

## 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](#)  
[XPLOR 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 \(LOAD .... AS □.\)](#)  
[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\("SMILES□", "MF"\)](#)  
[{\\*}.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\("SMILES□", "MF"\)](#)  
[{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 ☐BW☐](#)

[COLOR ☐WB☐](#)

[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 ... COLOR "color1 color2 color3..."](#)

[ISOSURFACE color MESH \[color\]](#)

[ISOSURFACE ... map CONTOUR DISCRETE](#)

[ISOSURFACE ... map CONTOUR INCREMENT](#)

[ISOSURFACE ... map MEP functionType](#)

[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 \\$CCCC\(C\)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](#)