**Часто используемые команды программы Jmol**

*Справочник по командам*

http://jmol.sourceforge.net/docs/

*Открыть файл*  
load <имя файла>

*Закрыть файл*  
zap

*Исполнить скрипт* (текстовый файл, в котором написан список команд)  
script <имя файла>

*Выделить множество атомов*   
(т.е. указать программе, что дальнейшие действия относятся к этому множеству)  
select <выражение>   
restrict <выражение>   
Пояснения:

1. select только выделяет множество атомов, restrict ещё скрывает все остальные атомы
2. Как писать выражения см. Atom Expressions.

*Запомнить название группы атомов*  
define <имя> <выражение>   
После этого <имя> можно использовать в выражениях для команд select и restrict

*Показать выделенное множество*   
wireframe <толщина> — стержневая модель  
backbone <толщина> — остовная модель  
сpk <радиус> — шариковая модель  
spacefill — ван-дер-ваальсова модель  
cartoons — ленточная модель

*Скрыть изображение выделенного множества*  
wireframe off, backbone off, … etc

*Покрасить определенным цветом*  
color <цвет> напр.: color green, color red ...  
color cpk — покрасить атомы по элементам (кислород красным, азот синим и т.д.)  
color structure — покрасить в соответствии с вторичной структурой  
color chain — покрасить каждую цепочку отдельным цветом

*Отцентровать структуру*  
center <выражение>

*Сохранить изображение в графический файл в JPEG-формате*  
write <имя файла>.jpg

**Atom expressions**

*Простые выражения*ser25:a.ca – Cα атом серина с номером 25 цепочки a  
25:a – все атомы остатка номер 25 цепочки a  
25 – все атомы из остатков номер 25 всех цепочек   
:a – все атомы цепочки a  
ser – все атомы всех серинов

*Можно использовать знаки "\*" и "?"*ser25.c? – все углероды 25-х серинов   
ser\*:a.ca – Cα атомы всех серинов цепочки :a

*Заранее определены некоторые интуитивно понятные выражения:*

|  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- |
| at | acidic | acyclic | aliphatic |
| alpha | amino | aromatic | backbone |
| basic | bonded | buried | cg |
| charged | cyclic | cystine | helix |
| hetero | hydrophobic | ions | large |
| ligand | medium | neutral | nucleic |
| polar | protein | purine | pyrimidine |
| selected | sheet | sidechain | small |
| solvent | surface | turn | water |

а также all и none и названия химических элементов: hydrogen, oxygen, nitrogen, carbon etc. Обратите внимание, что backbone употребляется в двух "ипостасях": как команда и как название множества остовных атомов белка, ДНК или РНК.

*Логические операции*nitrogen and not protein — все азоты, не входящие в состав белка   
(protein or dna) and oxygen — все кислороды, входящие в состав белка или DNA   
:a and :c — пустое множество, так как ни один атом не входит сразу и в цепочку :a, и в цепочку :c  
(:a or :c) and ser — серины в цепочках :a и :c

*Оператор within*within(<расстояние>, <множество>)– все атомы на расстоянии не более чем заданная величина (в ангстремах) от указанного множества (включая и атомы самого множества)  
within(5.0,dna) – атомы ДНК и атомы, находящиеся на расстоянии не более 5Å от ДНК  
within(group, <множество>)– все атомы остатков, содержащих хотя бы один атом множества  
within(sequence,"DNA") – атомы белка в участках с последовательностью DNA (т.е. Asp-Asn-Ala).

*Запомнить название группы атомов*define <имя> <выражение>

**Пример 1 работы в программе Jmol**

|  |  |
| --- | --- |
|  | load C:\PDB\1ncx.pdb — загрузить файл restrict none — удалить всё изображение background white — белый фон select all — выделить все (мы указываем программе, что далее будем работать со всеми атомами из PDB файла) 1433 atoms selected! — таков ответ программы (но изображения пока нет!) cartoons — изобразить в виде ленточной модели color group — раскрасить как на рисунке слева |
|  | Ткнём мышкой в изображенную структуру [LYS]91:A.CA #694 -4.405 40.045 7.798    – таков ответ программы restrict 1-91 — скрыть все, кроме остатков с 1 по 91 (и выделить эти остатки) center selected — отцентровать по выделению zoom 250 — изменить размер изображения select all — выделить все (далее мы будем работать со всеми атомами в структуре) color structure — раскрасить по вторичной структуре (спирали красным и т.д.) (раскрашена будет вся структура, в том числе и скрытая ее часть) |
|  | select (72-74,34-38)— выделить остатки 72–73 и 34–38 color green – покрасить выделенное зеленым цветом select asp74 — выделить аспартат 74 8 atoms selected – таков ответ программы wireframe 0.5 – изобразить стержневую модель color cpk – покрасить по элементам (азоты синим, кислороды красным и т.д.) |

**Пример 2 работы в Jmol**

load =1apl – загрузить структуру из банка PDB  
restrict none – скрыть всё изображение  
define needdna dna and within(18.0,:c) – да будет needdna всегда изображать атомы ДНК рядом с цепочкой С (не далее 18Å), …   
define need needdna or :c – … а need — цепочку C вместе с участком ДНК, с которым она контактирует;  
select need — теперь эти атомы (need) ...  
center selected — … разместить в центре изображения;  
select :c and backbone — а остов цепочки C ...  
wireframe 0.4 — … изобразить в виде стержневой модели;  
select needdna — а ДНК вблизи цепочки C ...  
wireframe — … тоже в виде стержневой модели, но самой тоненькой;  
select needdna and c and not backbone — а все атомы цитозинов (оснований) из этой части ДНК ... *(а что бы выделилось, если бы перед* c *было двоеточие?)*  
wireframe 0.2 — … изобразить понятно как;  
define cw :c and within(3.0,dna) — и также да будет cw атомами цепочки C, которые контактируют с ДНК;  
select cw and not backbone — и из них все атомы боковых цепочек ...  
cpk 0.9 — … изобразить шариками,  
cpk off — а, впрочем, не надо.