

PREPARAZIONE DI IMMAGINI E FILMATI DI STRUTTURE PROTEICHE UTILIZZANDO IL SOFTWARE UCSF CHIMERA X.

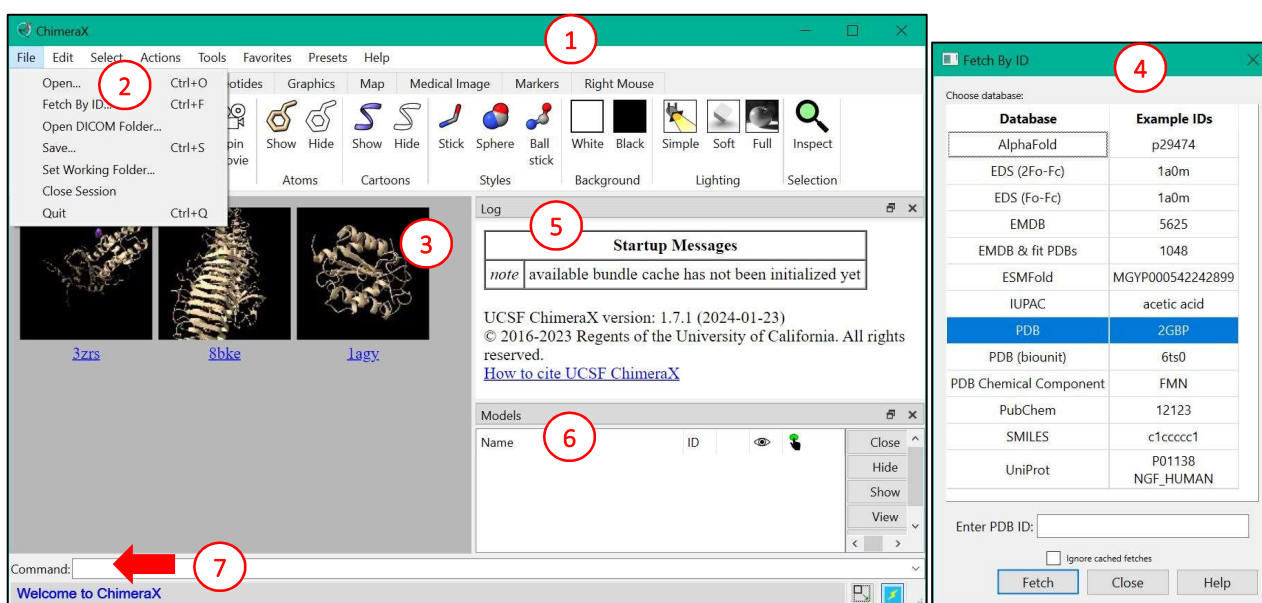
Il software UCSF ChimeraX [1] è uno strumento che consente di visualizzare strutture proteiche e mappe di densità elettronica ottenute attraverso tecniche biocristallografiche o di microscopia elettronica, di confrontare le conformazioni delle proteine, di ottenere immagini e piccoli filmati di buona qualità, sia della struttura complessiva sia dei dettagli locali. Come input il software richiede un file di tipo *pdb* per un modello strutturale, oppure il file di una mappa di densità elettronica (di solito in formato *ccp4*, tipo di file *.map*). Esistono dei tutorial reperibili dal sito del software [2] e altri preparati dal gruppo di ricerca Brown Lab dell'università Virginia Tech [3]. Sempre all'interno del sito del software si trova anche una pagina riassuntiva di tutti i comandi che possono essere utilizzati [4].

Apertura di un file *pdb* e opzioni generali di visualizzazione della struttura proteica

Quando il programma viene avviato, si apre una finestra grafica (1), da cui è possibile aprire un file *pdb*, selezionandolo dalla voce *File > Open* (2).

In alternativa, se il software è stato già aperto in precedenza, sulla sinistra della finestra appare un elenco di strutture già precedentemente aperte (3). Un singolo click sul nome di una struttura apre il file.

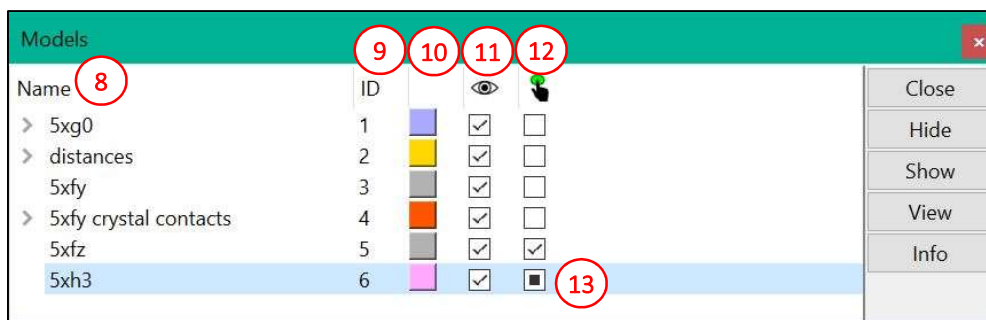
Ancora, è possibile ottenere direttamente un file da PDB o da altre banche dati: selezionando dal menù in alto: *File > Fetch by ID* si apre la finestra di dialogo che consente la ricerca di uno specifico codice da una banca dati (4).



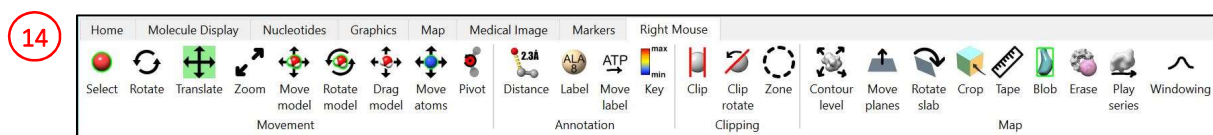
Oltre al pannello di visualizzazione (3), la finestra principale contiene anche un pannello con la lista dei comandi precedenti (*Log*, 5) e un elenco dei modelli visualizzati (6) da cui è facile selezionare cosa visualizzare e cosa rimuovere. In basso, è presente anche un prompt di comando (7).

Nel pannello *Log* (5) vengono visualizzate le informazioni relative alla struttura quando un nuovo file *pdb* viene aperto. In alcuni casi, è utile copiare i comandi forniti per poter riprodurre l'attività della sessione; in questo caso è necessario fare questa operazione a mano, il pannello di *Log* non viene salvato automaticamente.

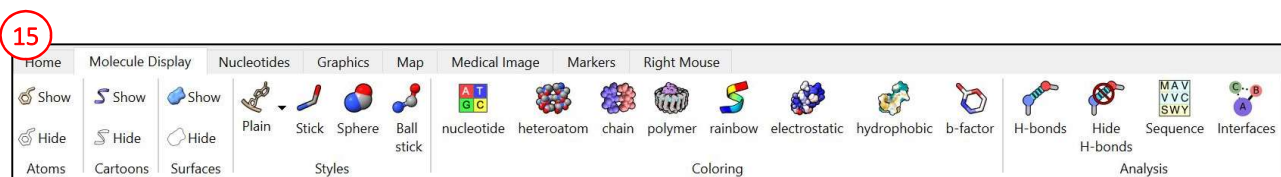
Nel pannello dei modelli (*Models*, 6) è presente il nome del modello (8) (generalmente il nome del file *pdb* caricato), il numero con cui il software identifica il modello (9) e che è necessario utilizzare per la selezione preceduto dal simbolo # (vedi sotto), il colore del modello (10) e le colonne di selezione dei modelli visualizzati (11) e selezionati (12). È possibile modificare il colore di un modello da questo pannello, clickando sul colore nella relativa colonna (10). Se di un modello sono state selezionate solo alcune parti, sulla colonna di selezione appare il simbolo di un quadrato nero (13).



Nella finestra principale del software, in alto, sono presenti diverse etichette (*tab*) che aprono i menu del software. Tra questi il *tab Right Mouse* (l'ultimo nella fila, **14**) consente di selezionare l'azione che verrà fatta quando si utilizza il tasto destro del mouse. Questo è molto utile quando non si dispone di un mouse a 3 tasti o di un mouse con rotella. Quando il software si apre, i comandi del mouse sono i seguenti: tasto sinistro per la rotazione, tasto destro per la traslazione, tasto centrale per lo zoom. E' possibile modificare il comando collegato al tasto destro selezionando l'opportuna icona in questo menu. Ad esempio, selezionando l'icona *Drag Model* è possibile modificare la posizione di uno solo dei modelli, quando ne siano presenti diversi, e sovrapporre due modelli per confrontarli.



Il software permette diverse opzioni di visualizzazione che sono contenute nel secondo *tab* (**15**), *Molecule Display*. Inoltre, è possibile ottenere lo stesso risultato digitando nel prompt (**7**) gli opportuni comandi.



Le prime sezioni del *tab* (**16-18**) sono dedicate ad attivare o disattivare la visualizzazione degli atomi, delle catene come *cartoon* e delle superfici, rispettivamente. Le sezioni successive permettono di modificare lo stile di visualizzazione degli atomi (**19**) e il colore (**20**).

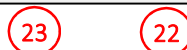
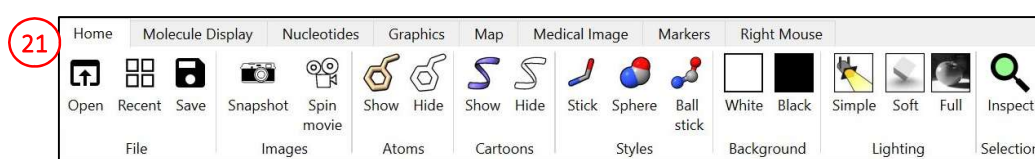
Dopo aver aperto il file della struttura, è possibile attivare la visualizzazione di tutti gli atomi con il tasto *Show* della sezione *Atoms* (**16**). Lo stesso risultato può essere ottenuto digitando nella riga di comando:

```
> show atoms.
```

Nel *tab Home* (**21**) sono presenti una serie di opzioni che permettono di ottimizzare la visualizzazione della struttura, migliorando ad esempio l'illuminazione (**22**) o modificando il colore di background (**23**). In questo *tab* sono anche presenti alcune delle opzioni di visualizzazione già viste in *Molecule Display*. Per modificare il colore di background è possibile anche agire da riga di comando, digitando:

```
> set bgColor white
```

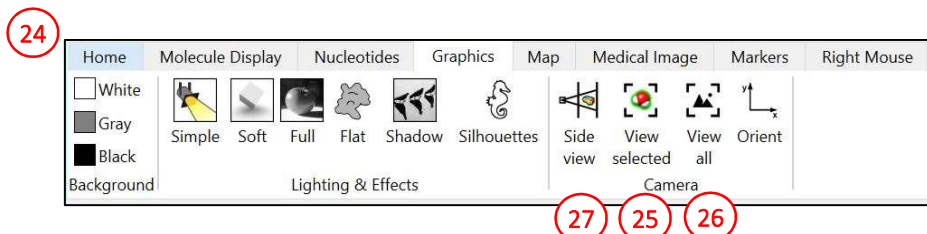
(per il bianco).



Altre opzioni di visualizzazione sono presenti nel *tab Graphics* (24). In particolare, le opzioni *View selected* (25) e *View all* (26) permettono di mettere al centro del pannello di visualizzazione, rispettivamente, una regione della proteina selezionata (per le opzioni di selezione, vedere sotto) oppure tutti i modelli che sono al momento caricati e visualizzati dal software.

I rispettivi comandi da riga di comando sono:

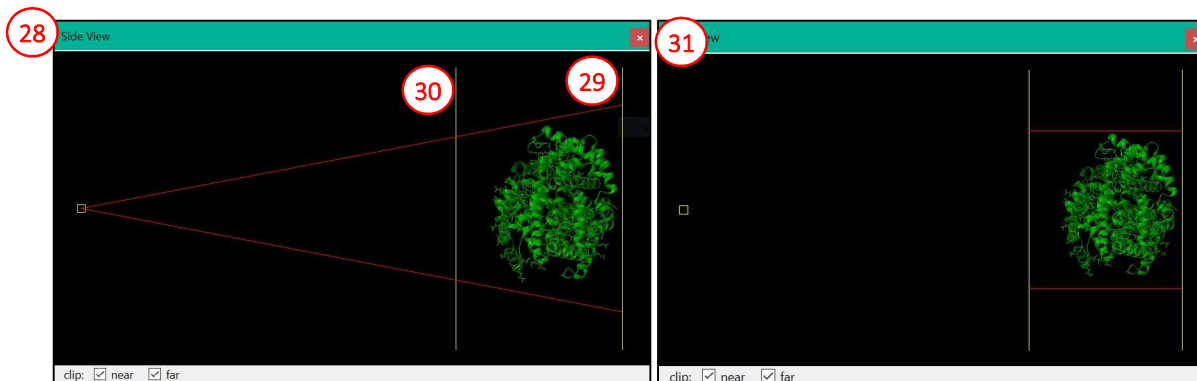
- > `view <selezione>` [per portare al centro del pannello di visualizzazione una specifica porzione]
- > `view` [per portare al centro tutti i modelli correntemente visualizzati]



Un altro strumento utile è la visualizzazione laterale dello spazio (27, *Side view*) che viene mostrata in una nuova finestra (28) selezionando l'opzione opportuna. Questa finestra consente il posizionamento dei piani frontale (29) e posteriore (30) della visualizzazione.

La visualizzazione ortoscopica (non prospettica) (31) è generalmente preferita per immagini di proteine, perchè non presenta deformazioni prospettiche dovute alla posizione del fuoco. La visualizzazione ortoscopica della struttura può essere attivata da riga di comando, digitando:

- > `camera ortho.`



Sintassi di selezione e comandi di visualizzazione/colorazione

Spesso è utile selezionare solo alcuni residui della proteina per visualizzarne nel dettaglio la struttura, ad esempio nel caso si voglia analizzare i residui catalitici di un enzima. Per farlo si possono selezionare le porzioni di interesse utilizzando il menu *Select* oppure da riga di comando.

Nel menu *Select* sono presenti diverse voci, tra cui:

- *Chains* che consente di selezionare le catene presenti nel file pdb;
- *Chemistry* che presenta diverse sotto-voci che consentono di selezionare un tipo di elemento o di gruppo funzionale, oppure tutti gli atomi della proteina, o se presenti gli acidi nucleici;
- *Residues* che permette di selezionare un tipo di residuo (ad esempio, tutti i residui di istidina presenti nella struttura);
- *Structure* che permette di selezionare gli atomi della catena principale oppure delle catene laterali, dei ligandi, di ioni, oppure permette di selezionare porzioni della proteina con struttura secondaria definita;
- *Sequence* che permette di selezionare una specifica sequenza.

Sempre dal menu *Select* è possibile individuare una modalità per la successiva selezione: in genere, la seconda selezione sostituisce la prima (*Replace*), ma è possibile anche aggiungere una seconda selezione alla prima (*Add*), oppure individuare l'intersezione tra la seconda e la prima (*Intersect*), oppure sottrarre la seconda selezione alla prima (*Subtract*).

La selezione può essere annullata con: *Select > Clear*.

Un esempio per chiarire le idee: si vogliono selezionare tutti i residui acidi della proteina, includendo sia i residui di aspartato che quelli di glutammato. Per farlo:

- selezionare *Select > Residues > Asp*,
- modificare il metodo di selezione con *Select > Menu Mode > Add* (a questo punto compare un segno di addizione: *Select+*),
- infine, selezionare i residui di glutammato con *Select > Residues > Glu*.

In alternativa, è possibile selezionare le porzioni di interesse dalla riga di comando, utilizzando il comando *select* che ha una specifica sintassi. In breve, alcune delle chiavi più utilizzate:

- > `select #1` [seleziona l'intero modello identificato con il numero 1; il numero di ciascun modello può essere visto nella colonna *ID (9)* del pannello *Models (6)*].
- > `select /A` [seleziona la catena A di tutti i modelli presenti].
- > `select :1-84` [seleziona i residui da 1 a 84 di tutte le catene di tutti i modelli presenti].
- > `select :Asp` [seleziona tutti i residui di aspartato di tutti i modelli presenti].
- > `select @C*` [seleziona tutti gli atomi di carbonio di tutti i modelli presenti. Indicando *@CA* si possono selezionare anche tutti i carboni α dei modelli].

Le opzioni di selezione indicate qui sopra possono essere anche combinate tra loro, utilizzando gli operatori logici *and (&)*, *or (|)* e *not (&~)*. Inoltre, è possibile combinare le opzioni di selezione anche senza utilizzare gli operatori logici, ma avendo cura di rispettare la gerarchia indicata sopra (*#modello > /catena > :residuo > @atomo*).

Un esempio per chiarire le idee: si vogliono selezionare tutti i residui acidi (aspartato e glutammato) della catena B della proteina presente come modello 3. Per farlo si scrive nella riga di comando:

```
> select #3/B:Asp|#3/B:Glu.
```

Per annullare la selezione:

```
> select clear.
```

Una volta selezionata una porzione della struttura è possibile anche assegnarle un nome per poterla richiamare in seguito:

```
> name <nome selezione> <porzione selezionata>.
```

Nell'esempio precedente:

```
> name acidiB #3/B:Asp|#3/B:Glu.
```

Una volta selezionata la porzione di interesse, questa può essere visualizzata con una delle opzioni di visualizzazione che offre il programma dal *tab Molecule Display* (vedi sopra, **15**). Oppure da riga di comando utilizzando i comandi *show*, *hide* e *color*:

- > `show acidiB atoms` [visualizza gli atomi dei residui selezionati in precedente sotto il nome "acidiB" come *sticks*]
- > `hide /B cartoon` [nasconde la visualizzazione *cartoon* dell'intera catena B]
- > `color :127-234 red` [colora di rosso i residui da 127 a 234 inclusi di tutte le catene presenti].

Ulteriori opzioni per la visualizzazione con i comandi *show/hide* sono: *atoms/cartoons/ribbons/surfaces*.

Per una lista completa dei nomi dei colori di visualizzazione con ChimeraX si fa riferimento a [5].

Visualizzazione di molecole relate per simmetria

Quando una struttura cristallografica viene caricata, il programma rappresenta solo il contenuto del file pdb, corrispondente all'unità asimmetrica. Tuttavia, è possibile (e in molti casi è utile) rappresentare anche le molecole simmetriche. È il caso, ad esempio, di una proteina con struttura quaternaria in cui un elemento di simmetria coincide con un elemento di simmetria cristallografica. L'unità funzionale in questo caso può essere ottenuta solamente applicando la simmetria cristallografica all'unità asimmetrica.

Per visualizzare le molecole relate per simmetria, è necessaria l'informazione relativa a cella elementare e simmetria riportata alla riga CRYST1 del file pdb, caricata nel software al momento dell'apertura del file pdb. Per visualizzare le molecole simmetriche si può selezionare: *Tools > Higher-Order Structure > Crystal Contacts*. A questo punto, si apre una finestra che permette di indicare la distanza di contatto delle unità simmetriche che verranno visualizzate: il software visualizzerà tutte quelle molecole che, applicando la simmetria cristallografica, vengono a trovarsi ad una distanza minima minore rispetto alla soglia indicata dalla molecola visualizzata. Nel pannello *Log (5)* appare l'indicazione dell'operatore di simmetria e dell'eventuale traslazione applicata per ciascuna copia dell'unità asimmetrica visualizzata. Inoltre, nel pannello *Models (6)* appare un nuovo oggetto che contiene le copie delle molecole simmetriche appena visualizzate. Da questo pannello è possibile nascondere alcune delle molecole e visualizzarne altre (dalla colonna con il simbolo dell'occhio, **11**). Alternativamente è possibile ottenere lo stesso risultato da riga di comando, digitando:

```
> crystalcontacts #<modello> distance <distanza in Å>
```

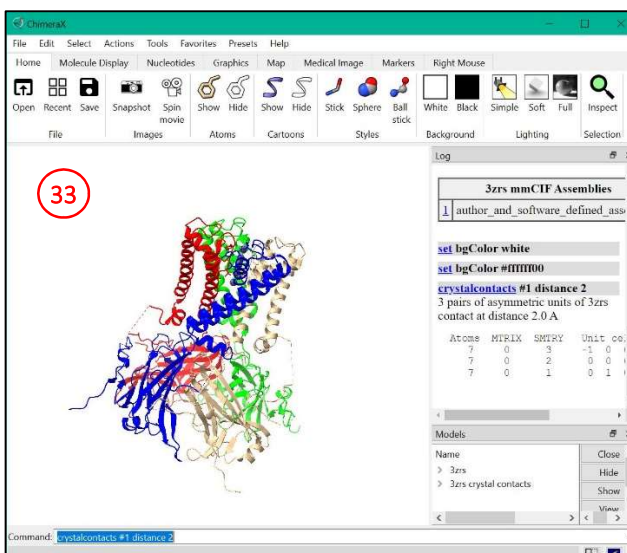
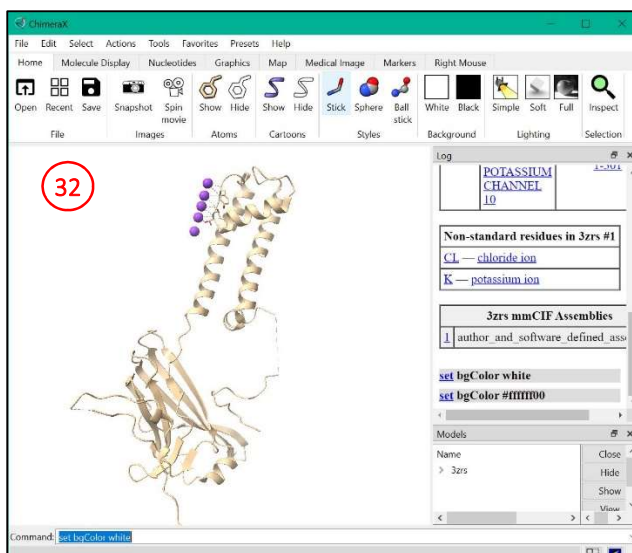
e poi, se necessario, nascondendo alcune delle molecole simmetriche con il comando:

```
> hide #<modello>.<molecola simmetrica> cartoons
```

(il codice numerico di ciascuna molecola simmetrica può essere visto dal pannello *Models (6)*).

Ad esempio, aprendo la struttura con codice PDB 3zrs (canale batterico al potassio di tipo KIR) quello che viene immediatamente visualizzato è solo un monomero (**32**), che rappresenta l'unità asimmetrica della struttura, ma non la sua unità funzionale (la proteina è omotetrameric). Con il seguente comando è possibile visualizzare anche le molecole simmetriche, ottenendo la visualizzazione del tetramero (**33**):

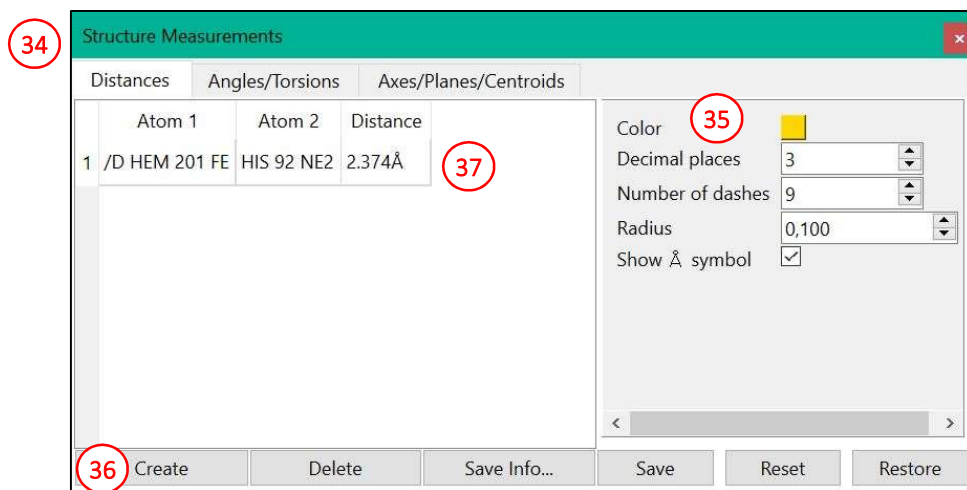
```
> crystalcontacts #1 distance 2.
```



Misura di distanze, angoli e angoli torsionali

Per misurare la distanza tra due atomi è necessario prima di tutto selezionare gli atomi in esame. Per farlo è possibile utilizzare il tasto sinistro del mouse, assieme ai tasti *Ctrl* e *Shift*. A questo punto, si seleziona *Tools > Structure Analysis > Distance*. Con questo comando si apre una finestra di dialogo (**34**) che consente di misurare la distanza e selezionare le opzioni di visualizzazione della misura (**35**). Per la misura, dopo aver

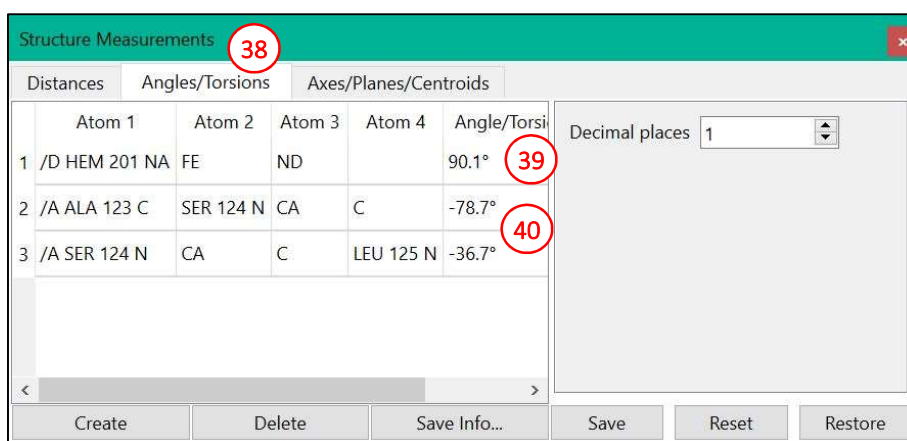
selezionato gli atomi, è necessario premere il tasto *Create* (36) presente nella finestra. A questo punto appare la distanza (37) che, nel pannello di visualizzazione, è rappresentata da un tratteggio tra gli atomi selezionati.



E' possibile ottenere lo stesso risultato digitando il comando `distance` e i riferimenti dei due atomi selezionati. Ad esempio:

- > `distance #1/A:127@O #1/A:124@N` [misura la distanza tra l'atomo di ossigeno carbonilico del residuo 127 della catena A e l'atomo di azoto amidico del residuo 124 della stessa catena].

Per misurare gli angoli e gli angoli torsionali è possibile utilizzare il secondo *tab* della stessa finestra (38), selezionando 3 o 4 atomi, rispettivamente, e premendo il tasto *Create*. Nella figura, un esempio di misura dell'angolo tra un atomo di azoto centrale del gruppo heme, l'atomo di ferro e un altro atomo di azoto (struttura dell'emoglobina, codice PDB 6r2o) (39). Nella seconda e terza riga, esempi di misura degli angoli torsionali Φ e Ψ per un singolo residuo della struttura (40).



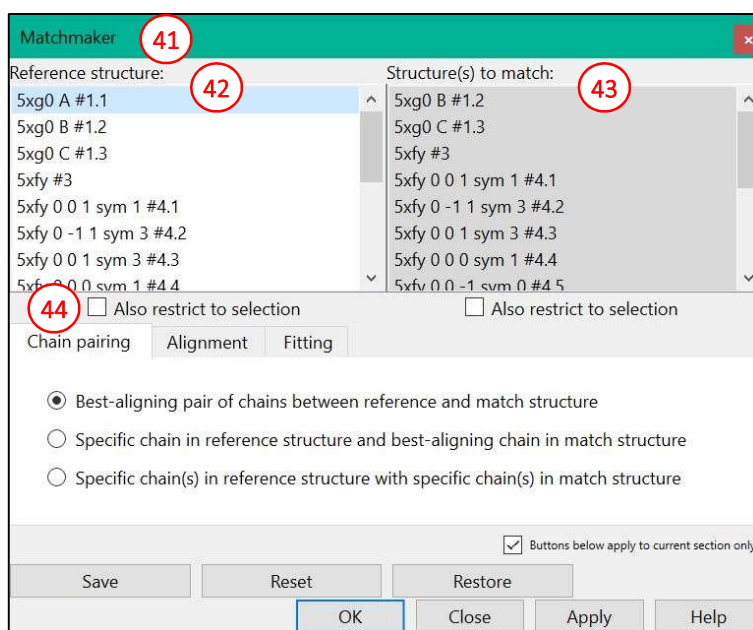
Dalla riga di comando è possibile visualizzare nel pannello *Log* (5) l'angolo o l'angolo torsionale, rispettivamente, con i seguenti comandi:

- > `angle /D:201@NA /D:201@FE /D:201@ND`
- > `torsion /A:123@C /A:124@N /A:124@CA /A:124@C` [per l'angolo torsionale Φ]
- > `torsion /A:124@N /A:124@CA /A:124@C /A:125@N` [per l'angolo torsionale Ψ].

Sovrapposizione di proteine omologhe per confrontarne la struttura

Per confrontare la struttura 3D di proteine, gli strumenti grafici sono indispensabili. Anche ChimeraX è in grado di fare questo confronto, sovrapponendo le strutture omologhe in modo da minimizzare la distanza tra i residui uguali. Questo può essere fatto sia attraverso i menu che da riga di comando.

Dal menu in alto *Tools > StructureAnalysis > Matchmaker* si apre una nuova finestra (41) da cui è possibile selezionare le strutture che si vuole sovrapporre. Nella colonna di sinistra (42) si seleziona la struttura che verrà utilizzata come riferimento (ovvero la struttura che nella sovrapposizione rimane nella posizione iniziale); nella colonna di destra (43) è possibile selezionare la struttura da sovrapporre. La sovrapposizione può anche essere effettuata solo su una parte della struttura, precedentemente selezionata, selezionando il box sotto l'elenco di strutture (44). Strumenti più sofisticati prevedono l'allineamento delle sequenze proteiche (*Alignment*) o l'ottimizzazione della sovrapposizione attraverso cicli iterativi (*Fitting*).



Preparazione di immagini della struttura proteica

Prima di salvare un'immagine, è necessario posizionare in modo ottimale il modello che si vuole visualizzare nell'immagine. Questo può essere fatto con il mouse, per rotazione e spostamento, e con il pannello *Side View* (28), che consente di spostare il primo piano e il piano di sfondo della visualizzazione, in modo da selezionare solo la parte di modello che si vuole far comparire nell'immagine.

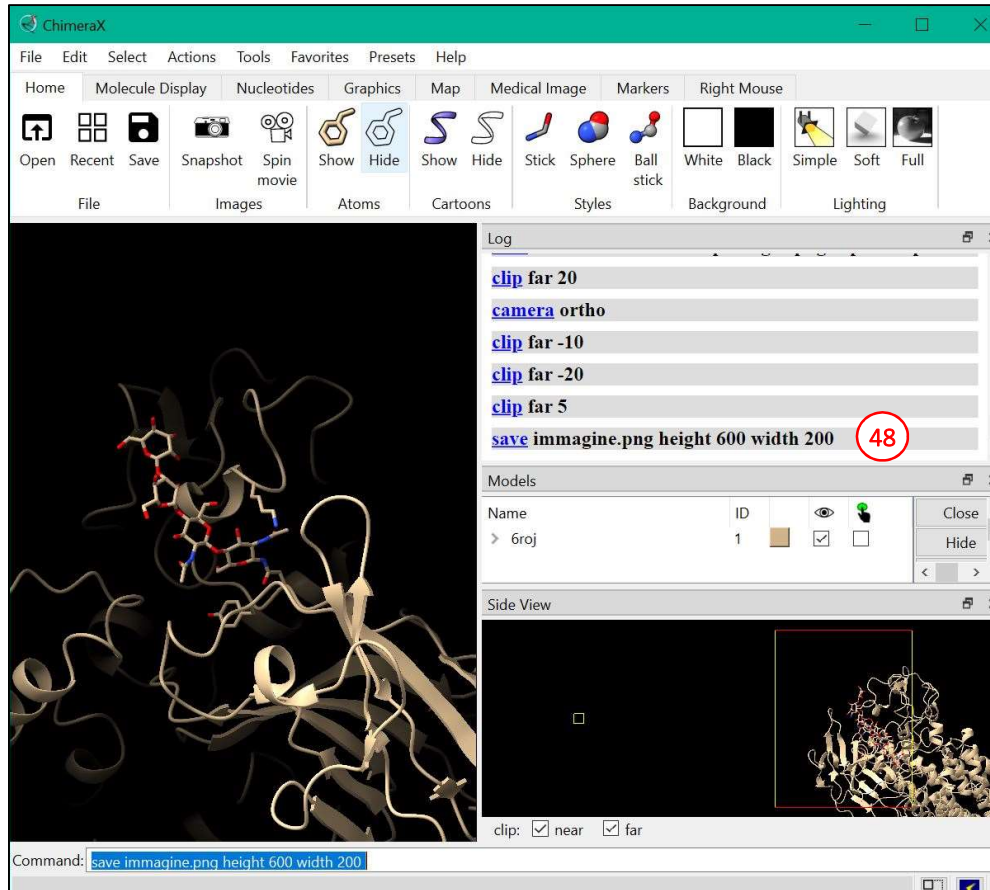
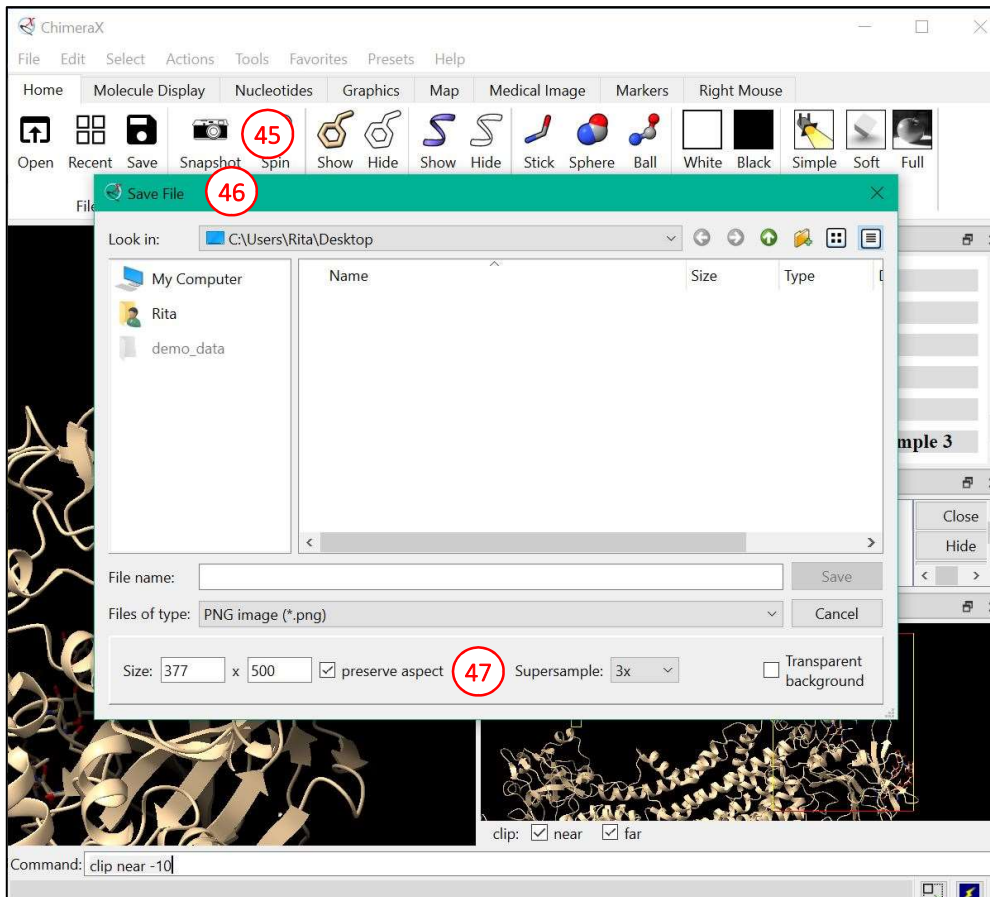
Lo stesso risultato può essere ottenuto con il comando `clip` e le opzioni `far` e `near`:

- > `clip near 20` [sposta il primo piano dell'immagine, avvicinandolo all'osservatore di 20 Å]
- > `clip near -10` [sposta il primo piano dell'immagine, allontanandolo dall'osservatore di 10 Å]
- > `clip far 5` [sposta il piano di sfondo, allontanandolo dall'osservatore di 5 Å]
- > `clip far -2` [sposta il piano di sfondo, avvicinandolo all'osservatore di 2 Å].

Il software ChimeraX consente di preparare immagini di buona qualità della struttura in esame. Le immagini possono essere preparate selezionando il tasto *Snapshot* dal menu *Home* in alto (45), oppure selezionando *File > Save*. In questo secondo caso, si apre una finestra (46) in cui sarà necessario selezionare la tipologia di file che si intende salvare (in questo caso png). Da questa finestra è possibile definire meglio le dimensioni e qualità dell'immagine che viene salvata (47).

L'immagine può essere salvata anche con il comando `save` e le opzioni per definire la dimensione del pixel (`pixelsize`), oppure altezza (`height`) e larghezza (`width`) (48):

- > `save immagine.png height 600 width 200` [salva un'immagine in formato png di 600 pixel di altezza e 200 di larghezza].



Preparazione di filmati – Comandi di posizionamento e movimento dei modelli visualizzati

Il tipo più semplice di filmati che possono essere realizzati con ChimeraX sono quelli in cui il modello in esame viene fatto ruotare lungo l'asse verticale della figura (asse y). Questo tipo di filmati possono essere immediatamente salvati utilizzando il tasto *Spin Movie* della sezione *Images* del *tab Home* (21). Il software salva un filmato del modello che ruota lungo l'asse y ad una velocità di 60°/secondo. Il nome del file e la sua collocazione sono mostrati nel pannello *Log* (5) al termine del salvataggio del file.

Per la preparazione di filmati *ad hoc* dei modelli, è utile conoscere alcuni comandi che possono essere utilizzati per raggiungere una specifica posizione del modello senza utilizzare il mouse, aumentando la precisione e la riproducibilità della visualizzazione. I comandi di movimento/rotazione vengono applicati a tutti quei modelli che sono selezionati all'interno della sessione, che possono essere identificati dal segno di spunta nella relativa colonna (13) del pannello *Models* (6).

Tra i comandi utili per lo spostamento/rotazione dei modelli:

- > `turn <asse> <gradi di rotazione>` [permette di ruotare il modello di un definito numero di gradi attorno ad un asse specifico (x, y o z)]
 - o esempio: `turn x 90` [rotazione del modello di 90 gradi attorno all'asse x, ovvero l'asse orizzontale dell'immagine visualizzata]
- > `move <asse> <movimento in Å>` [permette di spostare il modello lungo l'asse definito, di una traslazione specificata]
 - o esempio: `move y -9` [movimento del modello di 9 Å lungo la direzione di y decrescente, cioè verso il basso]
- > `zoom <valore>` [permette di aumentare lo zoom sulla struttura, se il valore assegnato è maggiore di 1, oppure diminuirlo, se il valore assegnato è minore di 1]
- > `roll` [Questo comando utilizzato senza ulteriori specificazioni fa ruotare in continuo il modello attorno all'asse y, ad una velocità di 25°/secondo, producendo un'immagine (*frame*) per grado]
- > `roll <asse di rotazione> <gradi per immagine> <numero di immagini (frames)>` [il modello viene ruotato continuamente attorno all'asse definito]
 - o esempio: `roll x 2 180` [rotazione continua del modello per 2 gradi per immagine (*frame*), per 180 immagini]
- > `stop` [Questo comando permette di interrompere l'azione precedente, ad esempio la rotazione continua attorno ad un asse]
- > `wait <numero di frame>` [Interrompe l'azione in corso per un numero di *frame* definiti]

E' possibile svolgere simultaneamente più comandi, se questi sono intervallati da un punto e virgola. Al contrario, se si vuole fornire al software una serie di programmi che devono essere eseguiti in successione, è possibile separare i comandi con il punto e virgola, ma intervallandoli con il comando `wait`.

Volendo salvare un filmato del modello in esame, le diverse orientazioni possono essere salvate con il comando `view name`:

- > `view name <nome assegnato>`.

Per richiamare ciascuna orientazione è sufficiente utilizzare il comando `view` (vedi sopra). Bisogna prestare attenzione che il comando `view name` salva la posizione della visualizzazione, ma non il suo contenuto: quando una vista viene richiamata con il comando `view`, i modelli rimangono visualizzati/non visualizzati come prima, con gli stessi colori e stili che erano stati precedentemente impostati, e non con i *setting* che erano presenti quando la vista è stata salvata.

Per iniziare a registrare un filmato con una specifica sequenza di azioni, si digita il comando:

- > `movie record`

A questo punto è possibile digirare comandi di movimento, come il già visto comando `roll`, oppure i comandi:

- > `fly <prima vista> <seconda vista>` [muove la camera dalla prima vista alla seconda salvando 100 immagini (*frame*) dall'una all'altra]
- > `fly <vista1> <numero di frame> <vista2>` [come sopra, ma con un definito numero di immagini (*frame*) tra le due viste]
- > `crossfade <#frames>; hide /C` [questo è un comando composto: il primo *crossfade* indica che si vuole sfumare tra due immagini per il numero di *frame* definito; il secondo, il comando *hide* in questo caso, indica che quello che verrà sfumato è la scomparsa della catena C].

Quando le azioni che vogliono essere rappresentate nel filmato sono state tutte indicate, il filmato deve essere salvato come un file. A questo scopo si utilizza il comando `movie encode`:

- > `movie encode C:/<path>/<name>.mp4`

Visualizzazione di mappe da dati di microscopia elettronica

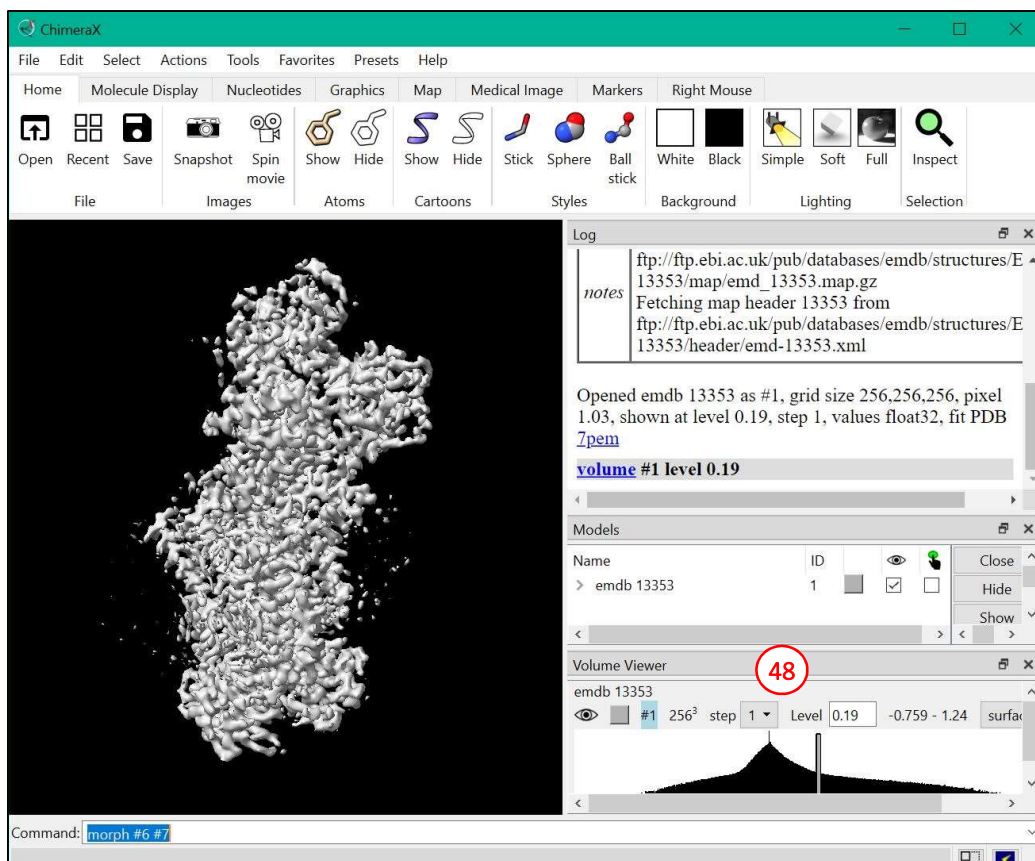
Il software ChimeraX consente anche di visualizzare mappe di densità elettronica (o mappe di potenziale elettrostatico) ottenute sia da dati di diffrazione sia da dati di microscopia elettronica. Il formato tipico di queste mappe è il formato di CCP4, che produce file *.map*. Come per i modelli atomici, le mappe possono essere aperte utilizzando il comando:

- > `open #numero fromDatabase EMDb` [che apre una mappa dal database EMDb]

oppure con le voci dei menu *File > Open (2)* (selezionando il file già scaricato) o *File > Fetch By ID (4)*.

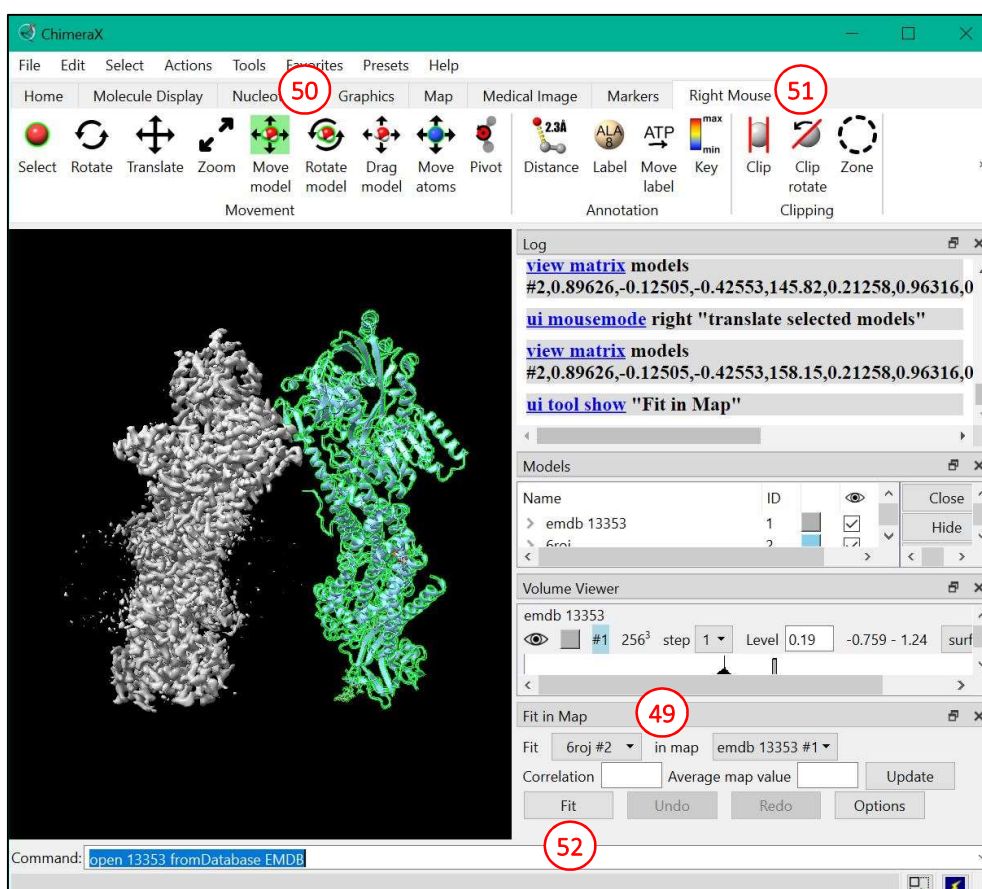
All'apertura della mappa, il software automaticamente apre il pannello *Volume Viewer (49)* in cui il valore delle curve di livello della mappa rappresentata può essere selezionato variando la posizione della barra. Lo stesso pannello può essere aperto anche dal menu *Tools > Volume Data > Volume Viewer*. Ancora, in alternativa, da riga di comando si può digitare il comando:

- > `volume #<ID dell'oggetto> level #<valore curva di livello>`



Nelle mappe è spesso utile inserire un modello già presente (ad esempio, quando per la proteina in esame sia disponibile una struttura cristallografica precedentemente determinata). Per farlo è necessario caricare anche il file con le coordinate del modello strutturale. Il software permette di fare il *fitting* della struttura all'interno della mappa utilizzando gli strumenti del menu *Tools > Volume Data > Fit in Map*. Selezionando questa voce, il software apre un pannello nella finestra principale (49) da cui è possibile selezionare il modello da introdurre nella densità elettronica e la mappa di densità elettronica da utilizzare.

Prima di procedere con il fitting automatico, per ottenere una miglior corrispondenza tra modello e mappa, è utile pre-posizionare il modello all'interno della mappa. Questo può essere fatto selezionando solo il modello atomico (dal pannello *Models* o da riga di comando, come visto precedentemente) e selezionando le azioni *Move model* e *Rotate model* (50) dal menu *Right Mouse* (51). A questo punto, utilizzando il tasto destro del mouse, si potrà muovere il modello (ma non la densità elettronica) per inserirlo al meglio possibile nella densità elettronica visibile.

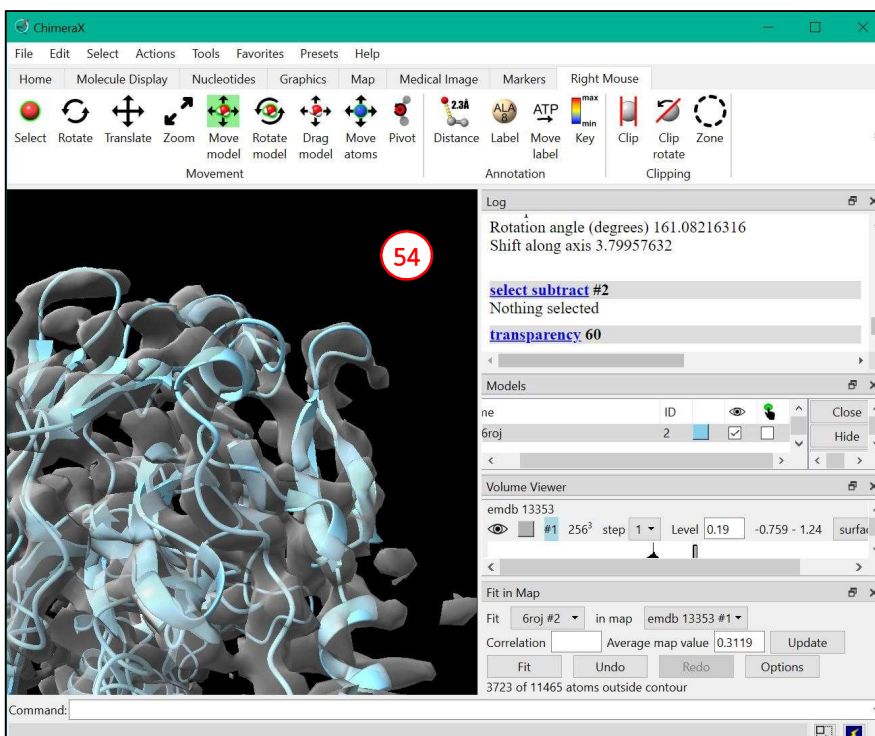
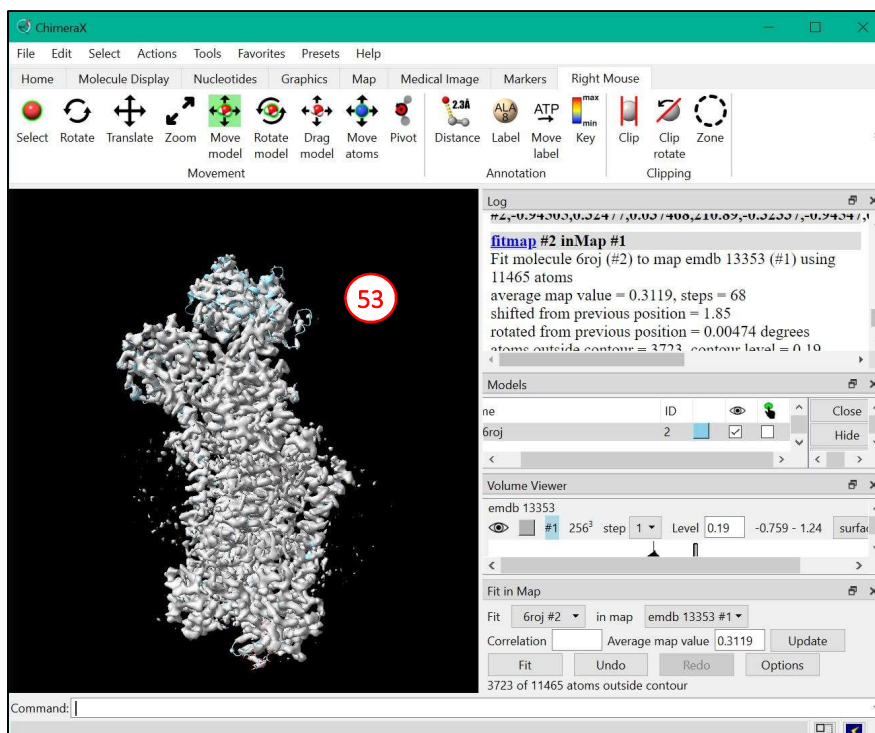


Una volta che il modello è stato inserito nella densità elettronica, il tasto *Fit* (52) compirà delle azioni di traslazione e rotazione del modello in modo da ottimizzarne la corrispondenza con la densità elettronica (53). Lo stesso risultato può essere ottenuto con il comando:

```
> fitmap #<ID del modello> inMap #<ID della mappa>
```

Quando il modello è stato inserito all'interno della mappa, per visualizzarne meglio la corrispondenza, può essere utile rendere la mappa trasparente (54). Questa operazione può essere ottenuta con il menu *Actions > Surface > Transparency* e scegliendo il valore della trasparenza desiderata, oppure con il comando:

```
> transparency #1 60 [per la mappa #1 viene impostato un valore di trasparenza del 60%].
```



Riferimenti.

- [1] Goddard TD, Huang CC, Meng EC, Pettersen EF, Couch GS, Morris JH, Ferrin TE. "UCSF ChimeraX: Meeting modern challenges in visualization and analysis." *Protein Sci.* 2018. 27(1):14-25. doi: 10.1002/pro.3235.
- [2] <https://www.cgl.ucsf.edu/chimerax/>
- [3] https://www.youtube.com/watch?v=8XmbMROKnnQ&list=PL4eF1KHNgDfIYSKCS3_S0PTRYtYTV9Myi
- [4] <https://www.cgl.ucsf.edu/chimerax/docs/user/index.html#commands>
- [5] <https://www.cgl.ucsf.edu/chimerax/docs/user/commands/palettes.html>