

Selección de los puntos más interesantes del tutorial de manejo del Rasmol

1.- Para evitar retectar los comandos anteriores y posteriores se puede usar CTRL.+P (anterior) y CTRL.+N (Siguiente). También se pueden usar los cursores (como en DOS).

2.-

Backbone dash = El esqueleto carbonado aparece en líneas discontinuas y finísimo. Interesante cuando queramos destacar las cadenas laterales.

3.-

Background white = Para que el fondo sea blanco. Suele interesar en presentaciones, pero es incómodo para trabajar (el blanco deslumbra).

4.-

Clipboard = Guarda la imagen en el portapapeles.

5.-

Dots = Crea radios de Van der Waals de puntos.

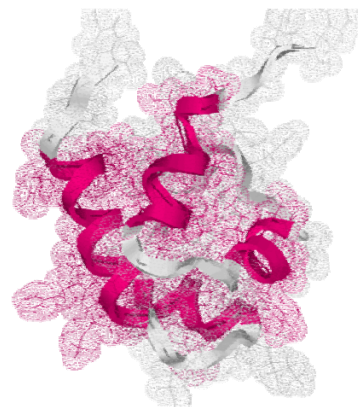


6.-

Label = Etiqueta de cada átomo o aa.

Existen múltiples opciones :

%a	Átomo
%b %t	Factor de temperatura
%c %s	Identificador de cadena
%e	Símbolo atómico del elemento
%i	Número del átomo
%m	Código de aa de una letra
%n	Nombre de aa de tres letras
%r	Número del residuo



Se escriben tras label con el % (EJ: Label %m %r). **Y76**

7.-

Slab = Hace desaparecer un % de la figura detrás del fondo. Escribiendo Slab y una cifra, cuanto menor sea ésta, más figura quedará oculta detrás del fondo (desplazamiento en el eje Z). 0 muestra toda la figura y 100 la oculta totalmente.

8.-

Monitor= Permite dar la distancia en Armstrongs entre dos átomos. Útil para el FRET. Para ver la distancia entre el átomo 1 y el 100 se escribe:

Monitor 1 100

9.-

Restrict = Limita la parte de la molécula que queramos, bien para pintarla o para mostrarla. Tiene la misma función **Select**, donde "select all" selecciona toda la molécula.

10.-

Save = Permite guardar la figura creada. Por defecto se guarda como pdb. Si especificamos otra cosa podemos variar la extensión:

```
save <filename>
save alchemy <filename>
save mdl <filename>
```

Lo guarda en el directorio Rasmol, aunque a veces no se ve cuando tratas de abrirlo.

11.-

Script= Permite con un editor de texto crear un archivo que, al abrirlo, haga que se ejecute una lista de instrucciones. Abre la posibilidad de usarse para crear pequeñas “películas” de la molécula.

12.-

Show = Parámetro informativo:

Show information= Nos da la información básica de la molécula (nombre, número de átomos...).

Show sequence= Nos da la secuencia.

Show symmetry= Nos da la simetría cristalográfica (si la hubiera).

13.-

Ssbonds= Permite mostrar los enlaces disulfuro (Ssbonds on) y hacer que no sean visibles (Ssbonds off). Igual ocurre con **Hbonds**.

14.-

Structure = Este parámetro dice el número de unidades estructurales que forman la molécula.

15.-

Trace= Une de una manera suave y redondeada los carbonos alfa de los aa.

16.-

Select (selecciona la parte de la molécula). A continuación se selecciona el tipo de display a elegir y el tamaño. Finalmente se colorea al gusto.

```
Ej: Select arg;select tyr68; Select tyr68.ca;Select1-22;select helix;select backbone and not
helix.
Spacefill 20
Colour cyan
```

Más ejemplos del uso del select:

*	Todos los átomos
cys	Átomos en cisteínas
hoh	Átomos en moléculas de agua
as?	Átomos en Asp y Asn
*120	Átomos del residuo 120 de todas las cadenas
*p	Átomos de la cadena P
*.n?	Átomos de Nitrógeno
cys.sg	Átomos de azufre en las cisteínas
ser70.c?	Átomos de carbono en la serina 70
hem*p.fe	Átomos de hierro de los grupos hemo de la cadena P
[SO4]	Grupos sulfato. Entre [] porque contiene números.
Hydrohobic	Aminoácidos hidrofóbicos
Polar	Selecciona los aa polares
Acid	Selecciona aa ácidos
Basic	Selecciona aa básicos
Neutral	Selecciona aa neutros
Cyclic	Selecciona aa cíclicos (incluyendo Pro).

Aromatic	Selecciona aa cíclicos (excepto Pro).
Acyclic	Selecciona aa no cíclicos
Aliphatic	Ala, Gly, Ile, Leu y Val
Backbone	Selecciona los átomos del enlace peptídico.
Sidechain	Selecciona los átomos de las cadenas laterales
Surface	Selecciona los aa que tienen preferencia por estar expuestos al solvente, no lo que están expuestos en esta proteína.
Buried	Selecciona los aa que tienen preferencia general por estar enterrados en la proteína.
Cystine	Selecciona las Cys que forman parte de un enlace de hidrógeno.
Charged	Selecciona los aa cargados
Helix	Selecciona los aa que forman parte de hélices alfa
Sheet	Selecciona los aa que forman parte de una lámina beta
Turn	Selecciona los aa que forman parte de giros
Hydrogen	Selecciona los hidrógenos y deuterios
Hetero	Selecciona los heteroátomos de la molécula
Ions	Selecciona los iones
Ligand	Selecciona los ligandos
Large	Selecciona los aa de gran tamaño
Medium	Selecciona los aa medianos
Small	Selecciona los aa de pequeño tamaño

17.-

Set

Set ambient	De 0 a 100 varía la luz que ilumina la molécula. Más de 50 deslumbra. 40 da un buen contraste.
Set axes	On pinta unos ejes X,Y,Z . Off los quita.
Set fontsize	Determina el tamaño de los caracteres. De 8 a 32.
Set picking angle	Da el ángulo que hay entre tres átomos. Tras escribir este comando, basta pinchar en cada uno de los tres átomos para tener este valor.
Set picking torsion	Da el valor de la torsión entre cuatro átomos. Funciona como el anterior.
set picking label	Permite marcar selectivamente un átomo o un residuo (según esté seleccionado en label %). Escribiéndolo permite marcar cada elemento que se pinche con el ratón, o cuando están todos seleccionados elimina la etiqueta cuando pincha el elemento.
Set shadow	Da sombra a la figura (on) o se la quita(off). Sólo usar al final del manejo de la misma, porque ralentiza mucho el manejo.
Set strands	Determina el número de líneas que forman el "strand". Valores permitidos= 1,2,3,4,5 y 9.

18.-

Colour o color= Tras seleccionar, permite colorear al gusto. Hay una serie de colores predeterminados, pero los demás se pueden crear mediante combinaciones de los tres colores primarios (entre paréntesis separados por comas). Los predeterminados son los siguientes:

blue	[0,0,255]	black	[0,0,0]
cyan	[0,255,255]	green	[0,255,0]
greenblue	[46,139,87]	magenta	[255,0,255]
orange	[255,165,0]	purple	[160,32,240]
red	[255,0,0]	redorange	[255,69,0]

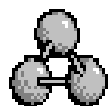
violet	[238,130,238]	white	[255,255,255]
yellow	[255,255,0]		

Colour temperature= Colorea cada residuo según se movilidad (más claros los estáticos y más oscuros los móviles, aunque las diferencias no son muy apreciables).

Colour hbonds type= Con “hbonds on” seleccionando esta opción los enlaces de hidrógeno aparecerán con un color relacionado con su longitud:

Offset	Colour	Triple
+2	white	[255,255,255]
+3	magenta	[255,0,255]
+4	red	[255,0,0]
+5	orange	[255,165,0]
-3	cyan	[0,255,255]
-4	green	[0,255,0]
default	yellow	[255,255,0]

De esta manera podremos aproximar la estructura secundaria, ya que los que forman alfa hélices son rojos, los de las láminas son amarillos y los de los giros son magenta.



RasMol v2.5

Quick Reference Card

(c) Copyright 1994 Roger Sayle

Mouse Buttons

Clicking on an atom identifies that atom in the command window. Moving the mouse whilst holding mouse buttons and/or control keys manipulates the molecule. The default bindings are described below.

Left Button	Rotate X-Y
Right Button	Translate X-Y
Shift Left Button	Zoom
Shift Right Button	Rotate Z
Control Left Button	Z-Clipping (Slab)

General Commands

load [format] <filename> Load a molecule
pdb Brookhaven Protein Databank
mdl Molecular Design Limited's Mol file
mol2 Tripos' Sybyl Mol2 file format
alchemy Tripos' Alchemy file format
charmm CHARMM format card file
xyz MSC's XMOL XYZ file format

exit Exit from RasMol
quit

help [topic [subtopic]] Display on-line help topic

select <expression> Update part of molecule
restrict <expression> Display only part of mol.

set bondmode [mode] Change bond selection

script <filename> Execute file of commands

zap Delete molecule

Display Commands

wireframe [boolean] Display wireframe
wireframe <value> Display stick bonds

spacefill [boolean] Display spacefill spheres
spacefill <value> Specify atom sphere radius
spacefill temperature
spacefill user

backbone [boolean] Display alpha backbone
backbone <value> Specify backbone radius

ribbons [boolean] Display solid ribbons
ribbons <value> Specify ribbon width

strands [boolean] Draw ribbon as strands
strands <value> Specify ribbon width
set strands <value> Number of ribbon strands

label [boolean] Draw default atom labels
label <string> Label with arbitrary text
set fontsize <value> Set label font height

ssbonds [boolean] Display disulphide bonds
ssbonds <value> Specify ssbond radius

set ssbonds backbone SSBonds between alphas

set ssbonds sidechain	SSBonds between sulphurs
hbonds [boolean]	Display hydrogen bonds
hbonds <value>	Specify hbond radius
set hbonds backbone	HBonds between alphas
set hbonds sidechain	HBonds donor/acceptor
dots [boolean]	Display dot surface
dots <value>	Specify dot density
set solvent [boolean]	VDW or solvent surface
set radius <value>	Specify probe sphere rad.
set axes [boolean]	Display co-ordinate axes
set boundbox [boolean]	Display bounding box
set unitcell [boolean]	Display crystal unit cell

Colour Commands

colour [object] <colour> Colour representation

Objects:

atoms	bonds	backbone
ribbons	labels	hbonds
ssbonds	dots	axes
ribbons1	ribbons2	

Predefined Colours:

blue	black	cyan	green
greenblue	magenta	orange	purple
red	redorange	violet	white
yellow			

Atom Colour Schemes:

cpk	amino	shapely
group	chain	structure
temperature	charge	user

colour hbonds type Colour hbonds by offset
colour dots potential Display potential surface

Manipulation Commands

rotate <axis> [-] <value> Rotate molecule
translate <axis> [-] <value> Translate molecule
zoom [boolean] Scale molecule
zoom <value> Specify magnification
slab [boolean] Enable/disable slabbing
slab <value> Move Z-clipping plane
centre [expression] Set centre of rotation
reset Initial transformation

Atom Expressions

Predefined Sets: alpha
hydrophobic
Residue Ranges: 3,16,12
9-20
Boolean Operators: backbone and not alpha
ligand or 196-199
Primitive Expressions: cys, glu, arg, as?
ser70a, **p, glu24:1
hem*p.fe, *.sg
Comparison Operators: atomno=4,atomno=6
temperature>=900
Within Expressions: within(8.0,ligand)

Predefined Sets

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

define <identifier> <expression> User-defined sets

Rendering Commands

background <colour>	Set background colour
set ambient [value]	Depth-cueing/lighting
set shadows [boolean]	Enable/disable shadows
set specular [boolean]	Enable atom highlights
set specpower [value]	Control atom 'shininess'

Export Commands

write [format] <filename>	Output image file
gif	CompuServe GIF format
ps, epsf	Encapsulated PostScript
monops	Monochrome PostScript
vectps	'Cartoon' PostScript
bmp	Microsoft Bitmap format
pict	Apple 'PICT' file
ppm	Portable Pixmap
sun, sunrle	Sun Rasterfile
set vectps <boolean>	Enable cartoon outlines
write script <filename>	Generate RasMol script
write molscript <filename>	Output MolScript script
write kinemage <filename>	Output Kinemage file
set kinemage <boolean>	Set Mage file detail

Misc. Commands

structure	DSSP secondary structure
connect [boolean]	Recalculate connectivity
renumber	Sequentially number chains
show information	Display molecule statistics
show sequence	Display molecule sequence
show symmetry	Display crystal space group
set mouse rasmol	Default mouse bindings
set mouse quanta	Polygen's Quanta bindings
set mouse insight	Biosym's Insight II bindings

Command Line Editing

In addition to the cursor keys, the following 'emacs' control keys may be used to edit the command line.

Ctrl-H / Ctrl-D	Delete previous/next character
Ctrl-B / Ctrl-F	Move backward/forward a character
Ctrl-A / Ctrl-E	Move to beginning/end of line
Ctrl-P / Ctrl-N	Display previous/next history

Colour Schemes

CPK Atom Colours

Carbon	light grey	[200,200,200]
Oxygen	red	[240,0,0]
Nitrogen	light blue	[143,143,255]
Hydrogen	white	[255,255,255]
Sulphur	yellow	[255,200,50]
Phosphorous	orange	[255,165,0]
Chlorine	green	[0,255,0]
Calcium, Metals	dark grey	[128,128,144]
Unknown	deep pink	[255,20,147]

Amino Acid Colours

ASP, GLU	bright red	[230,10,10]
CYS, MET	yellow	[230,230,0]
LYS, ARG	blue	[20,90,255]
SER, THR	orange	[250,150,0]
PHE, TYR	mid blue	[50,50,170]
ASN, GLN	cyan	[0,220,220]
GLY	light grey	[235,235,235]
LEU, VAL, ILE	green	[15,130,15]
ALA	dark grey	[200,200,200]
TRP	pink	[180,90,180]
HIS	pale blue	[130,130,210]
PRO	flesh	[220,150,130]

Secondary Structure Colours

Alpha Helix	magenta	[240,0,128]
Beta Sheet	yellow	[255,255,0]
Turns	pale blue	[96,128,255]
Other	white	[255,255,255]

Hydrogen Bond Type Colours

Offset +2	white	[255,255,255]
Offset +3	magenta	[255,0,255]
Offset +4	red	[255,0,0]
Offset +5	orange	[255,165,0]
Offset -3	cyan	[0,255,255]
Offset -4	green	[0,255,0]
default	yellow	[255,255,0]