

Jmol 12.0 new features 7/28/2010

New Jmol features introduced since the release of Jmol 11.8 on 8/26/2009 are highlighted here. Item links are to topics in [examples-11/new.htm](#)

[Generally new capability](#)

[Graphical User Interface](#)

[New file readers](#)

[New file reading capabilities](#)

[New file output/export capabilities](#)

[Structure searching/matching](#)

[Atom properties](#)

[Jmol scripting functions and variables](#)

[New commands](#)

[New command options](#)

Generally new capability

- customizable mouse button/action bindings
- multi-touch/Kiosk capability using [SPARSHUI](#) adaptation ([U-Tube video](#))
- parallel multiprocessor capability for isosurface creation
- drag-and-drop to signed applets and the application -- see [drop.htm](#)
- model kit mode allows rapid construction of simple models
- extensive support for depiction of space groups -- see [Jmol Crystal Structure Explorer](#)
- conversion of 2D models (SMILES, JME, MOL) to 3D -- see [JmeToJmol.htm](#)
- interface to [JSDraw](#) for 2D structure input -- see [jstest.htm](#)
- interface to [Flot](#) for plotting data -- see [jmol-flot.htm](#) and [jmol-flot-energy.htm](#)
- full implementation of Daylight SMILES/SMARTS
- extension of Daylight SMARTS to [3D conformation](#)
- introduction of [Jmol bioSMILES and bioSMARTS](#)
- new [JmolSmilesApplet.jar](#). See [JmolSmiles.htm](#), [JmolSmilesTest.htm](#),
- JavaScript-like flow commands and TIMEOUT
- JavaScript-like TRY/CATCH error handling
- direct reading of [Uppsala electron density maps](#)
- natural bond orbital reading/rendering
- direct logging to files using the LOG command

Graphical User Interface:

[right-edge zoom](#)

[new mouse action: LEFT-DOUBLE-CLICK-DRAG](#)

[new multi-touch interface](#)

[SET command autocompletion in console](#)

New file readers:

[CRYSTAL reader](#)
[DGRID reader](#)
[isosurface DSN6/O electron density map readering](#)
[2D MOL reader to 3D](#)
[JME reader converts 2D to 3D](#)
[direct loading of SMILES strings to 3D](#)
[direct reading of Uppsala electron density maps](#)
[VASP vasprun.xml](#)
[XPLORE electron density reader](#)

New file reading capabilities:

[drag-and-drop to signed applet and from browsers](#)
[reading of polymer\(1D\) and slab\(2D\) unit cells](#)
[loading with option to save a local version \(LOAD AS !\[\]\(0f848bbd71cef6b345273b16f905912a_img.jpg\)\)](#)
[reading of Natural Bond Orbitals](#)
[reading of simple PDB trajectories](#)
[Spartan/Cygress FILTER "noOrient"](#)
[extended XYZ file format](#)
[reading specialized file data as property _xxxx](#)

New file output/export capabilities:

[new LOG command](#)
[Jmol Archive Format \(.jmol\)](#)
[JVXL XML format](#)
[webExport enhancements](#)
[export of IDTF/LaTeX for 3D-PDF files](#)

Structure searching/matching:

[full 3D-SEARCH SMILES/SMARTS and bioSMILES/bioSMARTS implementation](#)
[{*}.find\("SEQUENCE"\)](#)
[{*}.find\("smartsString",asArray\)](#)
[{*}.find\("SMILES!\[\]\(3211b5d1d968fc1665909b34f9f16010_img.jpg\), "MF"\)](#)
[{*}.find\("SMARTS", "MF"\)](#)
[SMILES stereochemistry matching](#)
[SMILES-based conformational testing and alignment](#)
[light-weight JmolSmilesApplet.jar](#)
[SMARTS atropisomer matching](#)
[MEASURE search\("..."\)](#)
[SET picking measure SEQUENCE](#)
[SHOW SMILES](#)

Atom properties:

[better RNA hydrogen bond calculation](#)
[generalized hydrogen bond calculation](#)

[shapes: negative size implies ONLY](#)
[van der Waals default 23%AUTO](#)

[{xxx}.cartoon \(etc.\) Shapes: size testing and setting](#)
[{xxx}.eta for nucleic acids](#)
[{xxx}.polymer](#)
[{xxx}.selected](#)
[{xxx}.find\("SEQUENCE"\)](#)
[{xxx}.find\("smartsString",asArray\)](#)
[{xxx}.find\("SMILES^{FF}", "MF"\)](#)
[{xxx}.find\("SMARTS", "MF"\)](#)
[{xxx}.ionicRadius](#)
[{xxx}.theta for nucleic acids](#)
[{xxx}.volume\("type"\)](#)
[{xxx}.x {xxx}.y {xxx}.z](#)

Jmol scripting functions and variables:

[x**y](#)
[associative arrays](#)
[acos\(x\)](#)
[compare\(\)](#)
[hkl\(a,b,c\)](#)
[3x3 matrix math](#)
[4x4 matrix math](#)
[measure\(\)](#)
[now\(\)](#)
[prompt\(\)](#)
[quaternion arrays](#)
[quaternion differences, means, and standard deviations](#)
[quaternion dot product q1.dot\(q2\)](#)
[symop\(n\)](#)
[symop\(n, "..."\)](#)
[symop\(n\) * symop\(m\)](#)
[_multiTouchServer, _multiTouchClient flags](#)
[\\$SCRIPT_PATH\\$ script pre-processing variable](#)

New commands:

[implicit SCRIPT command](#)
[BIND](#)
[COMPARE](#)
[FIX](#)
[LOG](#)
[MAPPROPERTY](#)
[PARALLEL](#)
[PLOT](#)
[PROCESS](#)
[PROMPT](#)
[STRUTS](#)
[SWITCH/CASE](#)

[TIMEOUT](#)
[TRY/CATCH](#)
[UNBIND](#)

New command options:

[translucent color schemes](#)
[AXES CENTER {x y z}](#)
[AXES LABELS](#)
[AXES TICKS](#)
[BOUNDBOX \\$isosurface1](#)
[BOUNDBOX SCALE x.x option](#)
[BOUNDBOX TICKS](#)
[CALCULATE HYDROGENS](#)
[COLOR !\[\]\(dfbd6b3763a6d1d9afaa974f64e2e4b5_img.jpg\) BW !\[\]\(b89ecf30df3dbaee65fa9f1829524a6e_img.jpg\)](#)
[COLOR !\[\]\(12caa8c16ee33cc266cee3a47dfba46b_img.jpg\) WB !\[\]\(2137b87161c99f1e992a818823b2a5a3_img.jpg\)](#)
[CONNECT XX% YY% ...](#)
[DELETE HYDROGENS](#)
[DRAW BOUNDBOX](#)
[DRAW INTERSECTION \\$myIsosurfaceID PLANE|HKL](#)
[DRAW INTERSECTION BOUNDBOX PLANE|HKL](#)
[DRAW INTERSECTION UNITCELL PLANE|HKL](#)
[DRAW LINEDATA](#)
[DRAW POLYGON](#)
[DRAW SYMOP](#)
[DRAW UNITCELL](#)
[FRAME TITLE \(from file-based model names\)](#)
[FRANK OFF \(local signed applet\)](#)
[GETPROPERTY mouseInfo](#)
[GETPROPERTY SHAPEINFO](#)
[GETPROPERTY shapeInfo.isosurface](#)
[GETPROPERTY shapeInfo.pmesh](#)
[INVERTSELECTED STEREO option](#)
[ISOSURFACE ...](#)
[ISOSURFACE color MESH \[color\]](#)
[ISOSURFACE ...](#)
[ISOSURFACE ...](#)
[ISOSURFACE lattice {a b c}](#)
[ISOSURFACE "=nnnn"](#)
[ISOSURFACE ANISOTROPY generalized](#)
[ISOSURFACE CAP](#)
[ISOSURFACE color DENSITY](#)
[ISOSURFACE contour DISCRETE](#)
[ISOSURFACE contour INCREMENT](#)
[ISOSURFACE INLINE](#)
[ISOSURFACE FULLPLANE](#)
[ISOSURFACE OFFSET](#)
[ISOSURFACE SCALE3D](#)
[ISOSURFACE SIGMA](#)
[ISOSURFACE SLAB](#)
[ISOSURFACE WITHIN x.x {points}](#)

[LABELS DISPLAY](#)
[LABELS HIDE](#)
[LCAOCARTOON CPK](#)
[LOAD \\$CCC\(C\)C -- smiles string loading](#)
[LOAD @x where x is an array of file names](#)
[LOAD -n \(single vibration\)](#)
[LOAD DATA](#)
[LOAD INLINE "JME string" and load "@x"](#)
[LOAD "filename" AS "localFileName"](#)
[LOAD "somefilename" 0 \(last-model loading\)](#)
[MEASURE search\("..."\)](#)
[MEASURE TICKS](#)
[MINIMIZE ADDHYDROGENS](#)
[MINIMIZE SILENT](#)
[PMESH ANISOTROPY generalized](#)
[PMESH OFFSET](#)
[PRINT symop\(n,"..."\)](#)
[ROTATE \(matrix variable\)](#)
[ROTATE COMPARE option](#)
[ROTATE HELIX option](#)
[ROTATE TRANSLATE {x y z} option](#)
[SCRIPT LOCALPATH/REMOTEPath](#)
[SELECT configuration=1](#)
[SELECT CYSTINE](#)
[SELECT POLYMER=n](#)
[SELECT RANGESELECTED extended](#)
[SELECT search\(\) -- 3D-SMARTS](#)
[SELECT SPINE](#)
[SELECT within\(BASEPAIR\)](#)
[SELECT within\(nResidues, GROUP, atoms\)](#)
[SELECT within\(POLYMER, {someAtoms}\)](#)
[SELECT within\(SEQUENCE, "1-letter-code sequence"\)](#)
[SET allowGestures](#)
[SET allowModelKit](#)
[SET allowMultiTouch](#)
[SET cartoonBaseEdges](#)
[SET clickCallback](#)
[SET dotScale](#)
[SET HIGHLIGHT](#)
[SET isKiosk](#)
[SET minimizationSilent](#)
[SET ModelKitMode](#)
[SET mouseDragFactor](#)
[SET mouseWheelFactor](#)
[SET phongExponent](#)
[SET picking connect](#)
[SET picking deleteAtom](#)
[SET picking deleteBond](#)
[SET picking dragAtom](#)
[SET picking dragMinimize](#)
[SET picking dragMinimizeMolecule -- responsive docking](#)

[SET picking invertStereo](#)
[SET picking measure SEQUENCE](#)
[set picking select STRUCTURE](#)
[set picking select POLYMER](#)
[SET pickingStyle DRAG](#)
[SET preserveState FALSE](#)
[SET quaternionFrame "A", "C", and "P" for nucleic acids](#)
[SET saveProteinStructureState](#)
[SET slabByAtom](#)
[SET slabByMolecule](#)
[SET waitForMoveTo FALSE](#)
[SET zshade](#)
[SET zshadePower](#)
[SHOW BASEPAIRS](#)
[SHOW MOUSE \[option\]](#)
[SHOW SMILES](#)
[SHOW SYMOP](#)
[SHOW TIMEOUTS](#)
[SPACEFILL RESET](#)
[TRANSLATE SELECTED x/y/z](#)
[UNITCELL TICKS](#)
[WIREFRAME ONLY and wireframe -x.y](#)
[WIREFRAME RESET](#)
[WRITE MESH](#)
[WRITE PMESH](#)
[WRITE state LOCALPATH/REMOTEPATH](#)
[ZOOM IN|OUT](#)
[ZOOMTO IN|OUT](#)