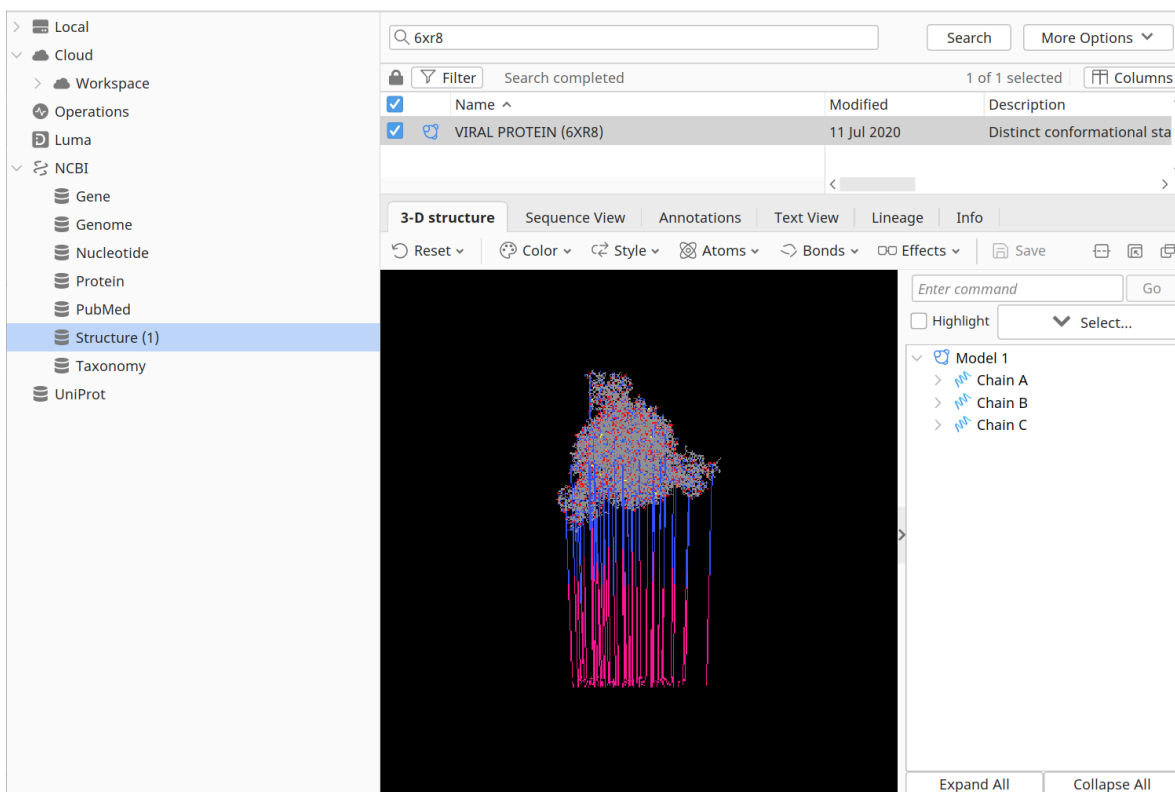




Problemer med udseendet af strukturfiler i Geneious Prime

Geneious Prime har et problem med at indlæse strukturfiler med fx glycosileringer, når strukturfilen hentes i Geneious Prime under **NCBI** → **Structure**. Fx ses i figur 1, at Spikeproteinet (PDB ID: 6XR8) fra en Sars-CoV-2 virus vises korrekt øverst, men der er blå og pink streger (bindinger) ned til molekyler, som ikke kan ses på figur 1. Disse molekyler er glycosileringer af spikeproteinet, der er et glycoprotein, men glycosileringerne er ikke tilknyttet proteinet som de skal, men i stedet placeret i en 'bunke' under proteinet, da Geneious Prime læser koordinaterne for glycosileringer, eller andre stoffer der er proteiner, forkert.

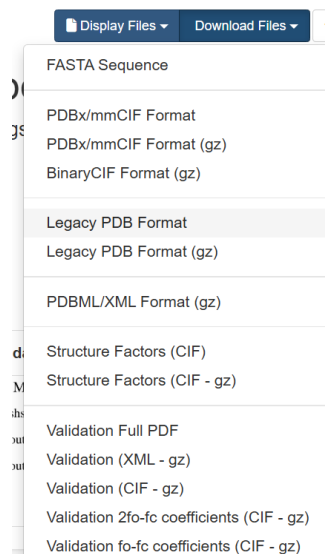


Figur 1. Hentning af strukturfil med forkerte koordinater på glycosileringer.

To løsningsmodeller

Små PDB-filer

Filen kan downloades fra hjemmesiden RSCB Protein Data Bank. Det gøres ved på <https://www.rcsb.org/> i søgefeltet at skrive filens PDB ID (4 tegn) eller at skrive flg. i browserens adressefelt: <https://www.rcsb.org/structure/xxxx>, hvor xxxx repræsenterer de fire tegn PDB-filen har. Under Download Files vælges Legacy PDB-format, se figur 2. Når filen er downloadet kan den med musen trækkes fra mappen Overførsler over i en mappe i Geneious Prime.



Figur 2. Download af PDB-strukturfiler fra PDB's hjemmeside.

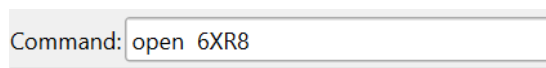
Store PDB-filer

Hvis man skal downloade store PDB-filer, kan man imidlertid ikke downloade dem som PDB-filer fra PDB's hjemmeside. Der er ud for teksten: **Legacy PDB Format** en stoptavle, se figur 3.



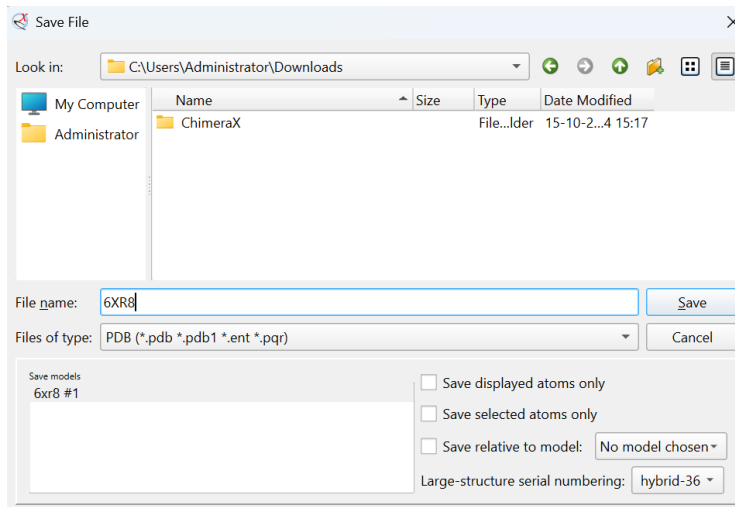
Figur 3. Store PDB-filer kan ikke downloades i PDB-format fra PDB's hjemmeside.

Derfor må man ty til et program, der kan downloade strukturfiler korrekt. Det er ChimeraX, som er beskrevet i Bioinformatik i praksis og på Nucleus hjemmeside. Det viser sig, at spikeproteinet 6XR8 fra Sars-CoV-2 er for stort at downloade som PDB-fil. Åbn derfor i stedet ChimeraX. I nederste kommandolinje skrives **Open xxxx**, hvor xxxx står for de fire tegn i PDB-filen. Kommandoen **Open 6XR8** åbner derfor spikeproteinet og indlæser det i ChimeraX, se figur 4.



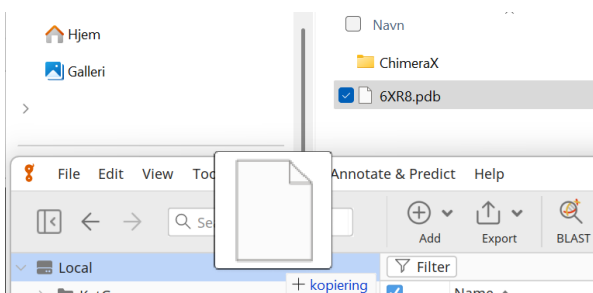
Figur 4. I kommandolinjen i ChimeraX skrives open efterfulgt af den PDB-fil man vil åbne.

Herefter skal filen gemmes på computeren og trækkes ind i en mappe i Geneious Prime. Gem filen i fx Downloads/Overførsler eller et andet sted, der kan findes igen. Vælg **File** → **Save**. Klik på en filplacering der kan findes igen, se figur 5.



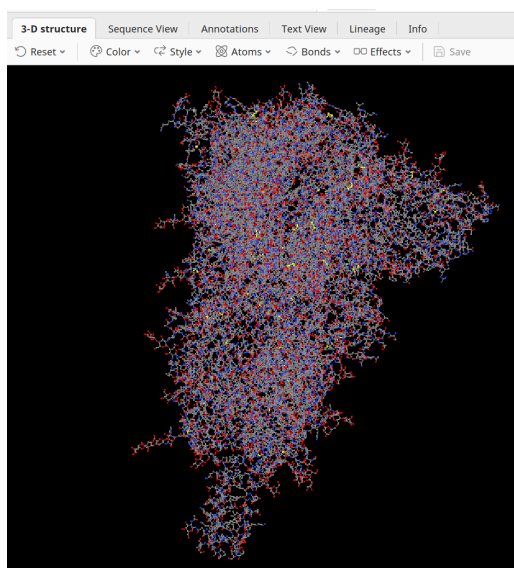
Figur 5. Filen 6XR8 gemmes i mappen Downloads og trækkes herfra over i mappen Local i Geneious Prime.

Gem filen og træk den derfra over i en mappe i Geneious Prime, som vist i figur 6.



Figur 6. Filen 6XR8 trækkes fra mappen Overførsler til Local i Geneious Prime.

Strukturfilen ser ud som den skal efter import til i Geneious Prime, se figur 7.



Figur 7. Spikeproteinets udseende efter at være downloadet fra ChimeraX, gemt og importeret i Geneious Prime. Alle glycosileringer sidder korrekt på proteinet.