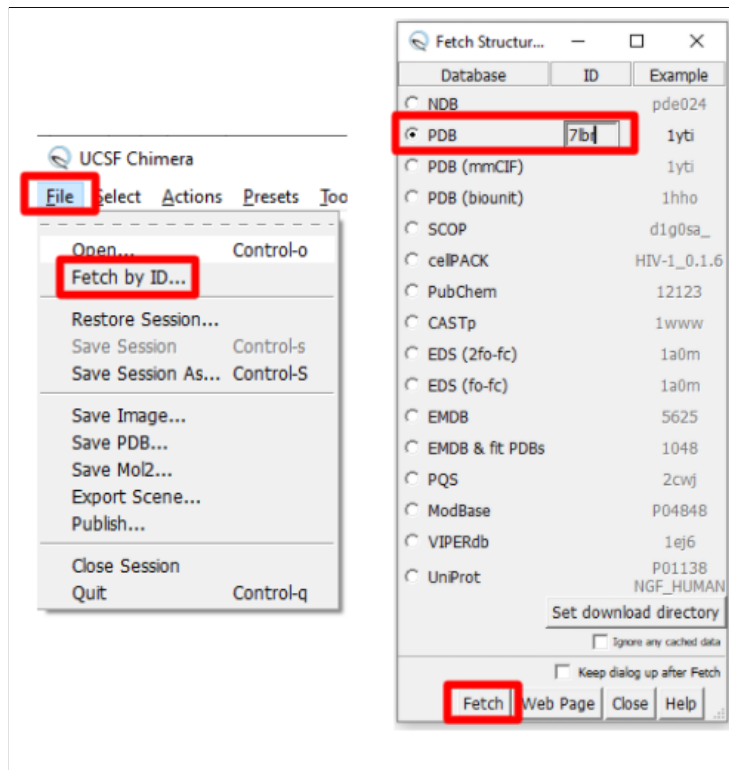


Vamos abrir a nossa proteína. Iremos trabalhar com a MLpro do Sars-CoV2, com o PDB ID de 7LBR (<https://www.rcsb.org/structure/7lbr>).

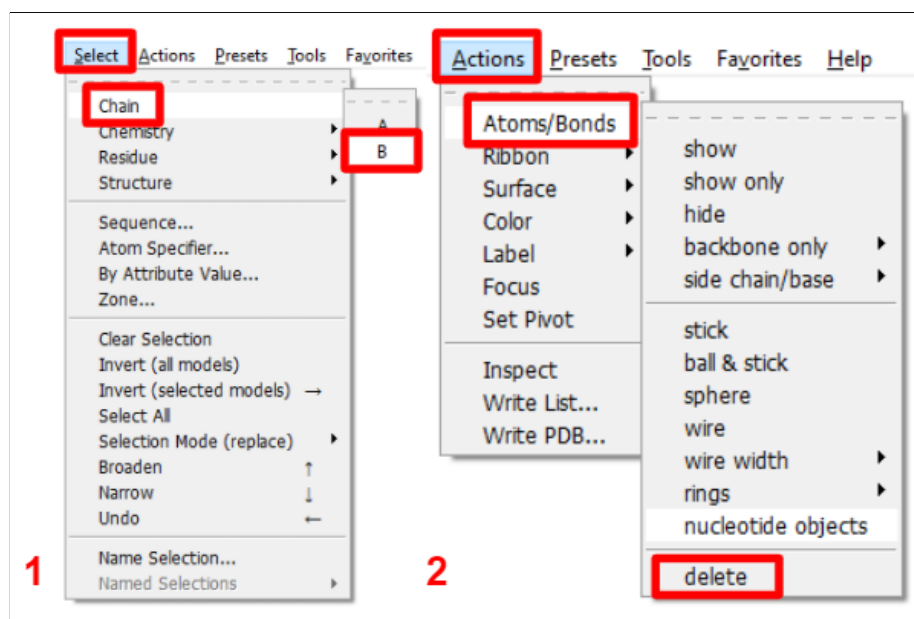
1. File -> Fetch by ID...

Quando aparecer a nova janela, no campo PDB digite **7lbr** e clique em **Fetch**. Neste modelo percebemos que ele possui uma cópia de sua estrutura terciária, diferente do modelo anterior. Este modelo do PDB não se trata de um dímero, e sim de um artefato da técnica que foi utilizada para poder elucidar a estrutura tridimensional. Para facilitar o trabalho, vamos deletar uma de suas cadeias.



2. Select -> Chain -> B.

3. Actions -> Atoms/Bonds -> delete.



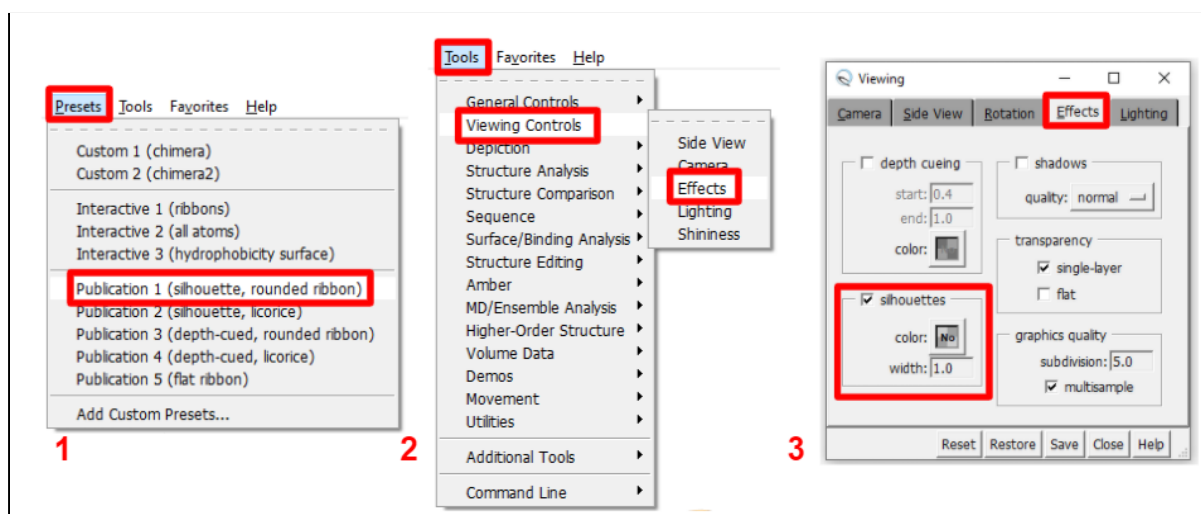
Agora temos somente uma cadeia e um modelo muito mais leve para podermos conhecer melhor o programa Chimera. Vamos novamente utilizar os *presets* disponíveis.

4. Presets -> Publication 1.

Voltamos para o fundo branco e com a silhueta. Mas desta vez vamos editar este efeito.

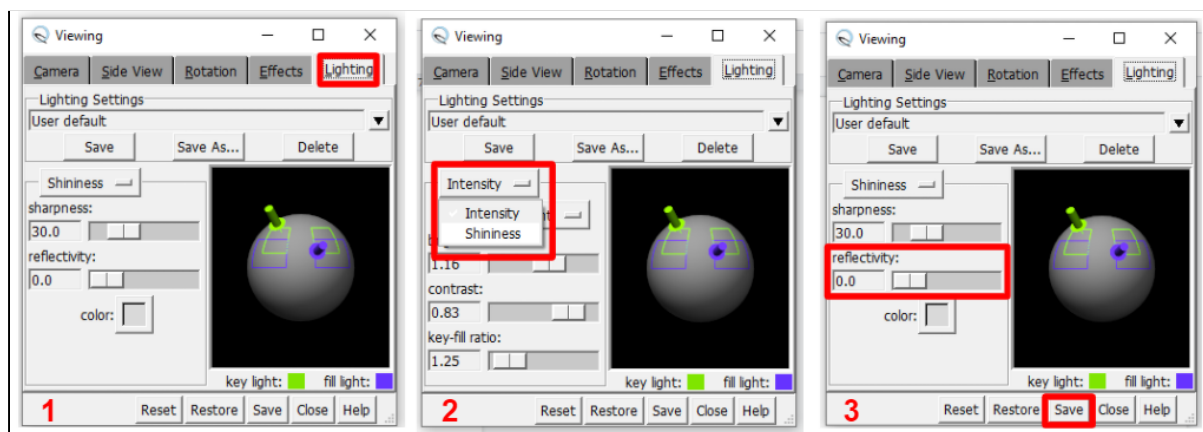
5. Tools -> Viewing Controls -> Effects.

Uma janela chamada **Viewing** irá abrir. Nela podemos editar o efeito de profundidade (*depth cueing*), de silhueta (*silhouettes*), de sombras (*shadows*), de transparência (*transparency*) e alterar a qualidade gráfica (*graphics quality*) clicando na área de *multisample*. Para alterar a espessura da silhueta, basta somente alterarmos o valor que está dentro do campo *width*. Vamos melhorar ainda mais a visualização do modelo alterando algumas opções de iluminação.



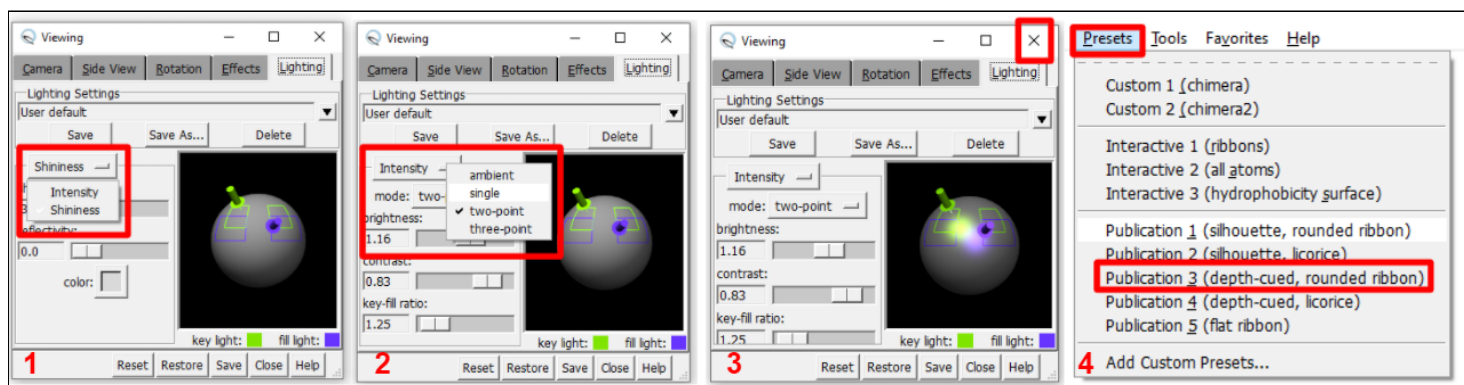
6. Dentro da janela de **Viewing**, clicamos em **Lighting** e depois em **Intensity** para selecionarmos **Shininess**.

7. Agora arraste a barra de **reflectivity** para o valor de **0** e clicamos em **save**.



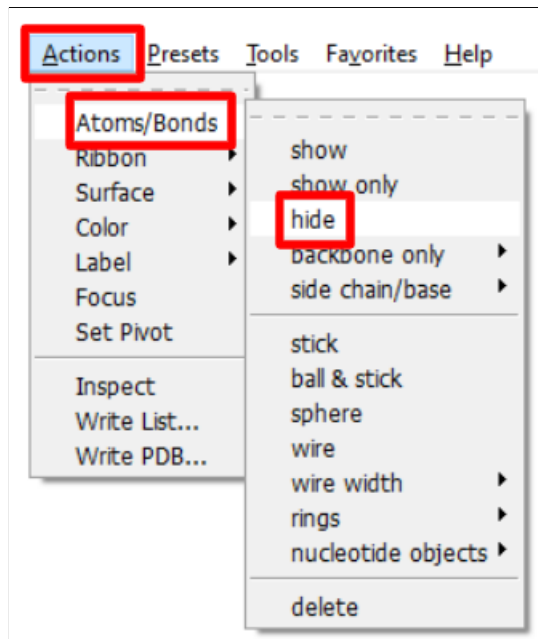
Agora, vamos alterar o *preset* para o **Publication 3**.

8. **Presets -> Publication 3**.



Para começarmos a estudar este modelo, vamos limpar a nossa visualização escondendo todos os átomos e ligações que estão na tela, deixando somente a representação de **Ribbons**.

9. **Actions -> Atoms/Bonds -> Hide**



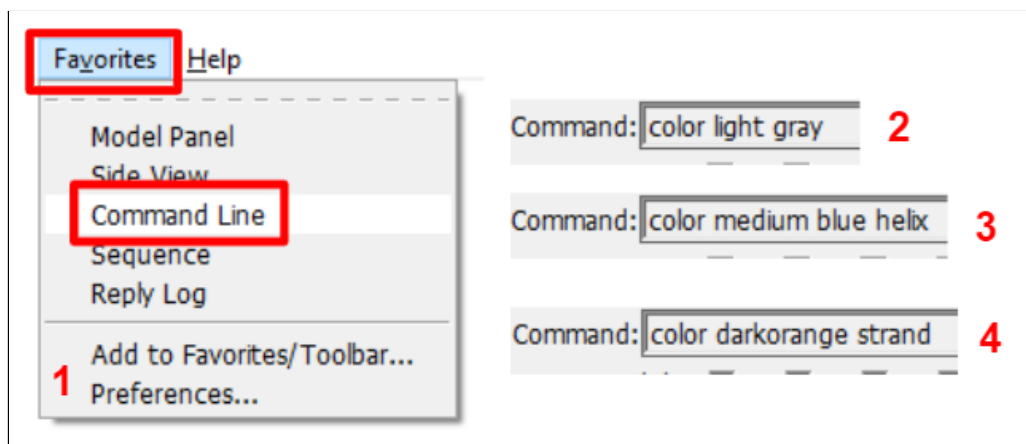
Como não temos nada selecionado, o programa irá aplicar a nossa ação para todo o modelo. Novamente, iremos aplicar cores para cada estrutura secundária do modelo por linha de comando.

10. **Favorites -> Command line.**

11. **color light gray**

12. **color medium blue helix**

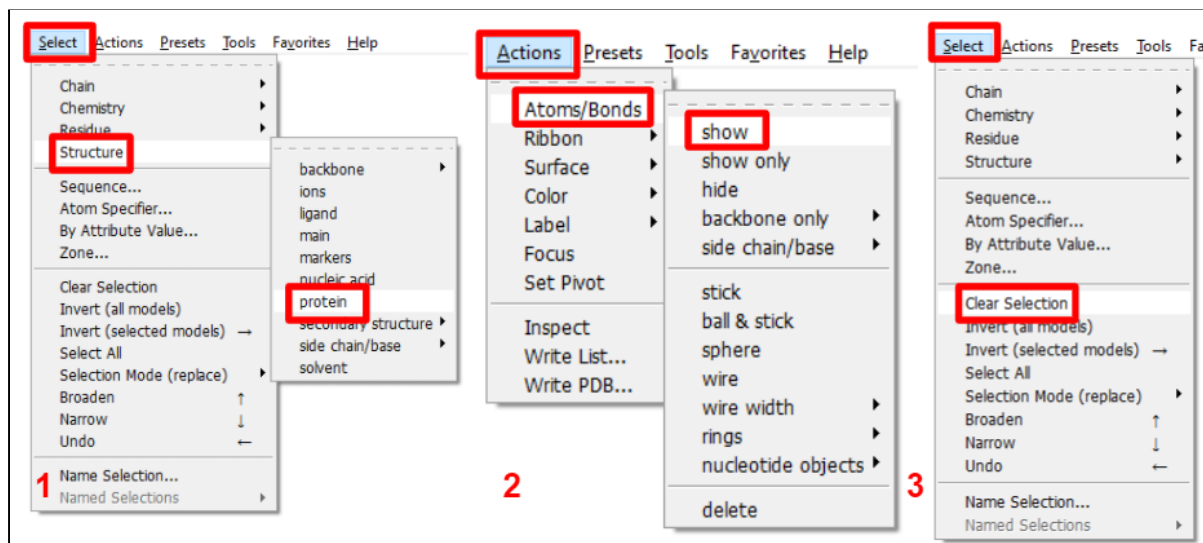
13. **color darkorange strand**



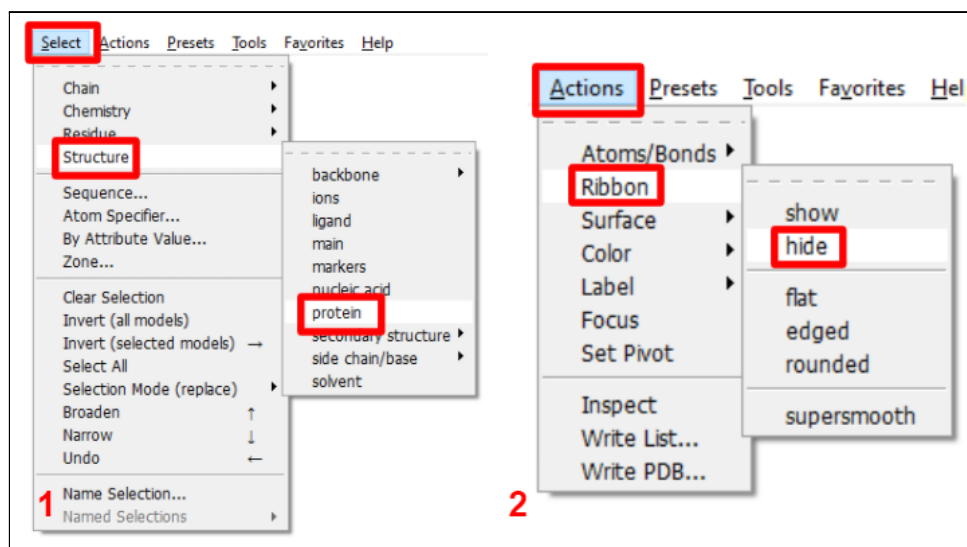
Lembre sempre de apertar a tecla enter após digitar os comandos. Vamos conhecer melhor este modelo alterando os diferentes modos de visualização desta proteína.

14. Para começar, vamos selecionar somente os resíduos da proteína em **Select -> Structure -> Protein**. Logo em seguida, vamos em **Actions -> Atoms/Bonds ->**

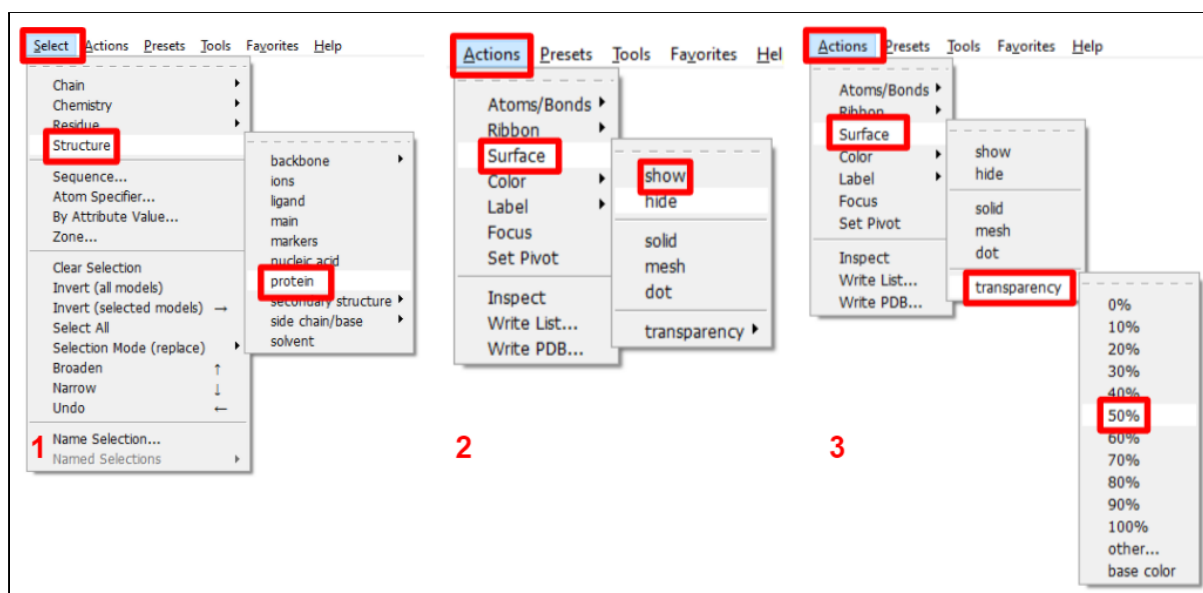
Show. Limpamos a seleção em **Select -> Clear Selection**. Neste modo, conseguimos visualizar todas as cadeias laterais dos resíduos que compõem esta proteína.



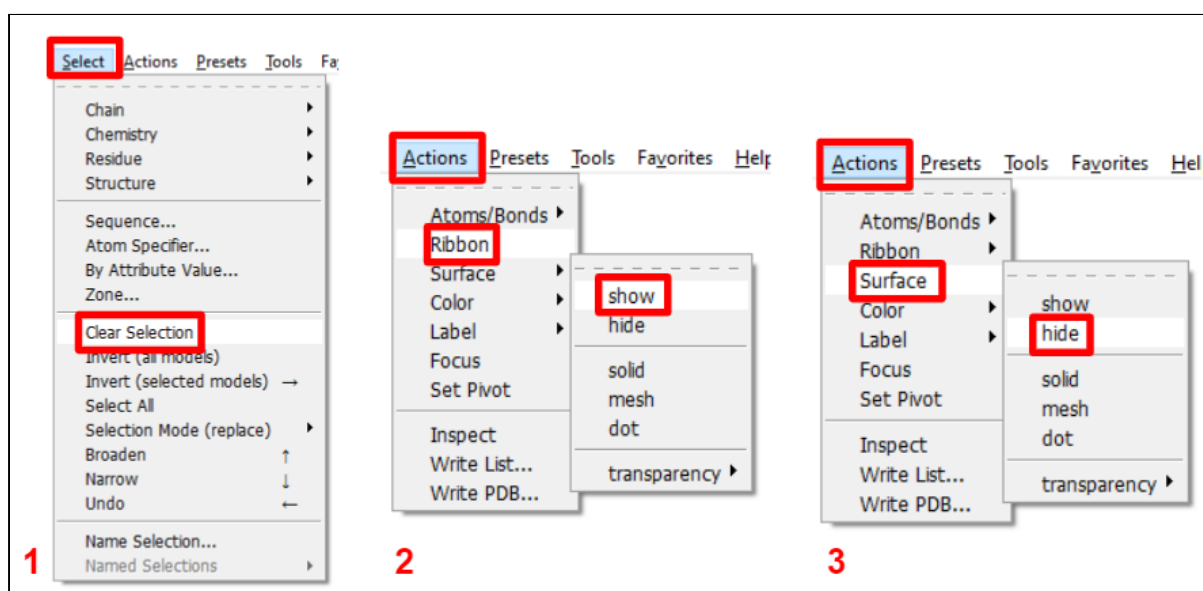
15. Seleccionamos novamente a proteína em **Select -> Structure -> Protein**, em seguida vá em **Actions -> Ribbon -> Hide**. Acabamos de sumir com a representação gráfica de estruturas, perceba que não fica tão legal de visualizar o modelo.



16. Novamente com a proteína selecionada em **Select -> Structure -> Protein**, vamos agora em **Actions -> Surface -> Show**. Esta é uma visualização um pouco mais "real" do que representaria a proteína em seu ambiente biológico. Estas superfícies estão representando as nuvens eletrônicas de cada átomo. Para ficar ainda mais legal, podemos ir em **Actions -> Surface -> Transparency -> 50%**. Depois de tudo, limpamos a seleção **Select -> Clear Selection** e vamos em **Actions -> Surface -> Hide**.



17. Ative novamente a visualização de **Ribbon** em **Actions -> Ribbon -> Show**.

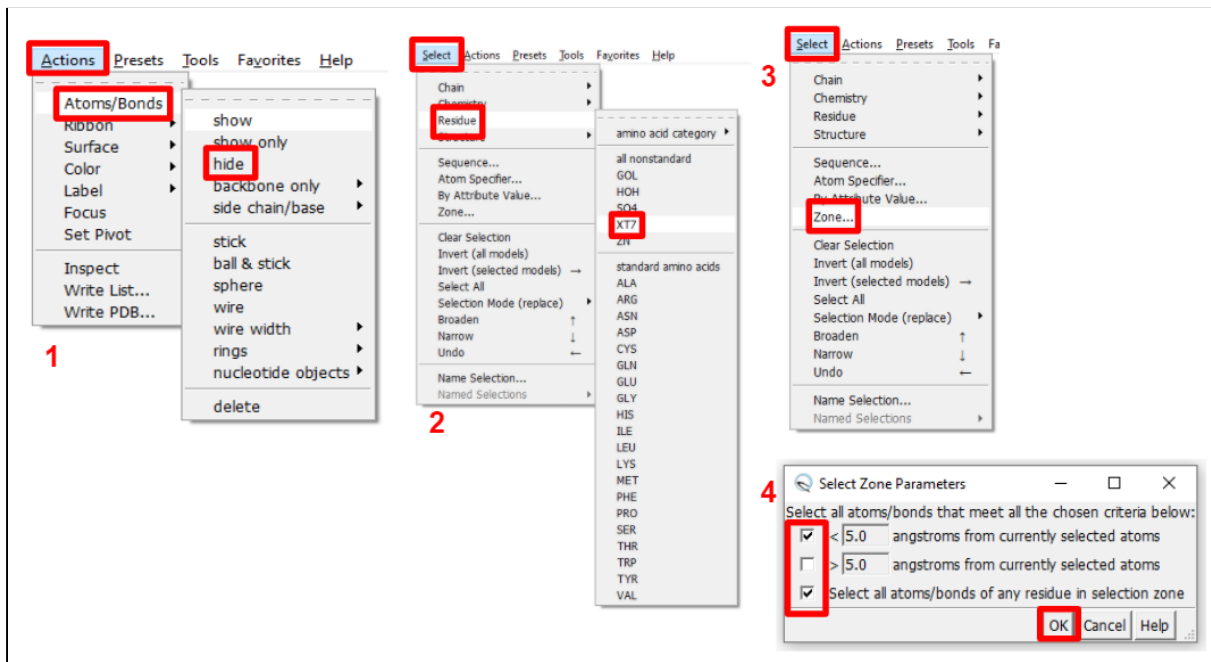


Agora podemos trabalhar com o nosso ligante, o XT7. Para isso, iremos selecioná-lo, selecionar todos os resíduos em volta dele, colorir de acordo com cada átomo presente, focá-lo e visualizar o seu sítio ativo.

18. **Actions -> Atoms/Bonds -> Hide**. Para deixar o nosso modelo limpo.

19. **Select -> Residue -> XT7**.

20. **Select -> Zone**. Uma janela de **Select Zone Parameters** irá abrir e deixaremos selecionado a **primeira e a terceira caixinha**. Logo em seguida clicamos em **OK** e iremos perceber que o programa irá selecionar tudo que está em volta do ligante em um raio de 5 angstroms.

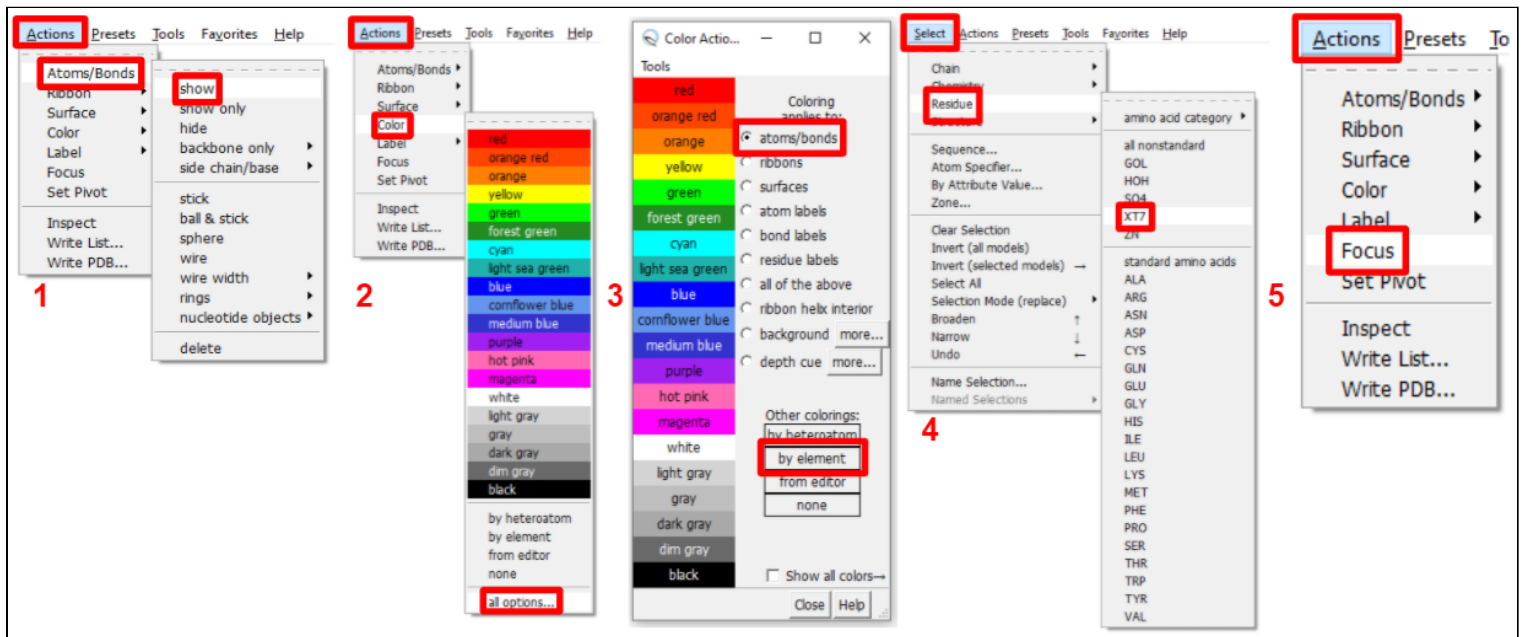


21. **Actions -> Atoms/Bonds -> Show.**

22. Na linha de comando vamos digitar: **Color byelement**

23. Ainda na linha de comando: **select :XT7**

24. **focus sel**



Com o ligante focalizado, é possível perceber que o efeito de profundidade (depth cueing) foi alterado. Vamos melhorá-lo alterando o seus parâmetros.

Vamos agora medir uma distância entre dois átomos, só que por linha de comando.

25. **select :269.A**

26. **display sel**

27. **~ribbon sel**

28. **distance :269.A@N:XT7.A@O17**

Complicado à primeira vista, mas é bem simples: No passo 58, para selecionarmos algum átomo ou resíduo do modelo, utilizamos o comando **select** e logo em seguida indicamos que o que queremos é um resíduo (pelo sinal :), o seu número correspondente e a sua cadeia (**.A**). No passo 59, iremos mostrar todos os átomos que selecionamos com o comando **display** e indicando na frente que é do que está selecionado (**sel**). Caso queiramos esconder os átomos, indicamos o comando **display** com um sinal de ~ no início, tal como no passo 60. O comando **~ribbon sel** está simplesmente escondendo as estruturas de *ribbon* do que está selecionado. No passo 61, o comando é um pouco mais extenso mas também não é tão complicado. Iniciamos com o comando **distance** para poder criar a distância, logo em seguida temos que selecionar os átomos que desejamos. Nesta parte do comando, indicamos os resíduos com o sinal de : (:269 e :XT7) seguido da indicação da cadeia (.A) e por fim os átomos que desejamos com sinal de @ (@N, @O17). Percebe o comando para seleção dos átomos no passo 61 estão concatenados, sem separação para indicar que são 2 átomos.