

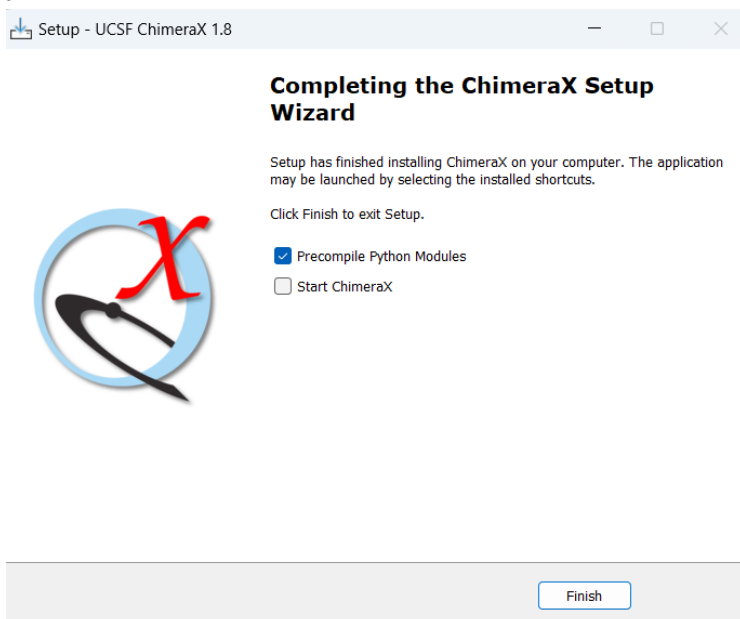


ChimeraX - en kort vejledning

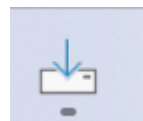
Installation

Download ChimeraX ved enten at google 'Download ChimeraX' eller via hjemmesiden <https://www.cgl.ucsf.edu/chimerax/download.html>, og klik på installationsfilen for det relevante styresystem. Vælg den stabile udgave. Man kan downloade en rc-version, som står for en Release Candidate, som er et forsøg på at lave den næste version af programmet. Man kan også downloade en daily-version som er den nyeste udgave. Både Release Candidate og Daily-version er ikke-testede udgaver og derfor ikke stabile udgaver. Klik på den stabile version der er kendetegnet ved at have et versionsnummer. Acceptér vilkårene ved nederst på siden med vilkår at klikke på **Accept**. Efter kort tid begynder download af installationsfilen. Find installationsfilen i mappen Overførsler og dobbeltklik på den. Gennemløb installationen og lad programmet ordne Python modulerne. Se figur 1a og figur 1b, hvor man ved flueben i **Precompile Python Modules** gør programmet parat til at fungere. Så længe ikonet vist som figur 1b er vist i programlinjen nederst, kan man ikke starte programmet.

a.



b.

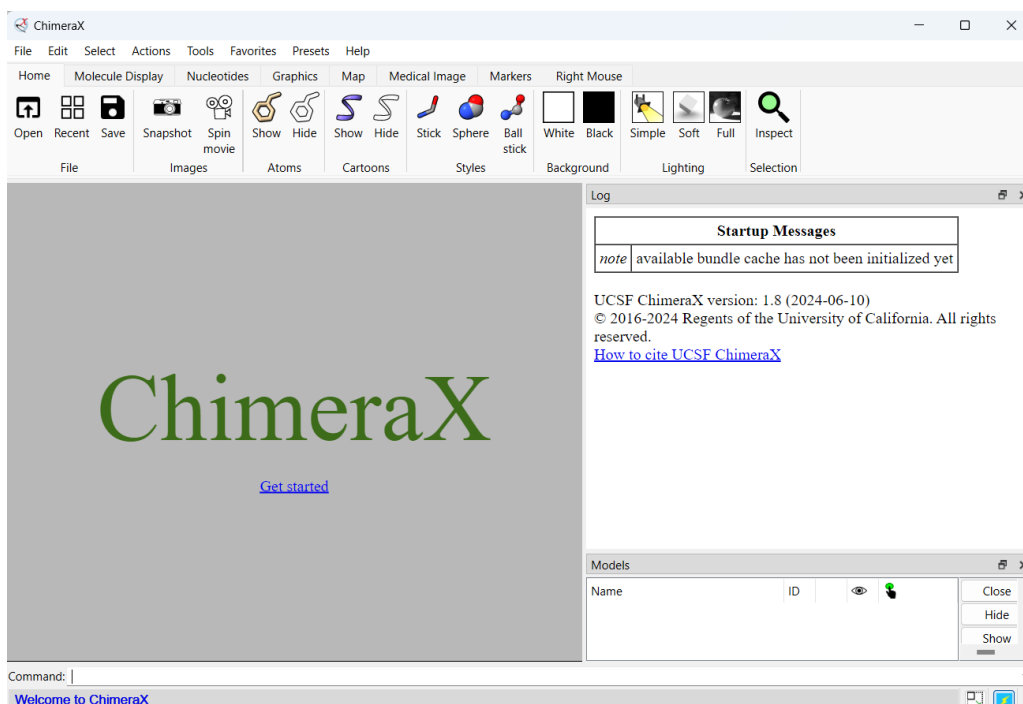


Figur 1.

- a. Ved afslutningen af installationen vises en dialogboks der starter kompileringen af Python.
b. Så længe ikonet findes i programlinjen kompileres Python.

Programvejledning

ChimeraX er et program der kan arbejde med strukturfiler. Man kan få strukturfiler vist, og man kan rotere og zoome i strukturfilerne. Derudover kan man manipulere med strukturfilerne, så man kan fremhæve eller skjule forskellige forhold vedrørende strukturerne, for at understrege en pointe.



Figur 2. Startskærmen på ChimeraX

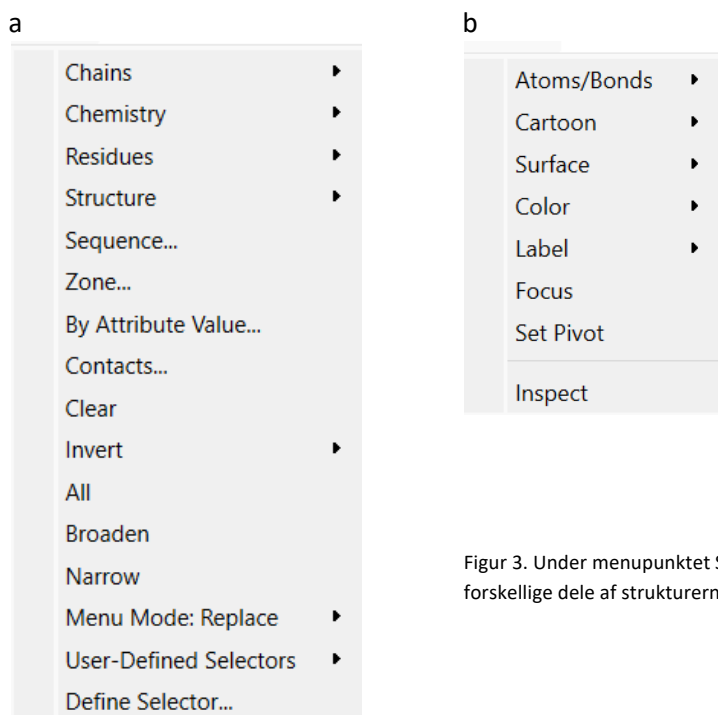
Når ChimeraX starter er der en blank skærm, hvor der øverst er en menulinje med forskellige valgmuligheder. Under menulinjen er der et arbejdsbånd med forskellige overskrifter. På figur 2 vises det bånd der hører til overskriften **Home**, men der er forskellige bånd til hver overskrift. Under båndet er der to felter. Det til venstre viser den struktur, man har indlæst, og det til højre viser egenskaber ved strukturfilen forklaret i tekst.

Nederst er der en kommandolinje der består af et åbent tekstfelt ud for teksten **Command**. Man skriver en bestemt kommando og afslutter med at trykke på **Enter**. Først når man trykker på **Enter** forstår programmet kommandoen. En meget anvendelig kommando er **Open**. Man kan ved at skrive en kendt strukturfil's pdb-nummer automatisk hente filen ned til programmet. Fx henter kommandoen **Open 1bna** strukturfilen 1BNA ind i programmet. Alle kommandoerne kan ses på <https://www.cgl.ucsf.edu/chimerax/docs/user/index.html#commands>.

Programmet viser ofte aminosyrekæderne som bånd, der enten er med snoninger når der er α -helix og pile når der er β -foldeblade. Når der hverken er α -helix eller β -foldeblade vises aminosyrerne som en tynd snor. Ligander vises altid som sticks uanset om det drejer sig om et molekyle, som er bundet til en receptor eller glykosileringer af proteinet. Man kan tilføje en overfladestruktur ved at vælge **Molecule Display** → **Surface** → **Show**. Ioner fx Zn^{2+} og Cl^- vises som kugler i forskellige farver.

Overordnet visualisering

Når man skal manipulere strukturfilen for at få vist noget bestemt, anvender man ofte først funktionen **Select** i menulinjen, hvor man vælger den del af molekylet, man vil arbejde med. Mulighederne for at vælge dele af molekylet er mange og ses på figur 3a. Herefter vælges **Action**, og så kan man manipulere med enten atomer, bånd (Cartoon), overflade mm. som vist i figur 3b.



Figur 3. Under menupunktet Select kan man vælge forskellige dele af strukturerne at arbejde med.

Ønsker man fx at farve en bestemt kæde, vælges kæden under **Select → Chains → Den aktuelle kæde**. Herefter vælges **Action → Color → Den ønskede farve**.

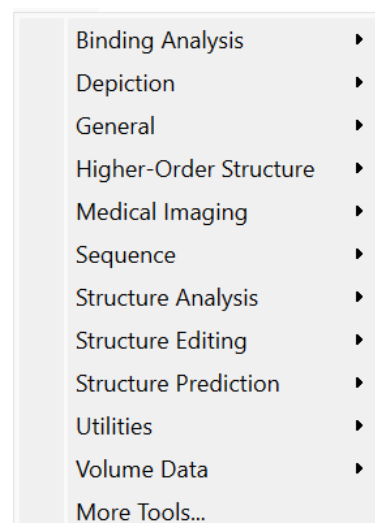
Ønsker man at se proteinets molekylestruktur i stedet for bånd (Cartoon) vælges **Select → All** og herefter **Action → Atoms/Bonds → Backbone Only**. For også at se sidekæderne på aminosyrerne vælges **Action → Atoms/Bonds → Show Sidechain/Base**.

Værktøjer

Under menupunktet **Tools** er der mange muligheder for at arbejde med andre værktøjer end visualisering, som vist i figur 4.

Der er rigtig mange forskellige muligheder for at arbejde med strukturfilen. I bogen **Bioinformatik i praksis** er der fokuseret på brug af **Machmaker** under menupunktet **Structure Analysis**. Det er muligt at redigere i strukturfilen under menupunktet. Under **Structure Analysis** er det ligeledes muligt at få vist hydrogenbindinger og man kan se afstande og vinkler mellem atomer i molekylet.

Derudover kan man blaste sekvensen under menupunktet **Sequence**. Selve det at kontakte BLAST-serveren foregår i et vindue i højre side af programmet. Det er også muligt at redigere i strukturen under **Structure Editing**. Alle visualiseringsmuligheder, værktøjer og kommandoer er beskrevet i programmets manual der findes på <https://www.cgl.ucsf.edu/chimerax/docs/user/index.html>.



Figur 4. Forskellige værktøjer der kan bruges til at undersøge proteinstrukturen.