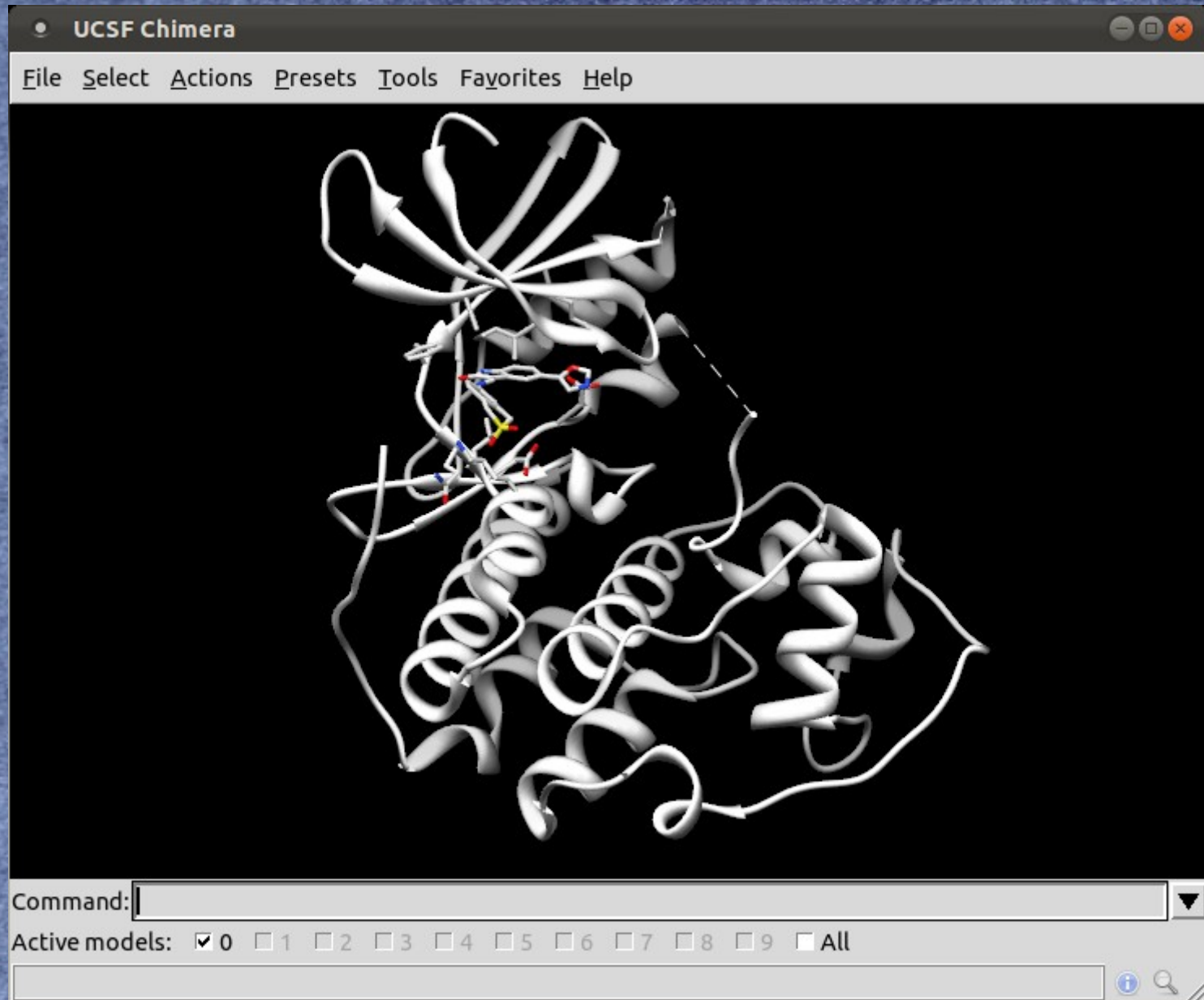


# Program CHIMERA

<http://www.cgl.ucsf.edu/chimera/>

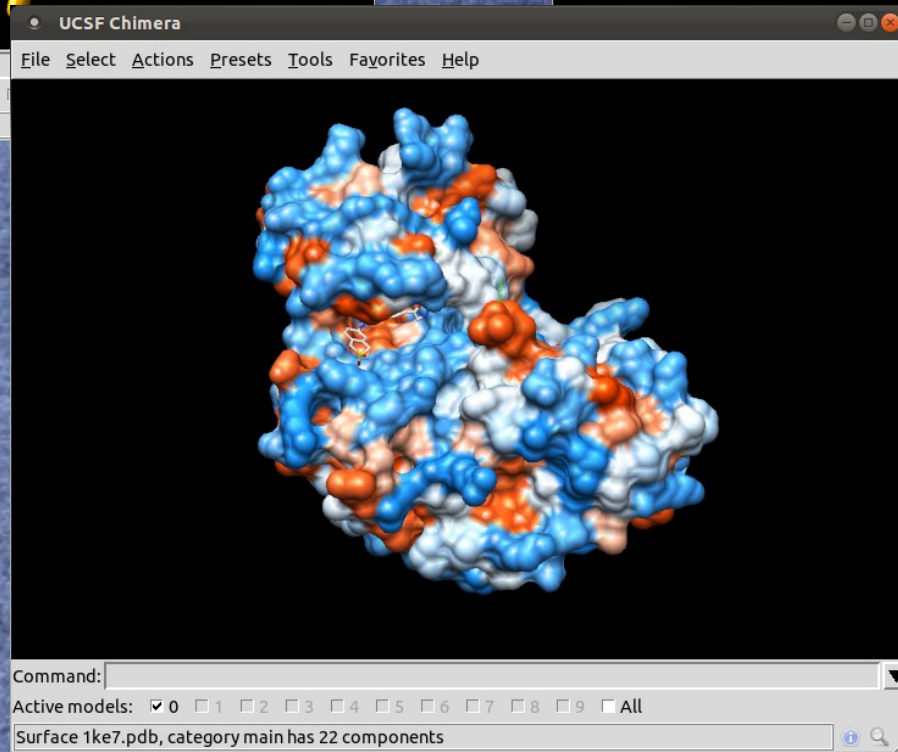
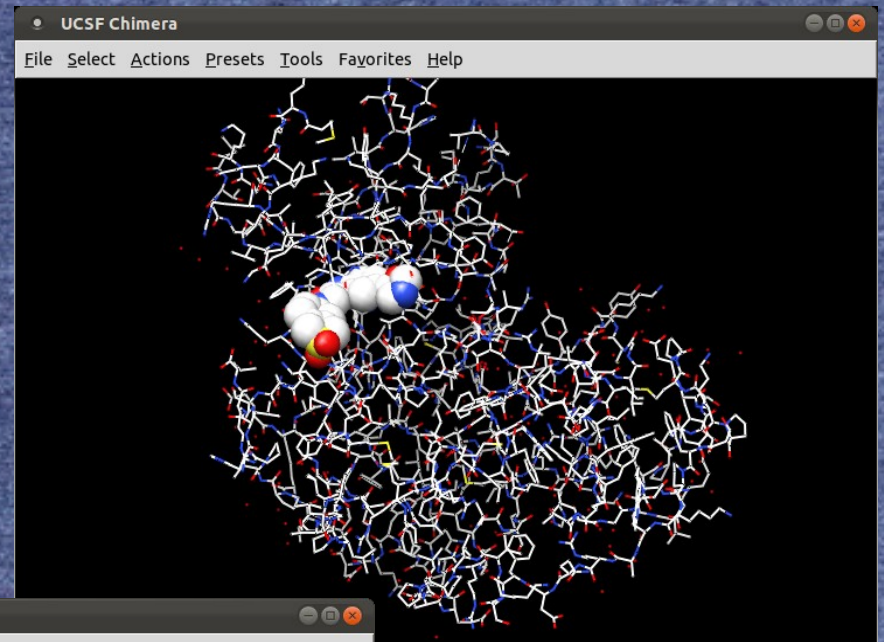


# Chimera



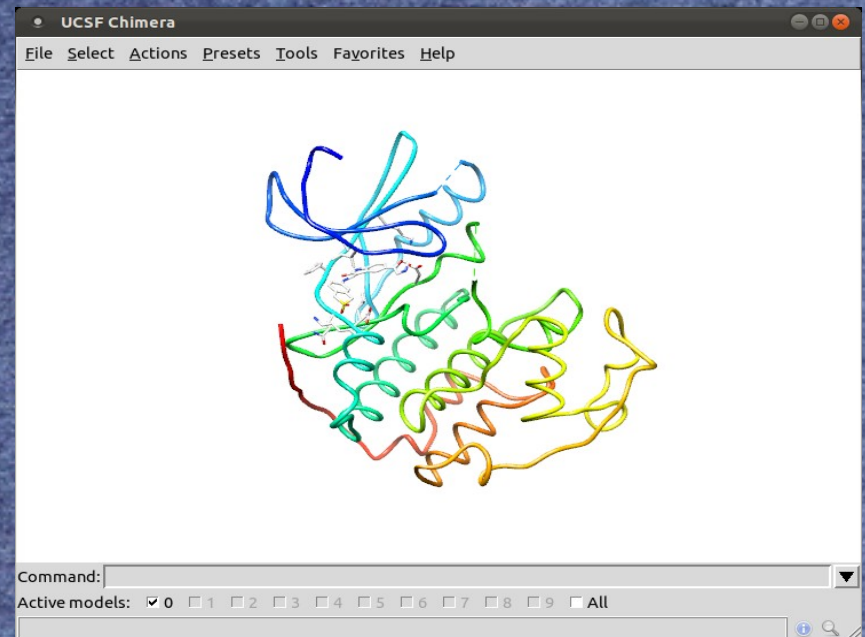
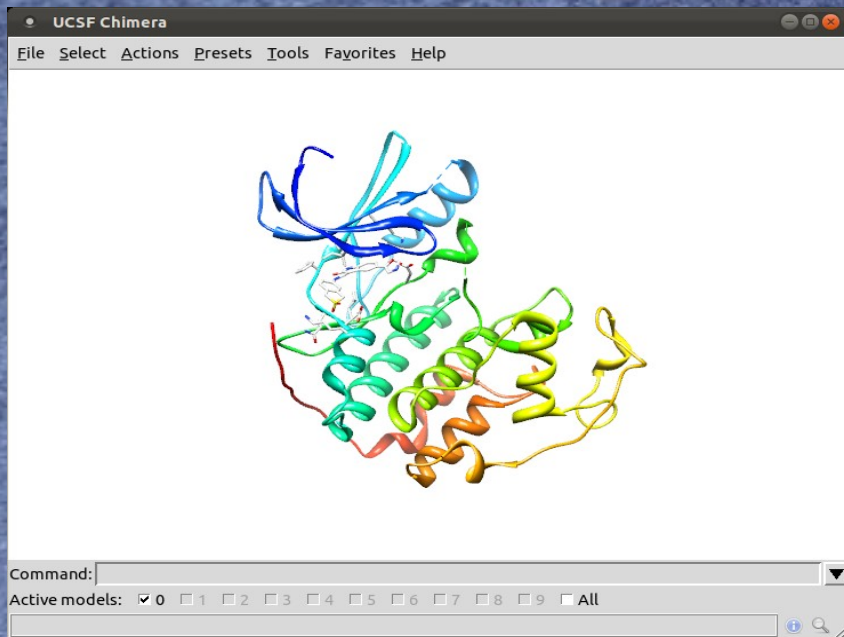
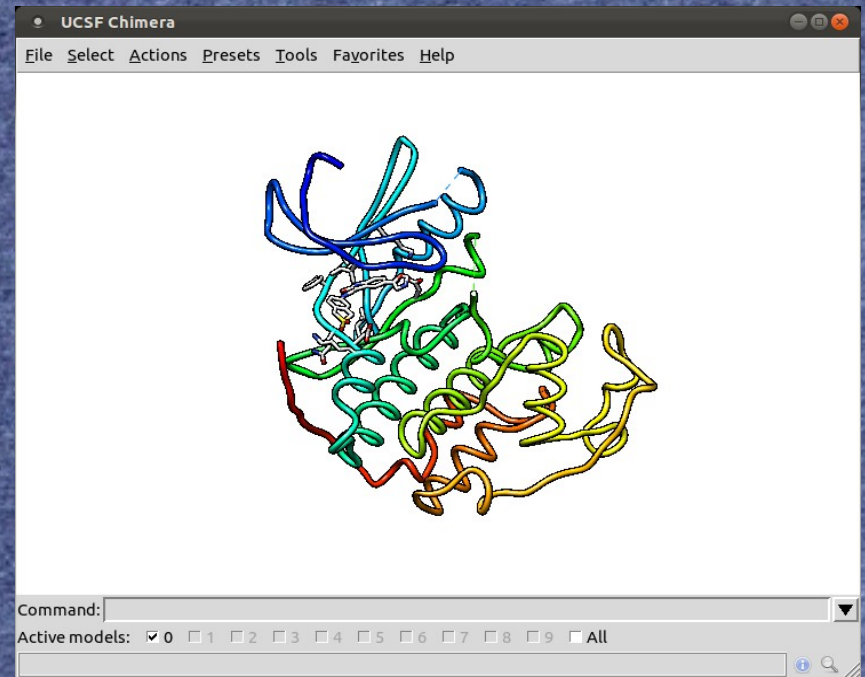
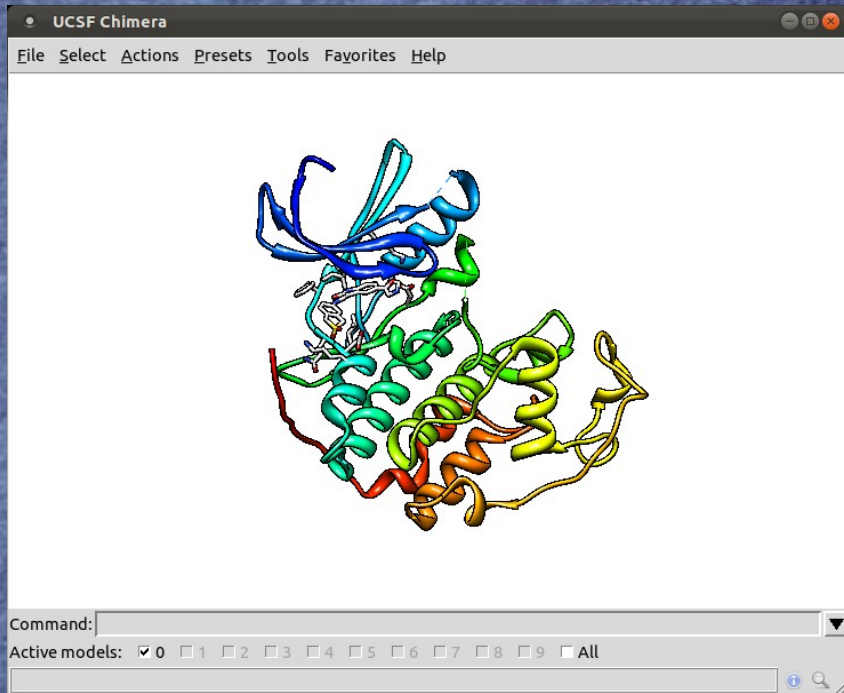


# Přednastavená zobrazení (Presets)



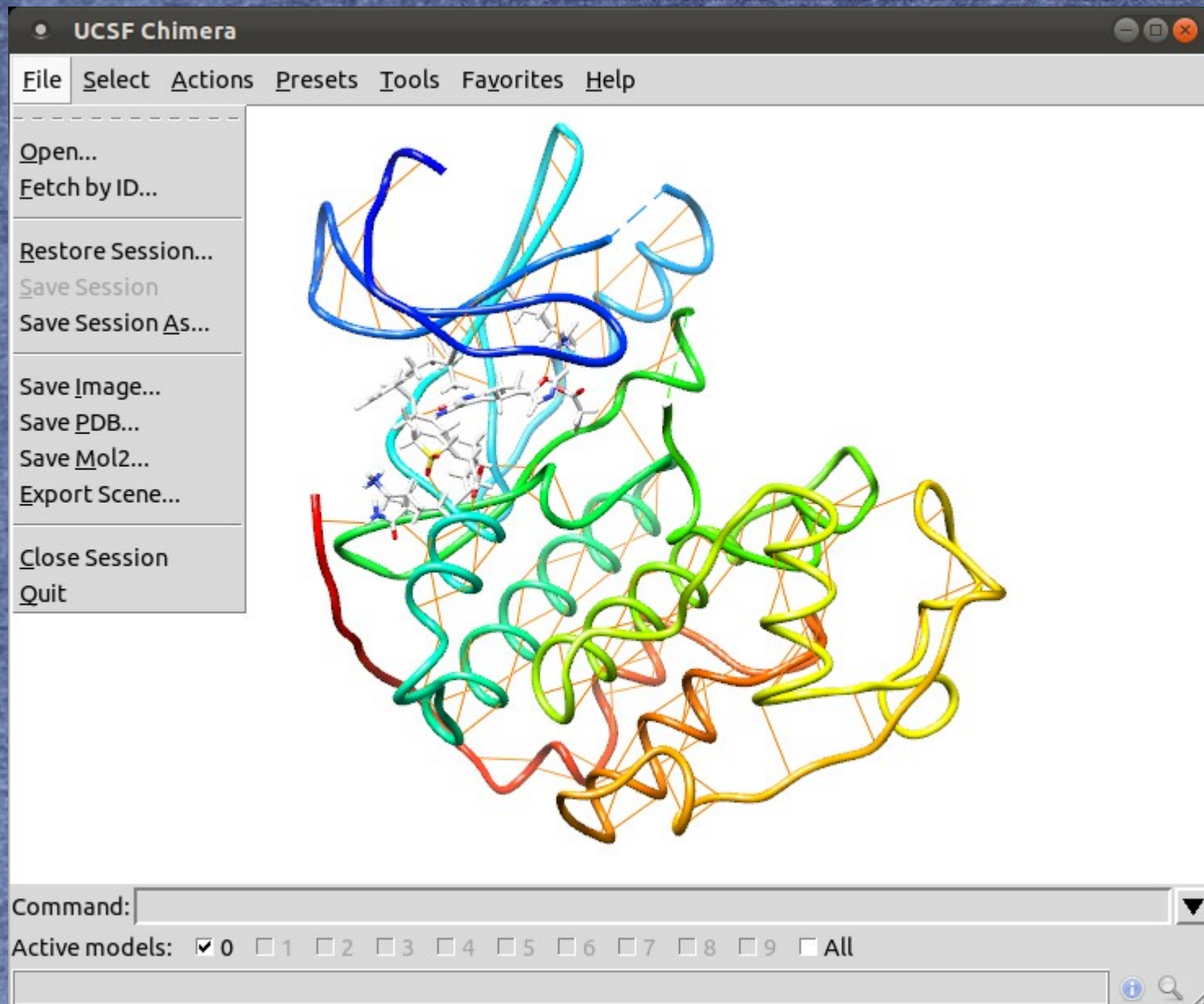


# Přednastavená zobrazení (Presets)



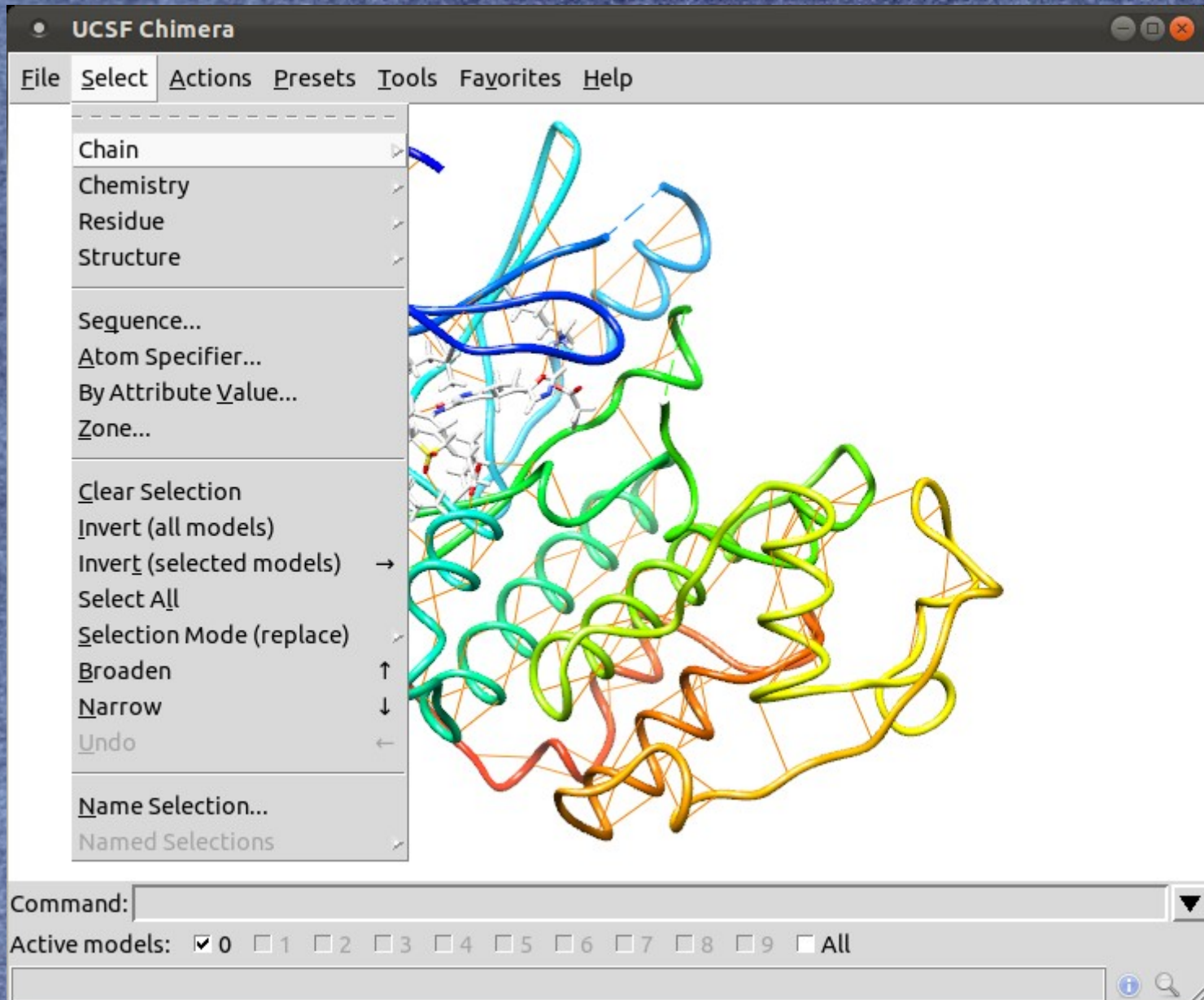


# Základní nabídky



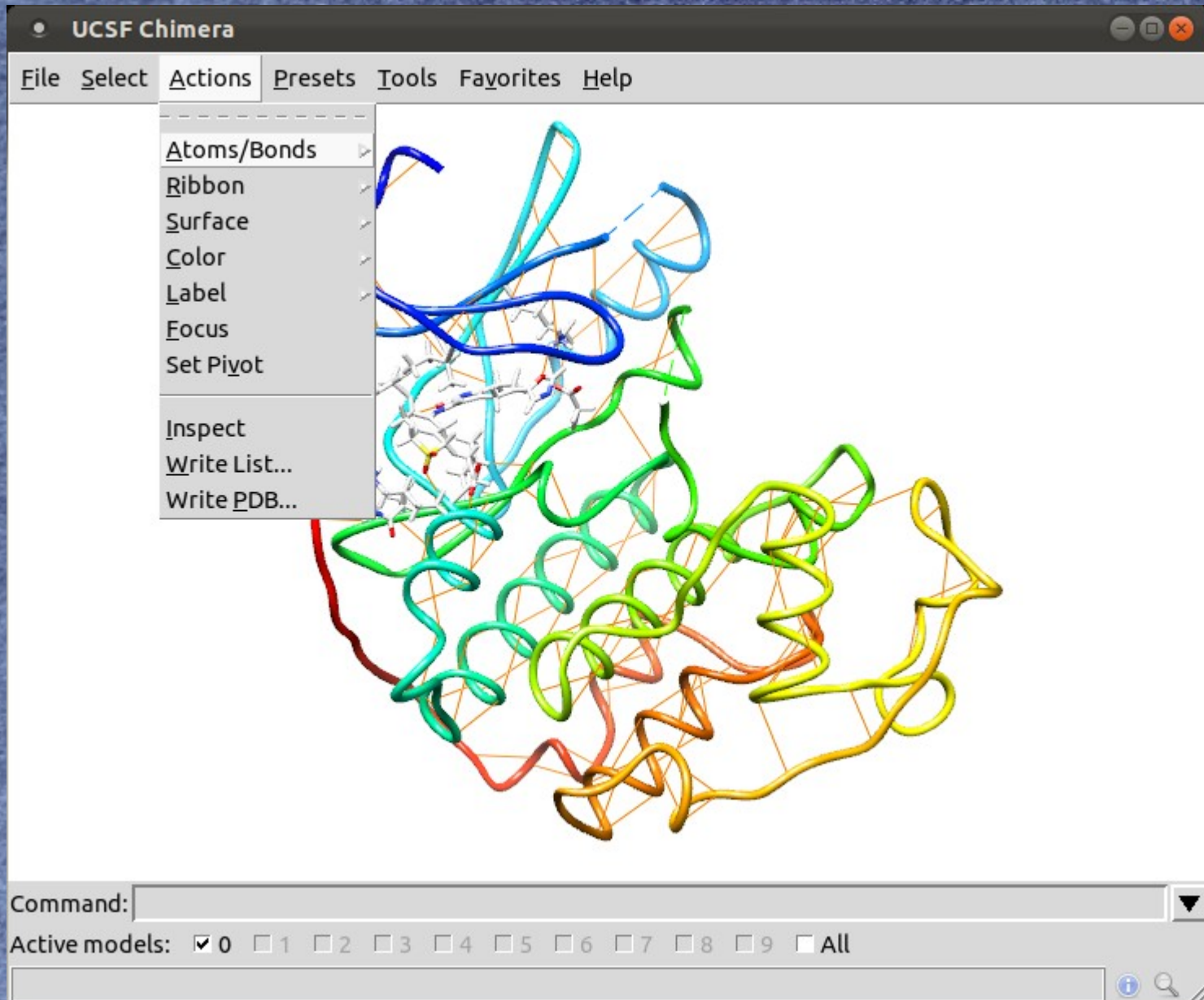


# Základní nabídky



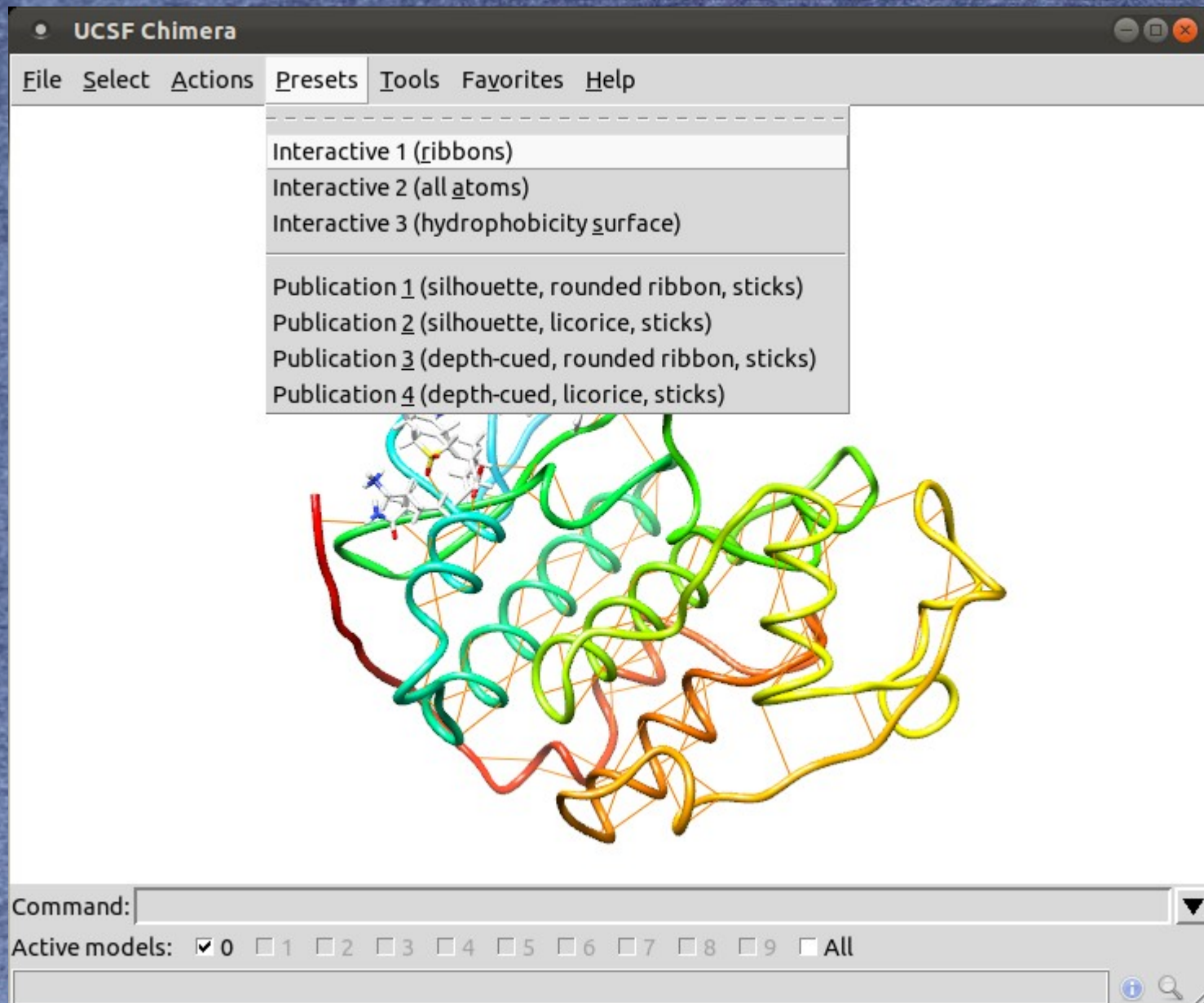


# Základní nabídky



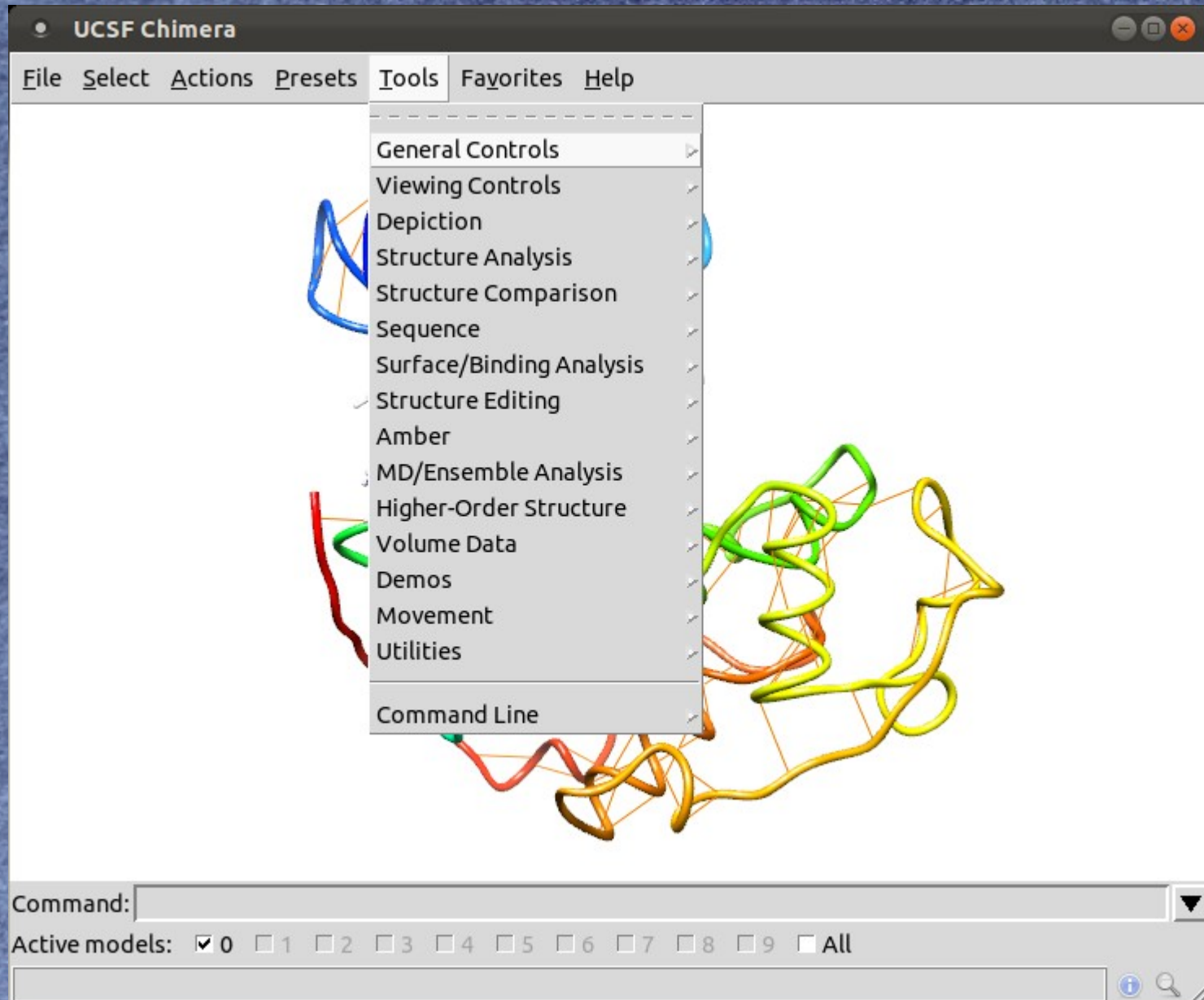


# Základní nabídky



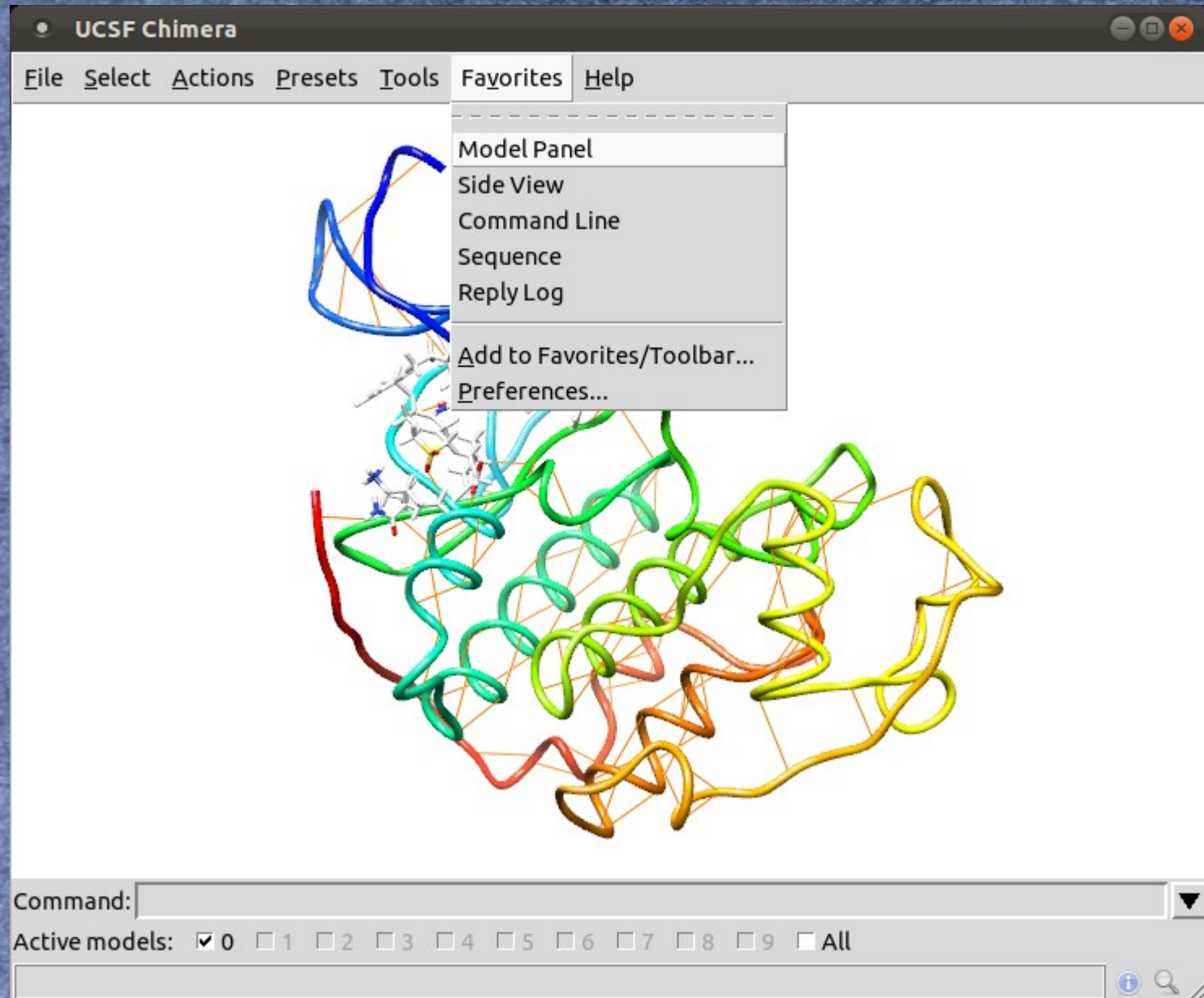


# Základní nabídky





# Základní nabídky





# Načtení molekuly

File → Open

The screenshot displays a Linux desktop environment with a dark theme. The top panel shows system information: Applications, Places, weather (10°C), and the date/time (Mon Mar 19, 10:59 AM). The user is identified as Zdenek Kriz. The main window is UCSF Chimera, which is open to a 3D ribbon representation of a protein structure. A dialog box titled 'Open File in Chimera' is overlaid on the Chimera window, showing a file browser for the folder '/home/zdenek/cdk2\_pdb'. The file list includes: 1jkw.pdb, 1jst.pdb, 1jsu.pdb, 1jsv.pdb, 1jvp.pdb, 1ke5.pdb, 1ke6.pdb, 1ke7.pdb, 1ke8.pdb, 1ke9.pdb, 1ldk.pdb, 1q mz.pdb, atp.pdb, cdk2\_cyclin.pdb, cdk2\_cyclin.r3d, and cdk\_fig1.png. The 'File name' field contains '1ke7.pdb' and the 'File type' is set to 'all (guess type)'. The 'Keep dialog up after Open' checkbox is unchecked. The 'Open', 'Close', and 'Help' buttons are visible at the bottom of the dialog. In the background, a terminal window shows the following commands and output:

```
zdenek@bubo:~$ rm -f /tmp/chinovie*
zdenek@bubo:~$
```

The desktop also features several icons on the left sidebar and various files on the desktop, including PDFs and images.



# Editace molekuly

## Tools → Structure editing

- Doplnění vodíků
- Dopočítání nábojů u atomů
- Příprava vstupu pro program Dock
- Minimalizace struktury
- Přidání iontů
- Solvatace molekuly
- Tvorba DMS souboru
- Modelování smyček



# Analýza struktury

## Tools → Structure analysis

- Nalezení vodíkových vazeb
- Nalezení překryvů atomů
- Měření vzdáleností, úhlů, dihedrálních úhlů
- Přidání nábojů



# Zobrazení výsledků programu Dock Tools → Structure/Binding analysis

- Načtení receptoru přes File → Open
- Načtení výsledků dokování Tools → Structure/Binding analysis → ViewDock



# Grafické výstupy

- Movie přes příkazy v souboru
- Obrázky přes File → Save Image
- Nastavení rozlišení, kvality renderování
- Výstup do png souboru
- Pro kvalitní renderování je třeba zapnout Povray