Краткая документация к Paint Color Scipt ver 5 (PCS\_5).

PCS\_4 запускается из командной строки. После запуска программы появляется приглашение ввода(pcs>>). На данный момент скрипт принимает команды в строго определенных форматах:

1. Создать jmol-скрипт, красящий аминокислоты в белке, начиная с первого введенного номера до последнего:

*120 130 from red to white to green* (покрасить аминокислоты с 120 по 130 без учета цепи градиентом перехода из красного в белый, из белого в зеленый)

1. Чтобы задать свой собственный цвет используется RGB код цвета, записанный в квадратных скобках. Пример:

*120 130 from [130,120,0] to [170,20,50] to [30,40,50]*

1. Пробелы между командными словами обязательны(точнее, строго один пробел). Слово «to» может использоваться неограниченное количество раз, остальные слова – единственный раз. Коды цветов могут повторяться.
2. Чтобы покрасить только определенную цепь необходимо перед номером первой аминокислоты указать обозначение цепи в следующем формате «:Обозначение цепи»:

*:A120 140 from white to green*(покрасить аминокислоты цепи А с 120 по 140 градиентным переходом от белого к зеленому)

1. Чтобы покрасить все аминокислоты в структуре белка, содержащейся в pdb-файле необходимо ввести команду с ключевым словом file в первой позицци, затем через пробел – имя файла. Пример:

*file 4ATE.pdb from red to white*(покрасить все аминокислоты белка градиентным переходом от красного к белому без учета цепи)

1. «!file” вместо «file» означает – покрасить каждую цепь белка по указанному градиенту. Пример:

*!file 4ATE.pdb from red to white*(то же самое, что и предыдущая команда, но выполняется отдельно к каждой цепи, а не всему белку)

1. Для того, чтобы ввести несколько команд используйте после каждой команды “;”:

 *120 130 from [130,120,0] to [170,20,50] to [30,40,50] ;*

*:A120 140 from white to green*

 8) В случае ввода перед командой слова silence после выполнения этой команды в выходной скрипт будет вставлена команда «pause». Для продолжения работы необходимо в Jmol будет необходимо нажать Enter.

 9) В случае ввода команды fileinput, а затем имени файла команды будут взяты из него. При это если после ввода этой команды поставить “;” остается возможность ввести остальные команды напрямую. Пример:

 *fileinput eggs.txt;*

 *120 130 from [130,120,0] to [170,20,50] to [30,40,50]*

10) В версии 6 была интегрирована программа, находящая водяные мостики в белке. Формат команды :

waterbridges [file\_name](имя файла) [accuracy](соответствие водяного мостика идеальному - число от 0 до 1, 0 - наилучшее соответсвие) [RGB-color](цвет, в который красится атом кислорода воды, участвующей в водяном мостике )

Пример

waterbridges 4ATE.pdb 0.5 cyan