



Movimentos do mouse

Clicar em um átomo fornece informações na janela do console. Essas informações são explicadas em detalhes abaixo.



Girar em os eixos XY:



Ampliar e fora:



Traduzir a Molécula:



Girar em o eixo Z:



Formatos de exibição

estrutura de arame (exibe ligações de bastão)

wireframe <valor> (exibe ligações de bastão com espessura específica)

exemplo: **estrutura de arame 1.0**

preenchimento de espaço (exibe átomos como esferas com raios atômicos iguais ao seu raio de Van der Waals)

exemplo: **preenchimento de espaço**

espaço preenchimento <valor> (exibe átomos como esferas com raio específico)

exemplo: **preenchimento de espaço 1.25**

espinha dorsal (exibe estrutura de carbono alfa)

espinha dorsal <valor> (exibe backbone com espessura específica)

exemplo: **espinha dorsal 1.5**

Exportando Imagens e Salvando

Para exportar um arquivo Jpeg, clique em Arquivo>Exportar>Exportar imagem no canto superior esquerdo da janela de exibição.

Um arquivo Jpeg exportado (.jpg) contém informações sobre uma imagem do seu modelo conforme ela aparece na janela de exibição no momento da exportação, bem como um registro do seu estado atual ou progresso.

Para carregar seu progresso anterior usando as informações salvas em um arquivo Jpeg exportado, arraste o arquivo Jpeg salvo para a Jmol Display Window. Isso carregará automaticamente seu estado ou progresso salvo.

* Observação: o arquivo Jpeg deve estar localizado na mesma pasta que o arquivo PDB usado para ser carregado corretamente.

Formatos de cores

Método 1: seleccione <tipo de seleção> cor <nome da cor>

exemplo: **seleccione hidrofóbico cor amarela**

Método 2: cor <tipo de seleção> cor <código[R,G,B]>

exemplo: **seleccione hélice cor [15.255.110]**

Modo de cor padrão: **cor CPK**

Estruturas secundárias de cores: **estrutura de cor**

Para uma lista completa das cores predefinidas disponíveis em Jmol, visite: <http://jmol.sourceforge.net/jscolors/>

Seleção e Restrição

seleccione <tipo de seleção> (seleciona parte do arquivo)

exemplo: **seleccione hélice**

restringir <tipo de seleção> (remove a exibição de tudo exceto o que foi restrito)

exemplo: **restringir a água**

Lista de tipos comuns de seleção:

espinha dorsal	cadeia lateral	hidrofóbico
hidrofílico	cobrado	hetero
água	nucleico	proteína
hélice	folha	

* <carta> (para seleção por carta em cadeia) <número> (para seleção por número de resíduos) <número>-<número> (para seleção por intervalo de resíduos)

atomno=<número> (para selecionar por número de átomo) atomno=<número> e atomno<=<número> (para seleção por intervalo de átomos)

<tipo de átomo> (para selecionar por tipo de átomo)

Tamanhos padrão para modelos SMART Team

espinha dorsal 1.5	hbond 1.0
estrutura de arame 1.0	suporte 1.0
preenchimento de espaço 1.25	ligação ssbond 1.0

Bonds e Struts

Ligações de hidrogênio:

calcular ligações h (adiciona ligações de hidrogênio a todas as áreas selecionadas)

hbonds fora (remove todas as ligações de hidrogênio em uma área selecionada)

hbonds <número> (exibe ligações de hidrogênio com espessura específica) **cor**

hbonds <cor> (cores ligações de hidrogênio)

conjunto hbonds sólido (exibe ligações de hidrogênio como linhas sólidas) **definir**

espinha dorsal hbonds (conecta ligações de hidrogênio ao carbono alfa)

definir cadeia lateral hbonds (conecta ligações de hidrogênio aos átomos de nitrogênio e oxigênio)

Para adicionar ou remover um único hbond, seleccione apenas os dois **aminoácidos** que o hbond conecta e usa **oligações h 1.0** ou **hbonds fora** comando

exemplo: **seleccione 716 ou 1341 ligações h 1.0**

exemplo: **seleccione 14 ou 342 hbonds fora**

Ligações dissulfeto:

ssbonds em (adiciona ligações dissulfeto a todas as áreas selecionadas)

ssbonds desligados (remove ligações dissulfeto)

ssbonds <número> (exibe com espessura específica)

ssbonds coloridos <cor> (cores ligações dissulfeto)

definir backbone ssbonds (conecta ligações dissulfeto ao carbono alfa)

definir cadeia lateral ssbonds (conecta ligações dissulfeto aos átomos de nitrogênio e oxigênio)

Para adicionar ou remover um único ssbond, seleccione apenas os dois **aminoácidos** que o ssbond conecta e usa o **ligações ssbonds 1.0** ou **ssbonds desligados** comando

exemplo: **seleccione 716 ou 1341 ligações ssbonds 1.0**

exemplo: **seleccione 14 ou 342 ssbonds desligados**

Suportes:

calcular suportes (adiciona suportes estruturais chamados suportes a todas as áreas de proteínas selecionadas) **se**

pavoneia (remove suportes)

suportes <número> (displays com espessura específica)

suportes coloridos <cor> (cores suportes)

Para adicionar ou remover um único suporte, seleccione apenas os dois átomos que o suporte conecta e use **osuporte** ou **pavonear-se** comando

exemplo: **seleccione atomno=716 ou atomno=1341 conectar suporte suporte 1.0**

exemplo: **seleccione atomno=14 ou atomno=342 conectar strut excluir**

Adicionando uma Sidechain "Limpa":

Para selecionar e exibir apenas os átomos da cadeia lateral de um aminoácido específico, você deseja usar **oselecionar** comando seguido do nome/número do aminoácido e finalizado com **oe** (cadeia lateral ou alfa) texto.

seleccione cys30 e (sidechain ou alfa) spacefill 1.25
estrutura de arame 1.0

Para remover uma sidechain exibida incorretamente:

seleccione cys30
preenchimento de espaço
wireframe desligado

Recursos adicionais:

Estrutura geral da proteína:

<http://cbm.msoe.edu/stupro/so/ProteinStructure.html>

Banco de dados oficial do comando Jmol:

<http://jmol.sourceforge.net>

Guia de treinamento CBM Jmol E-book

<http://cbm.msoe.edu/teachRes/Jmol/trainingguide/>

Banco de dados de proteínas RSCB

<http://www.pdb.org>

Página Wiki Jmol

<http://wiki.jmol.org/index.php/>