

Chimera

Краткий tutorial

Подготовила:
студентка 4 курса
Беляева Юлия

Основная информация о Chimera

Chimera - программа для интерактивной визуализации трехмерных молекулярных структур и данных, связанных с их анализом, таких, например, как карты электронной плотности, траектории молекулярной динамики и выравнивания последовательностей. Chimera позволяет генерировать высококачественные изображения, несет в себе несколько готовых пресетов для оформления изображений в статьи, наглядные анимации

Операционная система	Ссылка на установочный файл	Дата релиза
Microsoft Windows 64-bit	chimera-1.15-win64.exe	18 декабря 2020
Mac OS X 64-bit	chimera-1.15-mac64.dmg	18 декабря 2020
Linux 64-bit	chimera-1.15-linux_x86_64.bin	18 декабря 2020

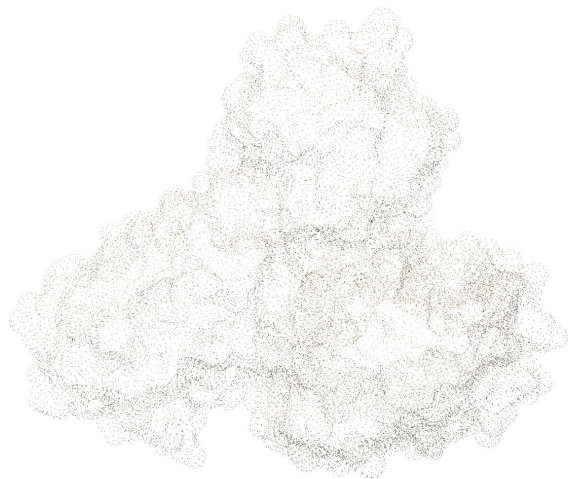


Ссылка на tutorial:

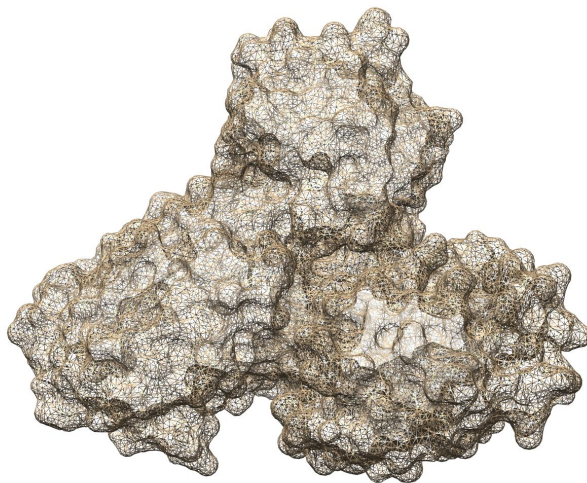
https://docs.google.com/document/d/1LGTX7loshXqll5qc6uPXptb3L_Q4DANdHbnR2ErbDzq/edit?usp=sharing

Отображение молекулярной поверхности

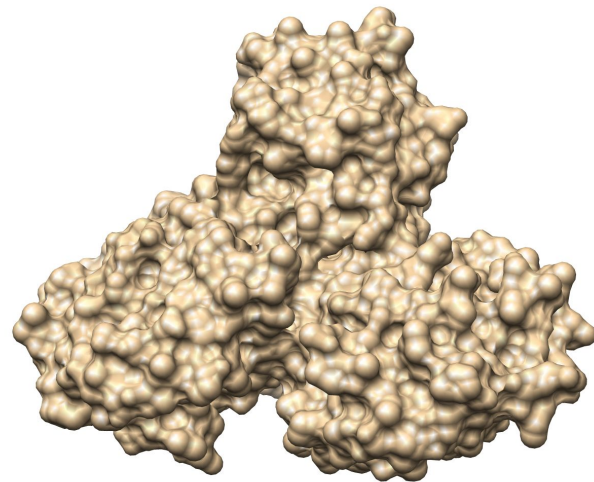
> ~display; ~ribbon
> surface; surfrepr <type>



dot



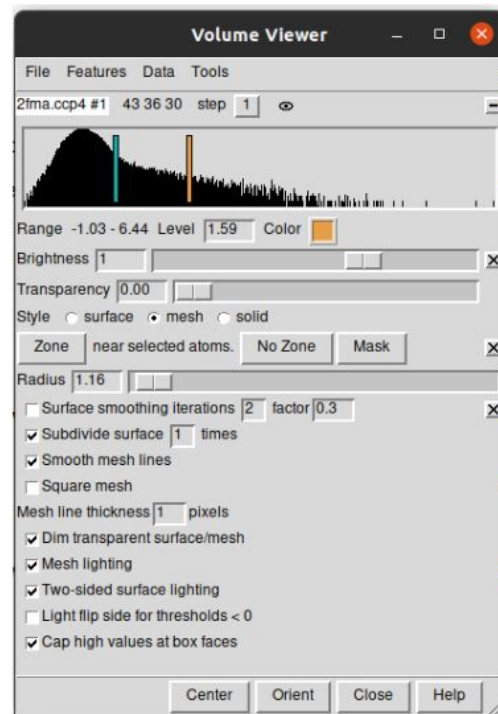
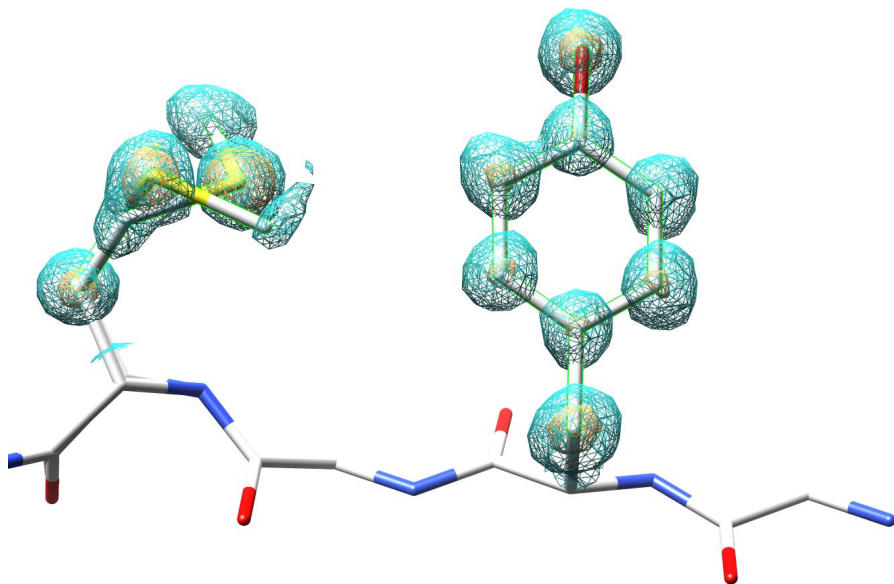
mesh



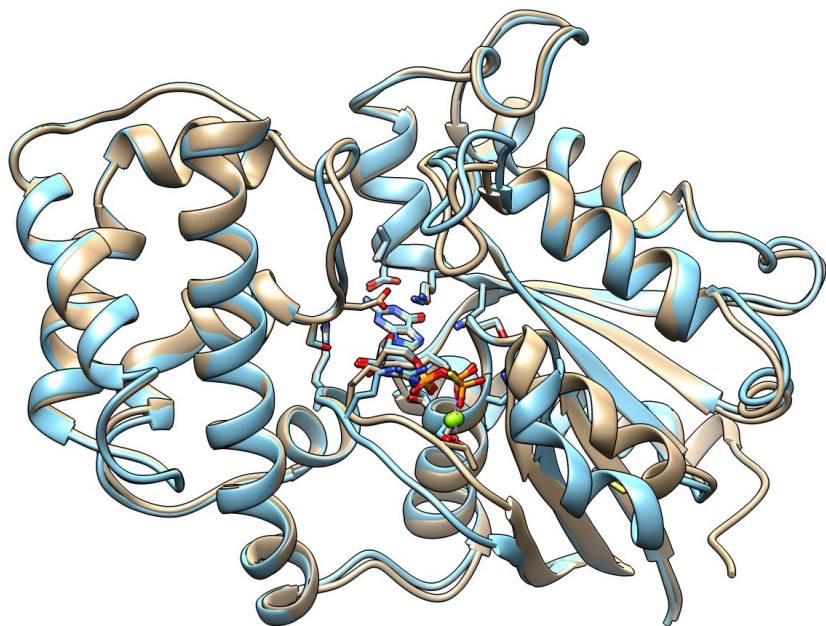
solid/filled

Отображение электронной плотности

- > open 2fma
- > modelcol white
 - Красим атомы углерода модели в "white"
- > preset apply int 2
 - Представляем аминокислоты белка в виде палочек, кристаллическую воду - в виде точек, а гетероатомы - в виде сфер
- > open edsID:2fma
 - Подгружаем электронную плотность

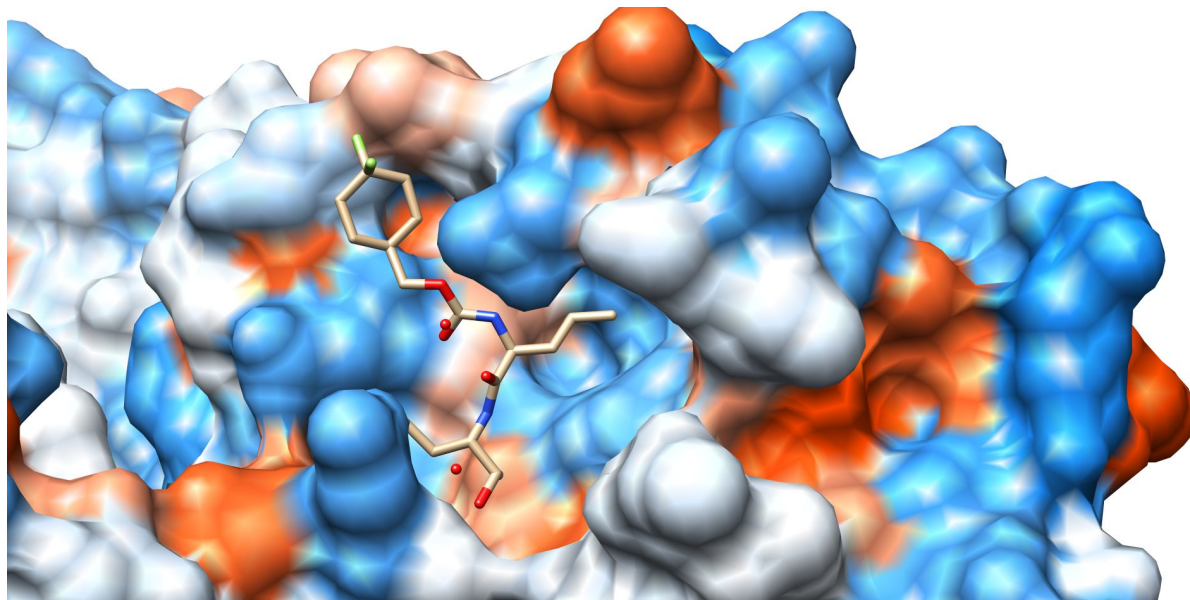


Сопоставление структур



Молекулярная поверхность с окраской по гидрофобности аминокислот

Голубым показаны наиболее полярные заряженные остатки, **оранжевым** - наиболее гидрофобные, **белым** - нейтральные остатки. Presets → Interactive 3 (hydrophobicity surface)

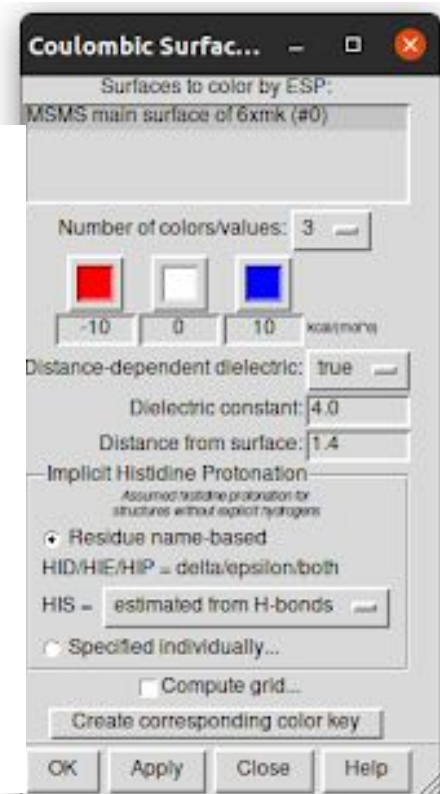
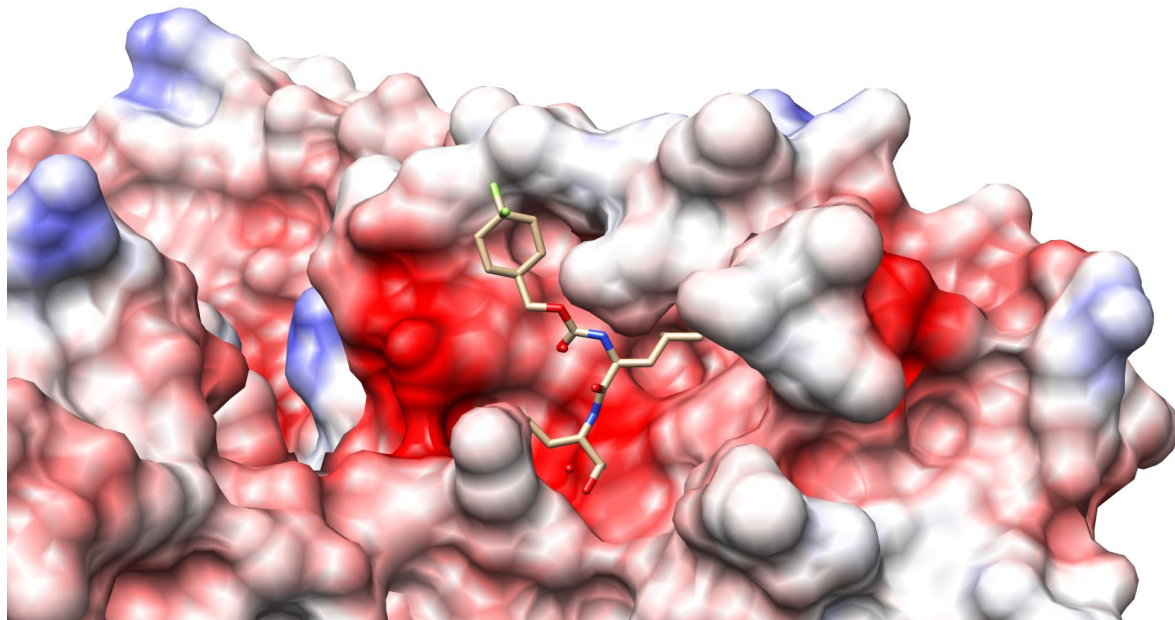


Когда может быть полезна такая окраска:

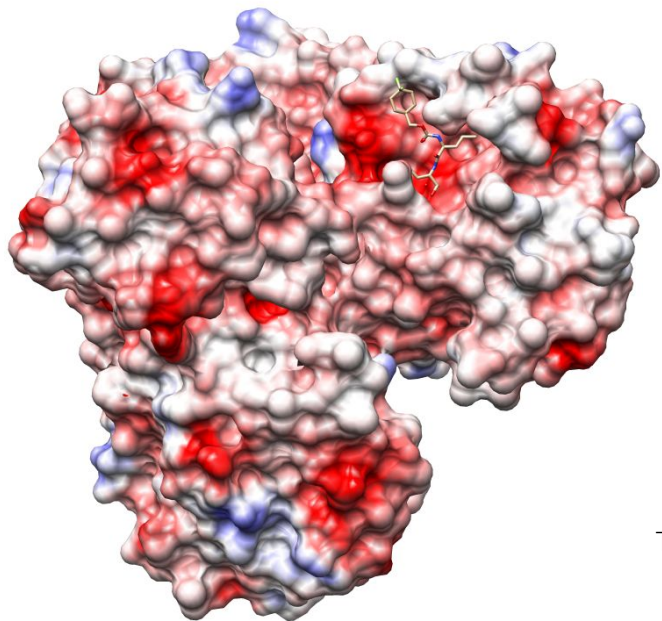
- при изучении белкового фолдинга
- при поиске сайтов связывания лигандов
- при поиске сайтов молекулярного распознавания (более широкий случай)
- просто для визуализации мыслей

Молекулярная поверхность с окраской по электростатическому потенциалу

Tools → Surface/Binding Analysis → Colombic Surface Coloring



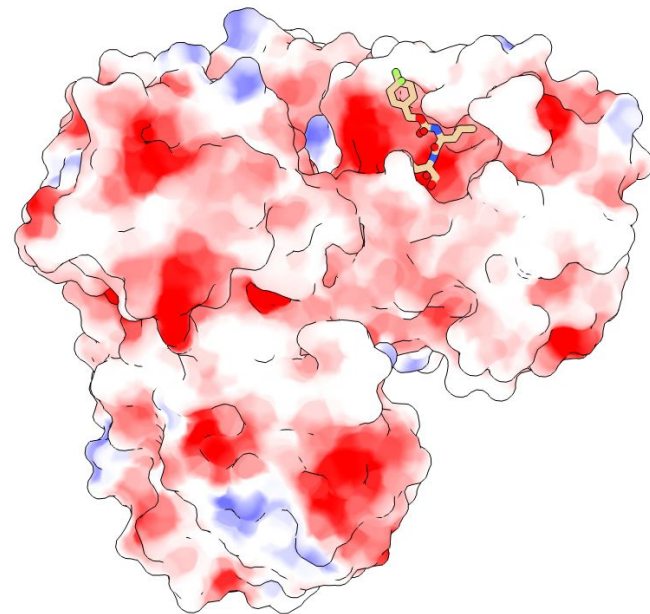
Как мы можем улучшить нашу картинку?



> setattr m stickScale 2

Presets → Publication 1

Tools → Viewing Controls → Lighting
→ Lighting → mode: → ambient



Окраска по B-фактору

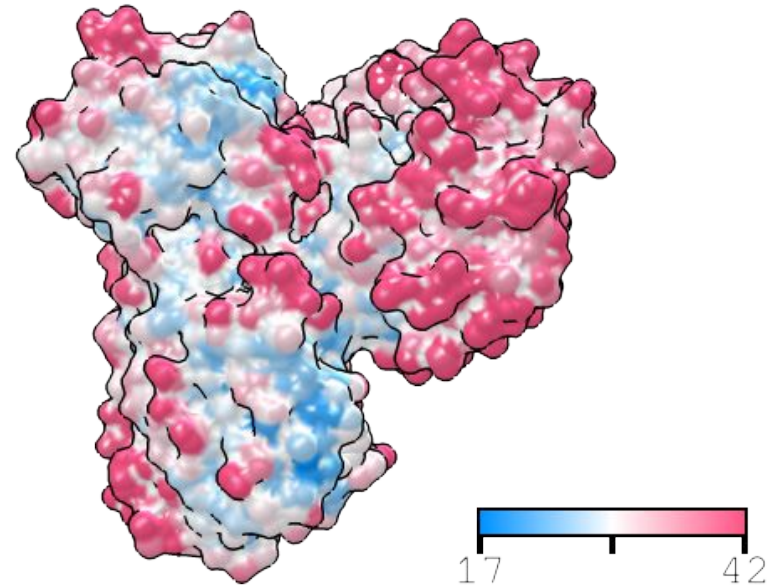
```
> open 2xmk  
> ~display; ribbon  
> preset apply int 2  
> delete solvent  
> window size 573 443
```

```
> range color bfactor key 17 #00009249ffff 42 #ffff55558618 29 white  
> surf
```

Оформление подписей, легенды вручную:

Tools → Utilities → Color Key (прописываем значения цветов для легенды, не забываем в поле Color range depiction установить значение “blended”, чтобы цвета в линейке переходили друг в друга по градиенту, а не были дискретными) → с помощью ЛКМ “растягиваем” нашу цветовую панель (я разместила ее в правом нижнем углу) → Labels (настраиваем атрибуты текста, можно, как в презентации, создать несколько элементов текста и поместить их на картинку). Интерфейс интуитивно понятный

Значения B-фактора (2XMK)



Окраска структуры по консервативности последовательности

Совсем недавно в Твиттере было сообщено о появлении нового tutorиала, который позволит пользователям Chimera наглядно ознакомиться со способом окраски структуры по степени консервативности ее последовательности

Ссылка на tutorиал:

<https://www.rbvi.ucsf.edu/chimerax/data/conservation-coloring/conservation-coloring.html#gpcr>

