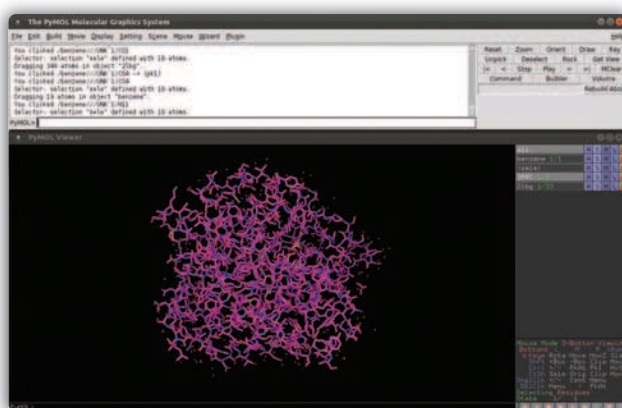
Το PyMOL είναι αυτή τη στιγμή ένα από τα κορυφαία open source προγράμματα στον τομέα αυτό. Όπως αφήνει να εννοηθεί και το όνομά του, είναι φτιαγμένο με τη γλώσσα προγραμματισμού Python και διανέμεται ελεύθερα υπό την άδεια

**Απαραίτητα για τη λειτουργία του PyMOL είναι τα πακέτα της Python αφού σε αυτή τη γλώσσα βασίζεται το πρόγραμμα.**

χρήσης Python License (CNRI Python License). Η εφαρμογή αναπτύσσεται από την εταιρεία Βιοπληροφορικής Schrödinger, ενώ ταυτόχρονα έχει και μία δραστήρια κοινότητα αποτελούμενη από επιστήμονες και ερευνητές. Δεν είναι τυχαίο άλλωστε το γεγονός ότι περίπου το ένα τέταρτο των δημοσιευμένων τρισδιάστατων εικόνων της επιστημονικής βιβλιογραφίας έχουν κατασκευαστεί με το πρόγραμμα αυτό.

Το PyMOL υποστηρίζει δεδομένα προς απεικόνιση από τις τεχνικές της Ηλεκτρονικής Μικροσκοπίας (Electron Microscopy – EM) και της Κρυσταλλογραφίας Ακτινών Χ (X-Ray Crystallography – XRC), ενώ παρέχει υποστήριξη για την απεικόνιση των σημείων σύνδεσης (binding site) πολύπλοκων μορίων όπως το DNA, RNA κ.ά.

Οι κύριοι άξονες δράσης στους οποίους στηρίζεται η λειτουργία του προγράμματος είναι: view, render, animate,



**1** Το κεντρικό μενού (πάνω) και το παράθυρο προβολής (κάτω) του PyMol.

export, present, develop. Οι δύο τελευταίοι άξονες περιλαμβάνουν τη χρήση συμπληρωματικών προγραμμάτων όπως το AxPyMOL και το JyMol, που αποτελούν αντιστοίχως plug-in για την προβολή τρισδιάστατων μορίων σε προγράμματα παρουσίασης και πλατφόρμα (βασισμένη στη γλώσσα Java) για την ανάπτυξη προγραμμάτων ψηφιακής απεικόνισης μορίων σε δεύτερο επίπεδο, ώστε να ικανοποιηθούν οι ιδιαίτερες ανάγκες κάθε εργαστηρίου.

Βέβαια, στο PyMOL θα βρει κανείς τα απαραίτητα εργαλεία για να δημιουργήσει από το μηδέν μόρια και φυσικά να επεξεργαστεί έτοιμες δομές από τις επιστημονικές βάσεις δεδομένων. Παρ' όλα αυτά, συνήθως χρησιμοποιείται για τη δημιουργία επιστημονικού animation μικρού μήκους και την παραγωγή rendered εικόνων για εισαγωγή σε παρουσιάσεις και άρθρα.

### Τα πρώτα βήματα

Το PyMol συνεργάζεται με περισσότερους από 30 διαφορετικούς τύπους αρχείων, από .pdb αρχεία για τις πρωτεΐνες, μέχρι χάρτες μέτρησης ηλεκτρονικής πυκνότητας. Ας δούμε λοιπόν πώς γίνεται αυτή η διαδικασία για μία πρωτεΐνη. Τα αρχεία .pdb των πρωτεΐνων, τα οποία αποτελούν διεθνές πρότυπο και υπάρχουν από την εποχή των διάρτητων καρτών, βρίσκονται σε μεγάλες βάσεις δεδομένων, όπως η RCSB Protein Data Bank.

Μπαίνοντας κάποιος χρήστης στο Web site της RCSB PDB, μπορεί να κατεβάσει ελεύθερα οποιαδήποτε δομή υπάρχει σε αυτή τη βάση, αλλά για προχωρημένες λειτουργίες, όπως υποβολή κάποιας δομής, θα πρέπει να δημιουργήσει λογαριασμό χρήστη. Στο παράδειγμά μας, με μία τυχαία έρευνα βρίσκουμε τη δομή της πρωτεΐνης Mutant of the Carboxypeptidase.

Επειδή το πρόγραμμα είναι άμεσα συνδεδεμένο με την RCSB Protein Data Bank, μπορούμε πιο άμεσα να δώσουμε την εντολή:

```
fetch 3PRT
```

Βέβαια, προϋπόθεση για να φτάσουμε σε αυτό το σημείο είναι να γνωρίζουμε τις πρωτεΐνες με τα «μικρά» τους ονόματα στη βάση δεδομένων, δηλαδή να έχουμε υψηλό επίπεδο εξοικείωσης με το αντικείμενο.

Επειτα αποθηκεύουμε το αρχείο 3PRT.pdb σε έναν φάκελο του οποίου το όνομα αποτελείται από λατινικούς χαρακτήρες (αλλιώς η Python θα έχει πρόβλημα encoding με τα ελληνικά και δεν θα ανοίγει το αρχείο). Ανοίγοντας από το File -> Open το αρχείο που βρίσκεται στον αντίστοιχο κατάλογο μάς παρουσιάζεται η δομή στην απλή μορφή, όπου μπορούμε να δούμε κάποιες απλές λειτουργίες. Με απλό πάτημα του ποντικιού και κράτημα μπορούμε να περιστρέψουμε τη δομή 365 μοίρες προς όλες τις κατευθύνσεις. Με διπλό πάτημα του ποντικιού εμφανίζεται το μενού επιλογών όπου μπορούμε να κάνουμε zoom στο ποσοστό που είναι ορατή ολόκληρη η δομή του μορίου, orient, δηλαδή orientation ως προς τους νοητούς άξονες x,y,z, ενώ με reset μπορούμε να επαναφέρουμε την ένωση στην αρχική προβολή της, όπως δηλαδή εμφανίζεται αρχικά στο αρχείο .pdb. Αυτή η τελευταία επιλογή είναι το «αποκούμπι» μας σε περίπτωση που έχουμε παίξει αρκετά με την ένωση που μελετάμε και κάπου έχουμε χαθεί. Μία ακόμα βασική εντολή-επιλογή είναι η reinitialize, η οποία ουσιαστικά ξεκινά το PyMol από την αρχή, διαγράφοντας οποιαδήποτε ανοικτή συνεδρία χωρίς να χρειαστεί να κλείσουμε και να ανοίξουμε ξανά το πρόγραμμα.

Στο κουτί κάτω δεξιά (Mouse Control Panel) περιγράφονται και μερικοί άλλοι συνδυασμοί πλήκτρων που μπορούμε να κάνουμε, όπως το zoom μέσω Ctrl και +/- ρόδας του ποντικιού. Εναλλακτικά μπορούμε να κρατήσουμε πατημένο το δεξί πλήκτρο του ποντικιού και να σύρουμε το ποντίκι. Με απλό rolling «εξαφανίζονται» επιλεκτικά μερικά μέρη του μορίου, ώστε να μπορούμε να μελετήσουμε καλύτερα τις περιοχές που μένουν ορατές.

Παραπάνω αναφέρθηκε όμως ότι η ψηφιακή απεικόνιση μορίων έχει ως στόχο την ερμηνεία της οπτικής εικόνας. Γι' αυτόν ακριβώς το λόγο πρέπει να είμαστε σε θέση να δούμε ένα μόριο, την πρωτεΐνη στην περίπτωση μας, με διάφορους τρόπους.

Δεξιά πάνω (Object Control Panel) μπορούμε να δούμε το όνομα της κάθε μίας από τις πολλές ενώσεις που μπορεί να έχουμε ανοίξει και δίπλα τα γράμματα A (Action), S (Show), H (Hide), L (Label) και C (Color). Εδώ υπάρχει ένα ενδιαφέρον σημείο: οτιδήποτε βλέπουμε στο μενού επιλογών μπορεί να αποτελέσει εντολή. Δηλαδή, αν δώσουμε την εντολή:

```
hide everything
```

θα εξαφανιστεί οτιδήποτε έχουμε μπροστά μας.

Αντιστοίχως, με τις παρακάτω εντολές παρουσιάζονται οι διάφορες αναπαραστάσεις της πρωτεΐνης, ανάλογα με το ποια μας διευκολύνει ή απαιτείται από την εργασία μας:

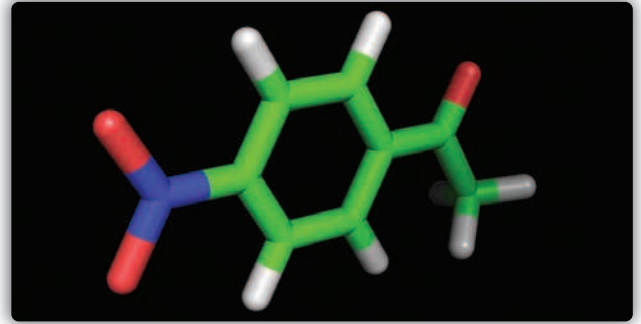
```
show lines
```

```
show sticks
```

```
show cartoon
```

Επιπλέον, μπορούμε να εξαφανίσουμε καθεμία με την εντολή hide, ούτως ώστε να μη συμπίπτουν οι αναπαραστάσεις και μπερδευόμαστε.

Οι εντολές βοηθούν αρκετά σε αυτόν τον τομέα, αλλά δεν συνιστάται το ίδιο και για τις επιλογές των χρωμάτων, οι οποίες θα πρέπει να γίνονται από το παράθυρο επιλογών.



**2 Το μόριο της 4-νιτροακετοφαινόνης που φτιάξαμε με το PyMol, rendered.**

## Προχωρώντας περισσότερο

Κάτω από το Mouse Control Panel μπορούμε να διακρίνουμε δύο γράμματα μαζί με μία σειρά από πλήκτρα αναπαραγωγής: το S και το F. Το F προέρχεται από το Fullscreen και κάνει το προφανές, δηλαδή γεμίζει την οθόνη του υπολογιστή μας με το παράθυρο προβολής του PyMOL. Το S αποτελεί το Selection Tool, και πατώντας το θα εμφανιστεί στο μέτωπο του προγράμματος η ακολουθία των διαφόρων ομάδων που απαρτίζουν το μόριό μας κωδικοποιημένες. Πατώντας πάνω σε ένα γράμμα επιλέγεται μία ομάδα. Αντίστοιχα, επιλέγοντας μία ομάδα εμφανίζεται μία γραμμή κάτω από το αντίστοιχο γράμμα στο Selection Tool. Για να αποθηκεύσουμε μία επιλογή του κάναμε, πατάμε από το μενού Action την επιλογή rename και δίνουμε καινούργιο όνομα στην επιλογή.

Για να αποθηκεύσουμε όμως μία επιλογή από ένα μέρος του μορίου σαν αυτόνομο μόριο θα πρέπει να δώσουμε την εντολή:

```
save fileName, objSel
```

όπου fileName το όνομα που θέλουμε να δώσουμε και objSel το όνομα της επιλογής. Πρέπει να δίνουμε προσοχή στο format που θα δώσουμε στο fileName, το οποίο εξορισμού είναι το format .pdb. Εδώ η παρομοίωση «σαν αυτόνομο μόριο» έχει σημασία γιατί ναι μεν όταν ανοίξουμε εκ νέου το αρχείο θα εμφανιστεί κατευθείαν η επιλογή, αλλά εάν δεν έχουμε σβήσει όλα τα άλλα μέρη, αυτά θα συνεχίσουν να υπάρχουν και μπορούν να εμφανιστούν με zoom/unzoom. Μπορούμε επίσης να αποθηκεύσουμε rendered εικόνες

## PyMol: Ένα ιδιαίτερο open source παράδειγμα

- Από την 1η Αυγούστου του 2006, η πρώτη εταιρεία που ανέπτυξε το πρόγραμμα, η DeLano Scientific, υιοθέτησε κλειστή πολιτική για τα precompiled πακέτα περιορίζοντας την πρόσβαση σε αυτά, αλλά δίνοντάς τα δωρεάν σε ακαδημαϊκούς χρήστες (φοιτητές και καθηγητές). Ωστόσο, ο πηγαίος κώδικας συνεχίζει να είναι ελεύθερος για compile από το χρήστη, όπως και οι προηγούμενες precompiled εκδόσεις. Βασισμένη σε αυτήν την πολιτική, η εταιρεία έκανε πιο δύσκολη τη ζωή των χρηστών εκείνου του λειτουργικού συστήματος που φτιάχνεται στο Redmond. Παρ' όλα αυτά ο καθηγητής Christoph Gohlke από το Laboratory for Fluorescence Dynamics του University of California έχει κατασκευάσει ορισμένα precompiled πακέτα που μπορεί κανείς να βρει στη διεύθυνση [2]. Τέλος, η Canonical προσφέρει την τελευταία έκδοση στα αποθετήρια του Ubuntu, precompiled και ready to rock!





**3** Ένα εξώφυλλο του περιοδικού «Nature», επιμελημένο με το PyMOL.

που έχουν παραχθεί με τα εργαλεία Ray ή Draw στις μορφές .png, POVray και VRML-2.

Η χρήση rendered εικόνων μορίων προσδίδει άλλη αξία στις φοιτητικές ή μεταπτυχιακές εργασίες, εντυπωσιάζοντας τους παρευρισκόμενους καθηγητές ή κριτές. Το PyMOL μάς δίνει, όπως αναφέρθηκε στην αρχή, τη δυνατότητα δημιουργίας βίντεο – μία δυνατότητα που θα εξετάσουμε στο τέλος αυτού του άρθρου.

### Δημιουργία/Επεξεργασία

Για να επιλέξουμε διαφορετικά αντικείμενα (άτομο, άτομο μαζί με τους δεσμούς του, μόριο κ.λπ.) θα πρέπει να κάνουμε εναλλαγή μεταξύ Viewing και Editing στο Mouse Control Panel, πατώντας σε οποιοδήποτε σημείο του πάνω από το State, και κατόπιν εναλλαγή μεταξύ των πιθανών επιλογών που εμφανίζονται στο Selecting/Picking ακριβώς επάνω από το State.

Ας υποθέσουμε πως θέλουμε να φτιάξουμε την 4-νιτροακετοφαινόνη. Από το κεντρικό μενού Build επιλέγουμε Fragment->Phenyl ή εναλλακτικά πατάμε, ευρισκόμενοι στο κεντρικό παράθυρο προβολής, το συνδυασμό Alt+9, οπότε εμφανίζεται το βενζόλιο μαζί με τα υδρογόνα του. Έπειτα δίνουμε εντολή

```
hide lines
```

```
show sticks
```

και κάνουμε εναλλαγή στο Mouse Control Panel ώστε να εμφανιστεί η επιλογή Picking Atoms (and Joints). Επιλέγουμε ένα υδρογόνο, προσθέτουμε Fragment->Nitrogen (ή Ctrl+N) από το μενού Build και μετά επιλέγοντας καθένα ξεχωριστά τα υδρογόνα της αμινομάδας που προστίθενται στο βενζόλιο (το PyMol προσθέτει κάθε άτομο μαζί με τα πιθανά υδρογόνα

που το συνοδεύουν), προσθέτουμε στο άζωτο τα οξυγόνα με Fragment->Oxygen (ή Ctrl+O). Επιλέγουμε τα υδρογόνα που συνοδεύουν τα προστιθέμενα οξυγόνα, πατάμε το πλήκτρο Delete (ναι, στο πληκτρολόγιό μας) και έχουμε έτοιμη τη νιτρο-ομάδα. Στην π-θέση ως προς τη νιτρο-ομάδα (δηλαδή ακριβώς από την άλλη μεριά για όσους δεν έχουν γνώσεις χημείας), επιλέγουμε πάλι το αντίστοιχο υδρογόνο και μέσω του Build προσθέτουμε Fragment->Carbonyl (ή Alt+O). Έτσι όμως δεν έχουμε ακετοφαινόνη, γι' αυτό στο ακραίο υδρογόνο της προστιθέμενης καρβονυλομάδας θα κάνουμε Fragment->Carbon (ή Ctrl-C).

Υπάρχουν και μερικές ακόμα ενδιαφέρουσες επιλογές που μπορούμε να δούμε. Για παράδειγμα, για την εμφάνιση των διπλών δεσμών μπορούμε να δώσουμε την εντολή:

```
set valence, 0.1
```

και για την εξαφάνισή τους την εντολή:

```
set valence, 0.0
```

Στην περίπτωση της 4-νιτροακετοφαινόνης, για το δεσμό του αζώτου με τα οξυγόνα δεν μπορούμε να δούμε επ' ακριβώς τη θεωρητική χημική κατάσταση, καθώς το PyMOL στη βασική έκδοσή του χρησιμοποιεί τις απλούστερες εκδοχές των ενώσεων χωρίς να περιλαμβάνει πολύπλοκη ανάλυση. Ενδεχομένως να μπορούμε να βρούμε plug-ins μέσω του PyMolWiki (βλ. σχετικό πλαίσιο), τα οποία να μας προσφέρουν ικανοποιητικότερες προβολές.

Η προβολή επίσης των δεσμών υδρογόνου και των πολικών δεσμών μπορεί να γίνει πολύ εύκολα μέσω του μενού A(ction)->find->polar contacts->within selection. Μπορούμε να πειραματιστούμε στην 3PRT που κατεβάσαμε στην αρχή.

Η «αφυδάτωση» ενός μορίου που εξετάζουμε γίνεται εξαιρετικά απλή με την εντολή

```
remove resn HOH
```

Είναι πολύ χρήσιμη εντολή, δεδομένου ότι πολλές φορές χρειάζεται σε βιολογικές αντιδράσεις να εξεταστεί το μοριακό βάρος της ένωσης χωρίς τα μόρια ύδατος. Το πρόγραμμα μάς ενημερώνει στο κεντρικό παράθυρο πώς.

```
Remove: eliminated 236 atoms in model "3PRT".
```

Αντίστροφα εργαζόμενοι, μπορούμε να σώσουμε μόνο τα μόρια ύδατος από μία μεγάλη δομή δίνοντας την εντολή

```
save wat.pdb, resn HOH
```

### Δημιουργία Βίντεο

Ας δούμε τώρα τα σχετικά με την προβολή και επεξεργασία βίντεο. Ως πρώτο βήμα δίνουμε τις εντολές:

```
fetch 2LBG
```

και μόλις εμφανιστεί η ένωση στο παράθυρο προβολής:

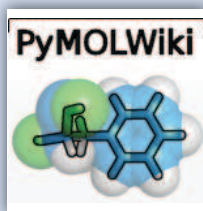
```
hide lines
```

```
show sticks
```

```
mplay
```

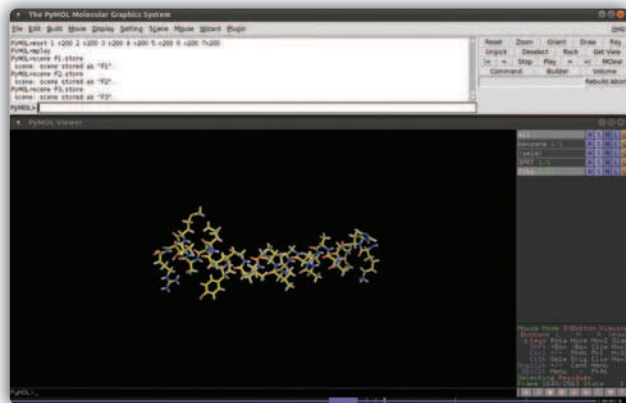
### PyMOLWiki: Μία ενεργή κοινότητα και πολλαπλές επιλογές υποστήριξης.

Το PyMol έχει τη δική του ενεργή κοινότητα η οποία δημιούργησε το δικτυακό τόπο PyMOLWiki [3], όπου μπορεί κανείς να βρει αναλυτικές οδηγίες για τη χρήση του προγράμματος, παραδείγματα δημιουργίας βίντεο αλλά και εξώφυλλα διάφορων επιστημονικών περιοδικών, στα οποία οι ενώσεις έχουν περάσει από το «εργαστήριο». Υπάρχουν επίσης αρκετά plug-ins, κατάλληλα για κάθε είδους εργασία, script library αλλά και gallery με έτοιμες ιδέες προς επεξεργασία.



Επίσης μπορεί κανείς να διαπιστώσει στο Web site του προγράμματος [4] τις πολλαπλές επιλογές υποστήριξης που παρέχονται σε απλούς ή ακαδημαϊκούς χρήστες κάθε επιπέδου και για κάθε λειτουργικό σύστημα.

Τέλος, μπορεί κανείς να ενημερώνεται για την τελευταία έκδοση του PyMol μέσω του RSS feed [5]. Ομολογούμενως η Schrödinger έχει κάνει πολύ καλή δουλειά στον τομέα της υποστήριξης και της ενημέρωσης.



#### 4 Το μόριο 2LBG κατά την επεξεργασία βίντεο. Διακρίνονται τα εργαλεία χειρισμού της ταινίας.

Έτσι θα δούμε μία ταχύτατη αναπαραγωγή βίντεο παρατηρώντας την περιστροφή των ομάδων που μπορούν να περιστραφούν. Πατώντας

```
mstop
```

διακόπτεται η ροή του βίντεο.

Για να κάνουμε αλλαγές σε αυτήν τη γρήγορη εναλλαγή που μόλις είδαμε, μπορούμε να δώσουμε την εντολή mset με ορισμένες παραμέτρους

```
mset 1 x200 2 x200 3 x200 4 x200 5 x200 6 x200 7x200
```

και ούτω καθ' εξής, ώστε η περιστροφή να γίνεται με έναν ρυθμό που να μπορεί να εξηγηθεί. Η περιστροφή μίας δομής κατά 360° μπορεί να επιτευχθεί από το μενού

```
Movie -> Program -> Camera -> X-Roll ->
```

```
Movie -> Program -> Camera -> Y-Roll ->
```

και τις αντίστοιχες επιλογές που δίνονται εκεί. Στην ουσία μας δίνεται η δυνατότητα προγραμματισμού, να καθορίσουμε δηλαδή σε ποιο σημείο της ταινίας θα περιστραφεί η δομή, κατά πόσες μοίρες και σε σχέση με ποιον άξονα. Είναι κάτι εκπληκτικό, καθώς η δημιουργία μίας τέτοιας ταινίας ακριβώς όπως τη θέλει ένας βιολογικός επιστήμονας μπορεί να τον βγάλει από την ανάγκη εναλλαγής διαφανειών σε διαφορετικά χρονικά σημεία μίας ομιλίας του.

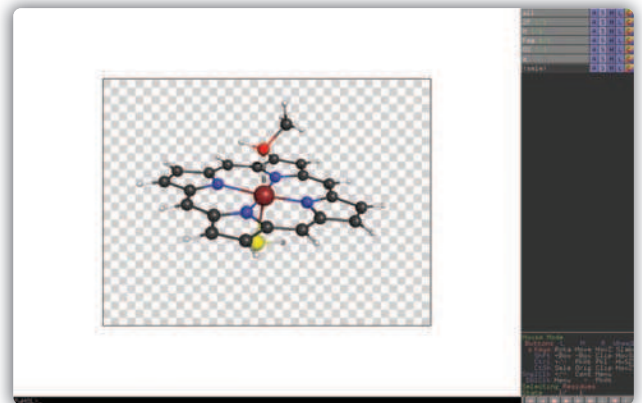
Για να κάνουμε zoom σε ένα συγκεκριμένο τμήμα μίας πρωτεΐνης κατά τη διάρκεια ενός βίντεο πράττουμε ως εξής: Στην ένωση μας, τη 2LBG, πηγαίνουμε στο κεντρικό μενού, επιλέγουμε Scene->Store->F1 και έπειτα κάνουμε ζουμ προς κάποιο επιθυμητό σημείο.

Αφού φτάσουμε τη μεγέθυνση έως εκεί που θέλουμε, επιλέγουμε πάλι από το ίδιο μενού Scene-Store->F2 κοκ για διαδοχικές σκηνές μεγέθυνσης/ απομεγέθυνσης. Έπειτα, για να δούμε το αποτέλεσμα κάνουμε Movie->Program->Scene Loop->Nutate->4 seconds και δίνουμε την εντολή mplay. Είναι εξαιρετικό!

Προσοχή βέβαια χρειάζεται για την εξαγωγή του βίντεο, καθώς απαιτείται ο κατάλληλος MPEG encoder. Θα μπορούσαμε να δούμε και άλλες λεπτομέρειες σχετικά με την παραγωγή βίντεο στο PyMol, αλλά πιστεύω πως το άρθρο θα γινόταν έτσι λίγο κουραστικό. Για περισσότερα παραδείγματα και tutorials μπορεί κανείς να «παρακολουθήσει» το MovieSchool της κοινότητας του PyMOL στη διεύθυνση [1].

### Visualisation αποτελεσμάτων

Κράτησα το πιο εντυπωσιακό κομμάτι για το τέλος. Αυτό δεν είναι άλλο από τον τρόπο με τον οποίο μπορούμε να εικο-



#### 5 Το μόριο του παραδείγματος για την εικονικοποίηση αρχείων .xyz

νικοποιήσουμε αποτελέσματα Υπολογιστικής Χημείας. Η Υπολογιστική Χημεία βέβαια θα μπορούσε να αφορά σε ένα ακόμα ενδιαφέρον τετρασέλιδο (ή και οκτασέλιδο) άρθρο από μόνη της. Θα αρκεστώ όμως στο να αναφέρω απλώς ότι είναι το εργαλείο εκείνο με το οποίο μπορούμε να δώσουμε μορφή στα πειραματικά αποτελέσματα του εργαστηρίου.

Μέσω ειδικού software, που αναλαμβάνει για λογαριασμό μας κβαντοχημικούς υπολογισμούς, μπορούμε να υπολογίσουμε τις ακριβείς καρτεσιανές συντεταγμένες των ατόμων σε ένα μόριο. Το αποτέλεσμα είναι ένα αρχείο του τύπου .xyz στο οποίο μπορούμε να «δώσουμε ζωή» μέσω του PyMol.

Για το λόγο αυτό θα χρειαστεί να έχουμε κάποια συμπληρωματικά προγράμματα όπως το orpenbabel ή/και το Avogadro.

Ένα αρχείο παραδείγματος μπορούμε να βρούμε στο PyMOLWiki [2], το οποίο το μεταφορτώνουμε στον υπολογιστή μας και το αποσυμπιέζουμε. Έπειτα μετατρέπουμε το αρχείο .xyz σε αναγνώσιμο από το PyMol .pdb με την εντολή:

```
babel file.xyz file.pdb
```

σε οποιοδήποτε terminal ή εναλλακτικά το ανοίγουμε με το πρόγραμμα Avogadro και το αποθηκεύουμε εκ νέου ως .pdb. Το επόμενο βήμα είναι να κατεβάσουμε το script που θα μας επιτρέψει να ανοίξουμε το αρχείο .xyz που μετατράπηκε σε .pdb [3]. Όταν γίνει και αυτό ανοίγουμε το script με ένα απλό κειμενογράφο και δίνουμε το σωστό Path\_To\_The\_PDB οδηγώντας το σενάριο εντολών στο αρχείο .pdb.

Τέλος, στη κονσόλα του παραθύρου προβολής του PyMOL δίνουμε την εντολή:

```
@PATH_Of_The_Script/script.pml
```

όπου PATH\_Of\_The\_Script είναι η τοποθεσία στην οποία βρίσκεται το script που κατεβάσαμε. Το αποτέλεσμα μπορούμε να το δούμε στην **εικόνα 5!**

### Σύνδεσμοι

- [1] Το MovieSchool του PyMOL: <http://goo.gl/d8Y1D>
- [2] Έτοιμα πακέτα του PyMOL για Windows: <http://goo.gl/5PQY2>
- [3] Αναλυτικές οδηγίες και παραδείγματα: <http://www.pymolwiki.org>
- [4] Υποστήριξη για το PyMOL: <http://www.pymol.org/support>
- [5] Οι τελευταίες εκδόσεις <http://pymol.org/taxonomy/term/3/feed>