





RasMol

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

Adres instrukcji (RaMol Manual): <http://www.openrasmol.org/doc/rasmol.html>

	(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 Å, czyli 100 = 1.2 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	

Parametry wewnętrzne

Parametry wewnętrzne RasMola zmieniają się 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			

Np.: **set hbonds backbone**

set hbonds sidechain

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**.

Wyrażenia prymitywne

1, 2, 50,3-15 - numer aminokwasu/nukleotydu w sekwencji (we wszystkich łańcuchach)

ser, Ala, gly70, asp34 - trójliterowa nazwa aminokwasu

gly30A, his32B, Pro13:1 - konkretny aminokwas, konkretnego łańcucha

***.CA, hem.fe, arg.c??** - konkretny atom (?,* zastępują dowolny znak bądź ciąg znaków)

*****, **all** - wszystkie atomy

as? - wszystkie ASP i ASN

***.n?** - wszystkie azoty

***I4** - wszystkie atomy w modelu 4

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

within (300, hem.fe) - wszystkie atomy w promieniu 300 jednostek wokół żelaza należącego do grupy hemowej

within (8.0, ser70) - wszystkie atomy w promieniu 8.0 Å wokół seryny 70

Zbiory predefiniowane

define <identifier> <expression> zbiór zdefiniowany przez użytkownika

Zbiory predefiniowane: wyrażenia dotyczące aminokwasów

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

Zbiory predefiniowane: wyrażenia dotyczące kwasów nukleinowych

At	cg	nucleic	purine	pyrimidine	a,c,g,t,u
+U, I, 1MA, 5MC, OMC, 1MG, 2MG, M2G, 7MG, OMG, YG, H2U, 5MU, PSU					

Zbiory predefiniowane: wyrażenia związane ze strukturą

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

Operatory porównania

> większy od, < mniejszy od, = równy, <> różny, <= mniejszy równy, >= większy równy, służą do konstruowania wyrażeń 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.

Przykłady

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
not (hydrogen or hetero)
not *.FE and hetero
resno < 23
temperature >= 900

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			

Obiekty:

atoms	bonds	backbone	ribbons	labels	hbonds
ssbonds	dots	axes	ribbons1	ribbons2	

background <color> polecenie kolorowania tła

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

background [255,101,117]

color hbonds red
color backbone group

Podstawowe komendy

load <format> <filename> wczytanie pliku ze współrzędnymi cząsteczki,
<format>- formaty plików rozpoznawanych przez RasMol: Pdb, mmCIF, mdl, alchemy, mol2, charmm, xyz, mopac, cif.

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: script (plik tekstowy zawierający skrypt z poleceniami RasMola)
molscrip, kinemage, povray, vrml,
- pliki z wartościami kątów torsyjnych phi i psi: phipsi, ramachan i RDF i RamachandranDataFile, RPP i RamachandranPrinterPlot.

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

load „c:\struktury\6lyz.pdb”

write script 1CYO_hem

write gif 1CYO.gif

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

save <format> <filename> zapisuje aktualnie zaznaczony zbiór atomów do pliku o wybranym formacie (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.

Prezentacja cząsteczki

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			