

RasMol

Program do wizualizacji struktur cząsteczek białek i kwasów nukleinowych.



Strona domowa:

<http://www.openrasmol.org/>

Adres instrukcji (RaMol Manual)

<http://www.openrasmol.org/doc/rasmol.html>

Tutoriale:

RasMol Tutorial (Gale Rhodes): <http://spdbv.vital-it.ch/TheMolecularLevel/RasTut/index.html>

RasMol Tutorial (John W. Little): <http://www.biochem.arizona.edu/classes/bioc568/rasstart.htm>

RasMol Quick Start (Eric Martz): <http://www.umass.edu/microbio/rasmol/rasquick.htm>

Detailed tutorials on basic commands(Eric Martz):

<http://www.umass.edu/microbio/rasmol/raswhat.htm>

Select Commands in Chime and RasMol (Eric Martz):

<http://www.umass.edu/microbio/rasmol/seleccmd.htm>

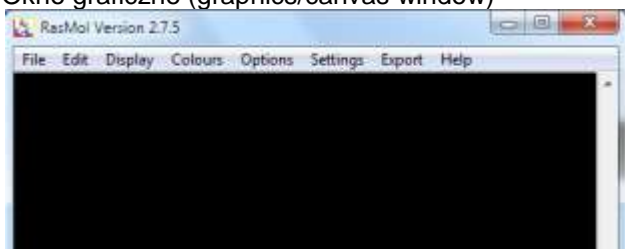
Coulson tutorials:

<http://wbiomed.curtin.edu.au/biochem/tutorials/tutorials.html>

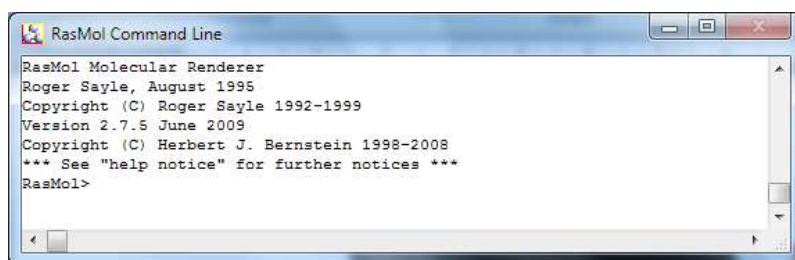
<http://wbiomed.curtin.edu.au/biochem/tutorials/coulson/coulson.html>

Okna RasMola

Okno graficzne (graphics/canvas window)



Wiersz poleceń (command line/terminal)








Menu (dla wersji 2.7.5)!!!!

File	Edit	Display	Colours	Options	Settings	Export	Help
Open ... Information Close Print Print Setup Exit	Select all Cut Copy Paste Delete	Wireframe Backbone Sticks Spacefill Ball & Stick Ribbons Strands Cartoons Molecular Surface	Monochrome CPK Shapely Group Chain Temperature Structure User Model Alt	Slab Mode <input checked="" type="checkbox"/> Hydrogens Hetero Atoms <input checked="" type="checkbox"/> Specular Shadows Stereo Labels	<input checked="" type="checkbox"/> Pick Off Pick Ident Pick Distance Pick Monitor Pick Angle Pick Torsion Pick Label Pick Centre Pick Coord Pick Bond Rotate Bond <input checked="" type="checkbox"/> Rotate Mol Rotate All	BMP ... GIF ... IRIS RGB ... PPM ... Sun Raster... PostScript... PICT... Vector PS ... Molscript ... Kinemage ... POVRay 3 ... VRML ... Ramachandran ... Raster3D ... RasMol Script ...	About RasMol... User Manual... Register Donate



Działanie myszy

(klawiatura+) Przycisk myszy	Akcja
Lewy 	Rotacja XY
Prawy 	Translacja XY
(L-Shift+) Lewy 	Zoom
(L-Shift+) Prawy 	Rotacja Z
(L-Ctrl+) Lewy 	Slab Plane (płaszczyzna tnąca równoległa do ekranu)

Jednostki w RasMolu

Niektóre z poleceń RasMola wymagają podania parametru (długość, promień, odległość, itd).

RasMol rozpoznaje dwie jednostki: Å – liczba zawierająca kropkę dziesiętną, lub tzw. jednostkę RasMola liczba całkowita $1=1/250 \text{ Å}$, czyli $100 = 1.2 \text{ Å}$

Komendy RasMola

backbone	background	bond	bulgarian	cartoon	centre
chinese	clipboard	colour	colourmode	connect	cpk
cpknew	defer	define	depth	dots	echo
english	execute	exit	french	hbonds	help
italian	japanese	label	load	map	molecule
monitor	notoggle	pause	pause	print	quit
record	refresh	renumber	reset	restrict	ribbons
rotate	save	script	select	set	show
slab	source	spacefill	spanish	ssbonds	star
stereo	strands	structure	surface	trace	translate
unbond	wireframe	write	zap	zoom	

Podstawowe komendy

Podstawowe komendy dotyczą wczytania, zapisania w wybranym formacie, zamknięcia programu itd. (Równoważne opcją z menu File, Edit i Export)

load {<format>} <filename> wczytanie pliku ze współzrędnymi cząsteczki, program dopuszcza wczytanie 20 struktur

format - formaty plików rozpoznawanych przez RasMola. Domyślnie: 'PDB', 'CIF', 'mmCIF'
pdb (Protein Data Bank format), mdl (Molecular Design Limited's MOL), alchemy (Tripos' Alchemy), mol2 (Tripos' Sybyl Mol2), charmm (CHARMm), xyz (MSC's XMOl XYZ), mopac (J. P. Stewart's MOPACT), cif (IUCr CIF lub mmCIF).

Przykład: **load pdb „c:\struktury\6lyz.pdb”**
load „c:\struktury\6lyz.pdb”

exit zakończenie pracy z programem

zap usunięcie cząsteczki i przywrócenie parametrów domyślnych

molecule <numer> wybranie jednej z 5 ostatnio wczytanych cząsteczek. Nawet jeśli wszystkie wczytane cząsteczki są widoczne i można nimi poruszać, tylko jedna wybrana może mieć modyfikowany wygląd.

write {<format>} <filename> zapisanie obrazu w formacie graficznym

format – gif (domyślnie)

bmp, iris, ppm, ras, ps, epsf, monops, pict, vectps

- pliki tekstowe czytane przez różne programy graficzne

script (plik tekstowy zawierający skrypt z poleceniami RasMola)

molscript, kinemage, povray (POVRay 2), vrml,

- pliki z wartościami kątów torsyjnych phi i psi

phipsi, ramachan i RDF i RamachandranDataFile (phi-psi jako kolumny czytane przez gnuplot), RPP i RamachandranPrinterPlot (phi-psi jako dane dla drukarki).

Przykład: **write script 1CYO_hem**
write gif 1CYO.gif

script <filename> sekwencyjne czytanie i wykonywanie poleceń zawartych w pliku skryptowym.

save {<format>} <filename> zapisuje aktualnie zaznaczony zbiór atomów do pliku o wybranym formacie
format – pdb, mdl, alchemy, xyz

set transparent <filename> - zapisuje obraz w formacie gif z przezroczystym tłem

clipboard – kopiuje obraz do schowka

Zaznaczanie

select <wyrażenie> pozwala na zaznaczenie/wybranie regionu cząsteczki

restrict <wyrażenie> pozwala na zaznaczenie regionu cząsteczki i „wyłączenie” niewybranych elementów
<wyrażenie> definiuje zbiór atomów, który mają zostać zaznaczoney.

Wyrażenia

Wyrażenie jest unikalną definicją zbioru atomów należących do cząsteczki. Wyrażenie może składać się z tak zwanych wyrażen prymitywnych (prostych), zbiorów predefiniowanych, wyrażen zawierających porównania (<, >, =, <>, <=, >=), wyrażenia zawierającego **within**, oraz kombinacji tych elementów połączonych operatorami logicznymi **and**, **not** i **or**. Stosowanie nawiasów ułatwia ustalenie prawidłowej konstrukcji logicznej.

Wyrażenia prymitywne

- numer aminokwasu/nukleotydu w sekwencji (we wszystkich łańcuchach): **1, 2, 50**
- zakres, dolna i górna granica w sekwencji (we wszystkich łańcuchach): **3-15**
- trójliterowa nazwa aminokwasu (wszystkie aminokwasy o tej nazwie): **ser, Ala**
- konkretny aminokwas w sekwencji: **gly70, asp34,...**
- konkretny aminokwas, konkretnego łańcucha: **gly30A, his32B, Pro13:1**
- konkretny atom (?,* zastępują dowolny znak bądź ciąg znaków): ***.CA, hem.fe, arg.c??**

Zbiory predefiniowane

Zbiory predefiniowane to wyrażenia określające grupę atomów, aminokwasów, kwasów nukleinowych lub fragmentów cząsteczki o pewnych wspólnych cechach.

RasMol pozwala na definiowanie własnego zbioru:

define <identyfikator> <wyrażenie> zbiór zdefiniowany przez użytkownika

Wyrażenia dotyczące nukleotydów:

- at** – adenina i tymina (a or t)
- cg** – cytozyna i guanina (c or g)
- nucleic** – atomy wszystkich nukleotydów
- purine** – wszystkie a i g (nucleic and not pyrimidine)
- pyrimidine** – wszystkie c i t

nazwy nukleotydów rozpoznawane przez RasMol:

a, c, g, t, U, +U, I, 1MA, 5MC, OMC, 1MG, 2MG, M2G, 7MG, OMG, YG, H2U, 5MU, PSU

wyrażenia dotyczące aminokwasów

amino	protein	acidic	acyclic	aliphatic	aromatic
basic	charged	cyclic	cystine	hydrophobic	large
medium	neutral	polar	positive	small	buried

Podsumowanie dotyczące własności aminokwasów

	Ala	Arg	Ans	Asp	Cys	Glu	Gln	Gly	His	Ile	Leu	Lys	Met	Phe	Pro	Ser	Thr	Trp	Tyr	Val
	A	R	N	D	C	E	Q	G	H	I	L	K	M	F	P	S	T	W	Y	V
acidic				x		x														
acyclic	x	x	x	x	x	x	x	x		x	x	x	x			x	x			x
aliphatic	x							x		x	x									x
aromatic									x					x				x	x	
basic		x							x			x								
buried	x				x					x	x		x	x				x		x
charged		x		x		x			x			x								
cyclic									x					x	x			x	x	
hydrophobic	x							x		x	x		x	x	x			x	x	x
large		x				x	x		x	x	x	x	x	x				x	x	
medium			x	x	x										x		x			x
neutral	x		x		x		x	x		x	x		x	x	x	x	x	x	x	x
polar		x	x	x	x	x	x		x			x				x	x			
positive		x							x			x								
small	x							x								x				
surface		x	x	x		x	x	x	x			x			x	x	x		x	

Wyrażenia związane ze strukturą przestrzenną i ośrodkiem

bonded	mainchain	sidechain	backbone	helix	sheet
turn	alpha	hetero	hydrogen	ions	ligand
selected	solvent	water			

Wyrażenia zawierające „within”

Wyrażenie zawierające within pozwala na zaznaczenie kolejnej grupy atomów, wokół innej. Pierwszy parametr towarzyszący konstrukcji z within, to promień (w jednostkach RasMola lub Å), drugi obiekt – centrum działania. Np.

within (7.0, ser43) – w promieniu 7.0 Å wokół Ser43

within (300, hem.fe) – w promieniu 300 jednostek wokół atomu żelaza należącego do grupy hemowej

within (3.5, backbone) – w promieniu 3.5 Å wokół szkieletu.

Operatory porównania

Operatory porównania:

> większy od, < mniejszy od, = równy, <> różny, <= mniejszy równy, >= większy równy, służą do konstruowania wyrażień z parametrami cząsteczek, które mogą być wyrażone liczbami np.:

elmno – liczba atomowa (numer pierwiastka), **atmno** – numer atomu, **resno** – numer aminokwasu/nukleotydu w sekwencji, **radius** - promień atomu w reprezentacji spacefill, **temperature** – anizotropowa temperatura β zapisana w pliku PDB.Np.:

resno < 23

temperature >= 900


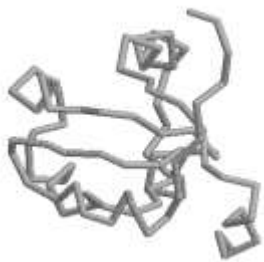
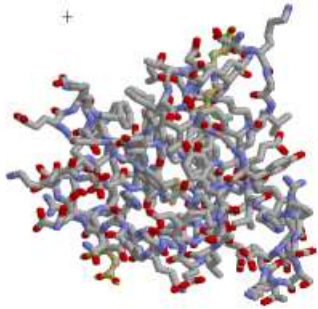
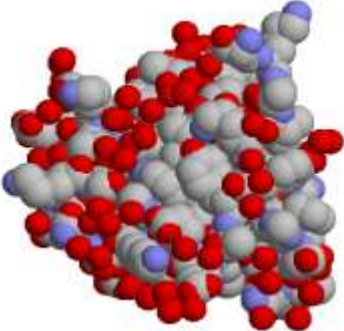
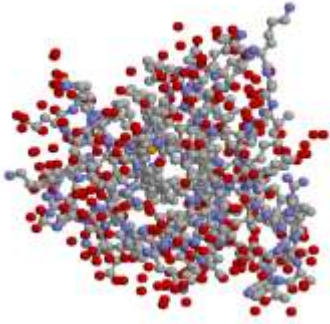



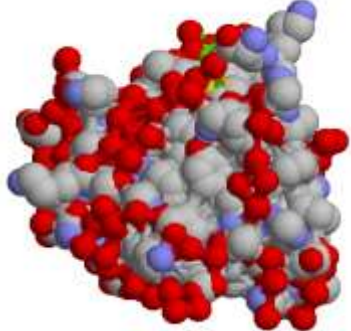
atomno == 487

Przykłady wyrażień (stosowanych z poleceniami select i restrict)

*	wszystkie atomy
cys	atomy cystein
hoh	atomy cząsteczek wody
as?	atomy w aminokwasów Asn i Asp
*120	atomy reszt 120 we wszystkich łańcuchach
*p	wszystkie atomy w łańcuchu P
*.n?	wszystkie azoty
cys.sg	atom siarki we wszystkich cysteinach
ser70.c?	atom węgla w serynie 70
hem*p.fe	atom żelaza w grupie hemowej łańcucha P
*/4	wszystkie atomy w modelu 4
within (3.5, backbone)	wszystkie atomy w promieniu 3.5 Å wokół szkieletu
hetero and not hoh	wszystkie heteroatomy z wyjątkiem cząsteczek wody
backbone and not helix	wszystkie węgle CA z wyjątkiem należących do helis
within(8.0, ser70)	wszystkie atomy w promieniu 8.0 Å wokół seryny 70
not (hydrogen or hetero)	
not *.FE and hetero	

Prezentacja cząsteczki

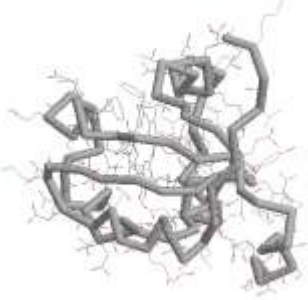

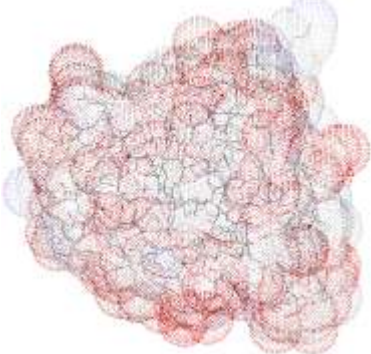

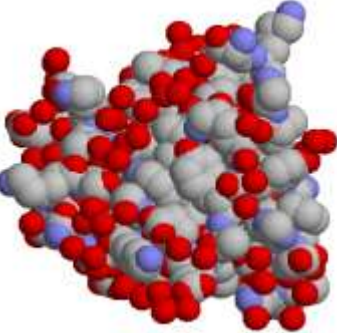

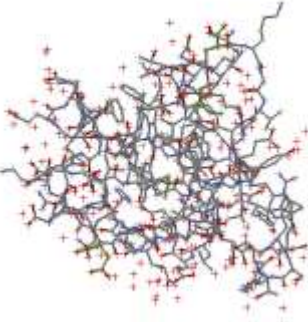
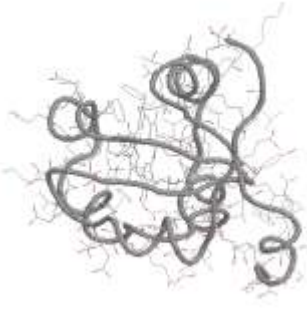
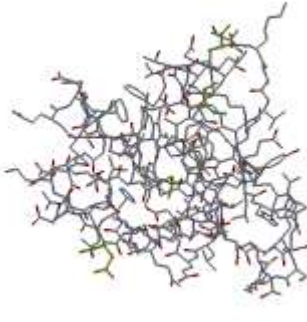
Opcje Menu>Display

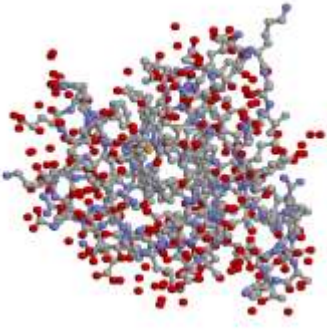
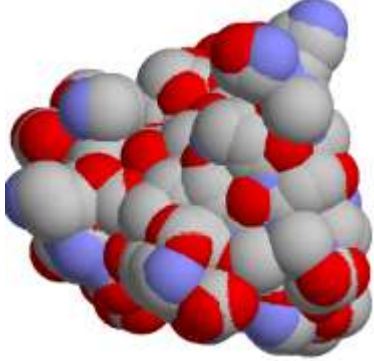
		
Wireframe	Backbone	Sticks
		
Spacefill	Ball & Stick	Ribbons
		
Strands	Cartoons	Molecular Surface

Komendy wiersza poleceń

Polecenia zmiany prezentacji dotyczą wybranej grupy atomów (poleceniem **select** lub **restrict**).
Domyślnie – wszystkie atomy.

backbone	bond	Cartoon	connect
dots	hbonds	Label	ribbons
spacefill	ssbonds	Star	strands
structure	Surface	trace	unbond
wireframe			

		
<p>backbone 100 backbone {<boolean>} backbone <value> backbone dash</p>	<p>cartoon cartoon {<number>}</p>	<p>dots dots {<boolean>} dots {<value>}</p>
		
<p>ribbons ribbons {<boolean>} ribbons <value></p>	<p>spacefill spacefill {<boolean>} spacefill temperature spacefill user spacefill <value></p>	<p>strands strands {<boolean>} strands <value></p>
		
<p>star 100 star {<boolean>} star temperature star user star <value></p>	<p>trace trace {<boolean>} trace <value> trace temperature</p>	<p>wireframe 20 wireframe {<boolean>} wireframe <value> {<value>}</p>

		
<p>„Ball&stik“: spacefill 100 wireframe 40</p>	<p>surface solvent 500 (restrict amino)</p>	

bond

bond <number> <number> +
bond <number> <number> pick
bond rotate {<boolean>}

connect

connect {<boolean>}

hbonds

hbonds {<boolean>}
hbonds <value>

label

label {<string>}
label <boolean>
<string>:
%a Atom Name
%b %t B-factor/Temperature
%c %s Chain Identifier
%e Element Atomic Symbol
%i Atom Serial Number
%n Residue Name
%r Residue Number
%M NMR Model Number (with leading "/")
%A Alternate Conformation Identifier (with leading ";")

ssbonds

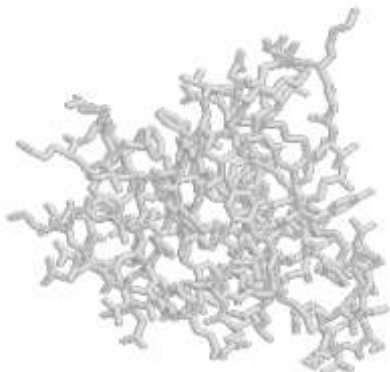
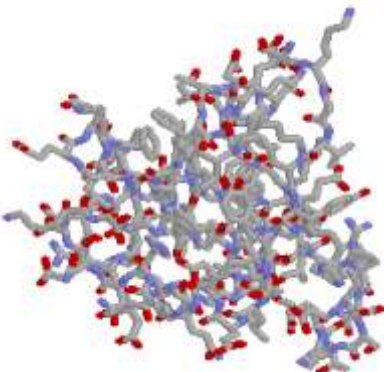
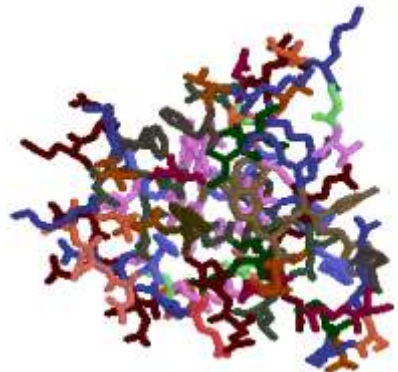
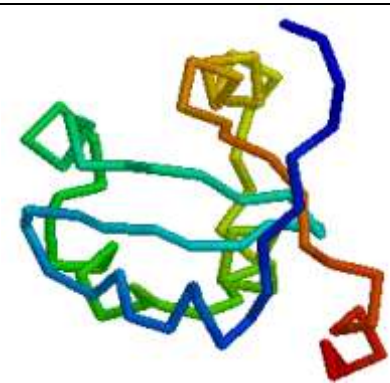
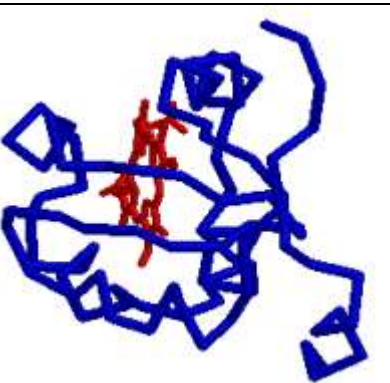
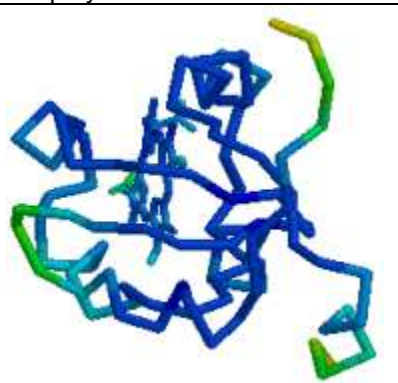
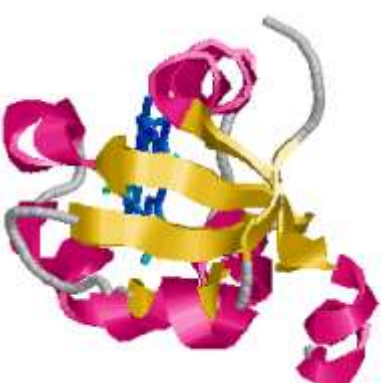
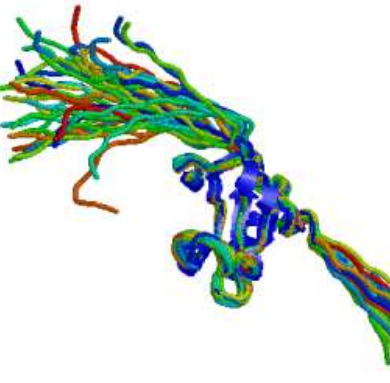
ssbonds {<boolean>}
ssbonds <value>

unbond

unbond <number> <number>
unbond

Kolorowanie

Opcje kolorowania Menu>Colours

		
Monochrome	CPK	Shapely
		
Group	Chain	Temperature
		
Structure	Model	User, Alt

Komendy kolorowania z wiersza poleceń

background <color> polecenie kolorowania tła

colour [object] <colour> polecenie kolorowania obiektu (domyślnie zaznaczonej grupy atomów)

Kolory

Kolor w RasMolu może być podany w postaci:

- nazwy (kolory predefiniowane),
- tripletu RGB ([red, green, blue] – nawias kwadratowy z trzema liczbami z zakresu 0..255 oddzielonymi przecinkami)
- nazwy cech (kolorowanie według własności grupy atomów)

Kolory predefiniowane i ich triplety RGB

Orange	[255,165,0]	Grey	[125,125,125]	Red	[255,0,0]
Blue	[0,0,255]	SeaGreen	[0,250,109]	Gold	[255,156,0]
Pink	[255,101,117]	Green	[0,255,0]	Magenta	[255,0,255]
BlueTint	[175,214,255]	SkyBlue	[58,144,255]	HotPink	[255,0,101]
PinkTint	[255,171,187]	GreenBlue	[46,139,87]	Yellow	[255,255,0]
Brown	[175,117,89]	Violet	[238,130,238]	YellowTint	[246,246,117]
Purple	[160,32,240]	GreenTint	[152,255,179]	White	[255,255,255]
Cyan	[0,255,255]				

Kolorowanie według własności:

cpk	amino	shapely	group	chain	structure
temperature	charge	user			

CPK - sposób kolorowania atomów (i wiązań) zgodnie z konwencją, według, której pewnym najczęściej występującym atomom przypisuje się konkretne kolory.

amino - sposób kolorowania aminokwasów zgodnie przynależnością do grupy o odpowiednich własnościach.

shapely – sposób kolorowania aminokwasów – każdemu aminokwasowi przypisany jest unikalny kolor

group – kolorowanie według kierunku łańcucha od N-końca (niebieski) do C-końca (czerwony), lub od 5' do 3'

chain – kolorowanie według numeru łańcucha w cząsteczkach składających się z więcej niż jednego łańcucha

struture – kolorowanie jednolicie elementów struktury II-rzędowej (helisy, β -struktury, skręty)

temperature – kolorowanie anizotropowej temperatury β , zapisanej w pliku PDB, odzwierciedlającej ruchliwość łańcucha

charge

user

CPK

atom	kolor	RGB
węgiel	light grey	[200,200,200]
tlen	red	[240,0,0]
wodór	white	[255,255,255]
azot	sky blue	[143,143,255]
Siarka	yellow	[255,200,50]
Fosfor	orange	[255,165,0]
Chlor	green	[0,255,0]
brom, cynk	brown	[165,42,42]
Sód	blue	[0,0,255]
Żelazo	orange	[255,165,0]
Magnez	forest green	[34,139,34]
Wapno	dark grey	[128,128,144]
Nieznany	deep pink	[255,20,147]

Amino

Aminokwas	kolor	RGB
ASP, GLU	Bright Red	[230,10,10]
LYS, ARG	Blue	[20,90,255]
CYS, MET	Yellow	[230,230,0]
SER, THR	Orange	[250,150,0]
PHE, TYR	Mid Blue	[50,50,170]
ASN, GLN	Cyan	[230,230,0]
GLY	Light Grey	[235,235,235]
LEU, VAL, ILE	Green	[15,130,15]
ALA	Dark Grey	[200,200,200]
TRP	Purple	[180,90,180]
HIS	Pale Blue	[130,130,210]

PRO	Flesh		[220,150,130]
Others	Tan		[190,160,110]

Obiekty:

atoms	bonds	backbone	ribbons	labels	hbonds
ssbonds	dots	axes	ribbons1	ribbons2	

Przykłady:

background white
background [255,101,117]

color yellow
color hbonds red
color backbone group

Parametry wewnętrzne

Parametry wewnętrzne RasMola zmieniane są poleceniem **set**:

set <parameter> {<option>}

ambient	axes	Background	backfade
bondmode	bonds	Booundbox	cartoons
cisangle	display	Fontsize	fontstroke
hbonds	hetero	Hourglass	hydrogen
kinemage	menus	Monitor	mouse
picking	play...	Radius	record...
shadepower	shadow	Slabmode	solvent
specular	specpower	Ssbonds	stereo
strands	transparent	Unitcell	vectps
write			

Przykład:

set hbonds backbone
set hbonds sidechain

