

Pymol 命令

鼠标 左键 rotate 中键 move 右键 zoom (可删除 object 或 selection)

PWD: 显示当前工作路径 cd d: delete doka. 删除 doka 文件

load e:/kinase/doka.pdb 加载 pdb delete all

show 命令 显示一种或多种模式 disable dog (对象删除
选择 关闭为显示选择的对象
as sticks (命令后只是 sticks 一种)

show lines

show sticks

show ribbon

as sticks (命令后只是 sticks 一种)

隐藏模式 hide 命令

hide lines

color 命令 着色

by element (元素) by chain (肽链) by ss (=二级结构) by atom (原子类型)

color green

select all, elem c (按元素选择)

color green 整个蛋白着色

color grey, all 将所有原子设为灰色

color red, ss h (α螺旋着色)

color green, ss s (β折叠着色)

color blue, ss l+'' (loop 着色)

设置背景颜色 bg color white

remove resi 5 从结构中删除残基 5 中的所有原子

select 选择命令

count_atoms bb bb 中原子数

select arg, resi 9 选择残基 9 侧链 arg 为变量名

show ~~arg~~, show sticks, arg 将 arg 对象显示为 sticks 模式

color orange, arg 着色

点击 L 键中的 residues 可对 9 号残基添加标签

zoom arg 放大显示 9 号残基

属性选择符

select polar, symbol O+n (元素符号)

hide hydro 隐藏所有氢原子表示式

select carbons, name ca+cb+cg (原子符号)

show carbon, hetatm PDB 中 HETATM 的原子

select aas, resi asp+glu+asn+gln (残基名)

select box, resi 1-10 (残基号) 或 select box, resi 1+10+100

select 007, chain a (链)

select ligand, segi lig (segment 名)

select allstrs, ss h+s+l+'' (二级结构)

select geng, resi 212 and name ca (212 号残基的 CA 原子)

布尔算符

select geng, resi 212 or resi 214 (212 号残基和 214 号残基)

select geng, not resi 200-400 (除 200-400 号残基外的所有残基)

select geng, resi 212+214 and not name ca (212 和 214 号残基或非 CA 原子)



选择内容 显示内容

Label 标签命令 label [selection [, expression]]

label resi 3 and name ca, "ca" 显示 3号残基的CA原子 标签为 ca

label resi 3 and name ca 或 label resi 3 and name ca, "" 清除标签

label 清除所有标签

Object 与 selection 区别

Object 是实实在在的物质或东西 selection 是一种虚指

Object 删除后 selection 也就消失 selection 删除后对 object 没有影响

select prot, chain 1

creat prot, prot 创建 object 名为 prot

select prot, chain v

creat prot, prot

show surface, prot

set transparency, 0.4 (设置 surface 透明度, 0 是完全不透明, 1 是完全透明)

set surface-color, gray70, prot (设置表面颜色为灰 70, gray70 颜色与背景非常接近)

ray (结构打光, 图像显示出景深和立体效果)

ray 2000, 2000 (控制, 从轴心向外发射)

png 002 (保存文件名为 002 的图片)

file >> save session 保存文件为 pse 格式 可保存设置的所有效果 (下次再编辑)

select near ten, resi 10 around 5 选择以 S1 中任何原子为中心, X 为半径, 附近的所有原子 (不包括 S1)

S1 expand X 选择以 S1 中任何原子为中心, X 为半径 把 S1 扩大至该范围所包括的所有原子 (包括 S1)

S1 within X of S2 选择以 S2 为中心, X 为半径 并包含在 S1 中的原子

选择命令 object / segi / chain / resi / name

show lines, a/100/ca 显示原子间键 认为最远一级为链的末端一级

show sticks, /2v10/1a/100 显示棒模型 从选择出的最远末一级开始

与无空格

log-open log1.pml 创建日志文件

log-close 停止记录

@ log1.pml 载入运行脚本



set cartoon-flat-sheets, 1 (1. 开始平滑) 0. 禁用平滑

set cartoon-smooth-loops, 1

set cartoon-oval-width, 0.2 (Helix 的宽度)

set cartoon-oval-length, 1.5 (Helix 的长度)

set cartoon-rect-width, 0.5 (sheet 的宽度)

set cartoon-rect-length, 1.5 (sheet 的长度)

set cartoon-loop-radius, 0.2 (loop 的半径)

set cartoon-fancy-helices, 1 (helix 的边上会有 7 个小的 cylinder)

set cartoon-fancy-sheets, 1

~~此时再设置~~ set cartoon-dumbbell-width, 0.1 (helix 的宽)

set cartoon-dumbbell-length, 2 (helix 的长)

set cartoon-dumbbell-radius, 0.1 (cylinder 的半径)

set cartoon-color, green (cartoon 显示的颜色)

set cartoon-transparency, 0.5 (cartoon 显示的不透明度)

set cartoon-refine, 20

Label 标签 (文本)

set label-shadow-mode, 3 (0. 无投影. 1. object 有投影到 label 上, label 本身无投影. 2. 均有. 3. object 无投影到 label 上, label 本身有投影)

set label-color, color-name, selection. 设置文字颜色

set label-outline-color, [color-name, [selection]] 设置文字的轮廓的颜色

set label-font-id, 5. (内置 2 种字体, 编号 11-16)

set label-size, 20 (字体大小)

set label-position, (x, y, z) (设置 label 位置, 需要设置 3 个坐标值)

set dash-length, 0.015

set dash-radius, 0.015

set dash-gap, 0.6

set dash-color, grey

Wizard >> Label 进入编辑模式

ctrl + 鼠标右键 可移动标签



选择运算符

not S1, S1 and S2, S1 or S2

S1 in S2 选择 S1 中匹配 name, resi, resn, chain, segi 与 S2 的原子

select some-atoms kept in prot

S1 around X 不包含 S1

S1 expand X 包含 S1

S1 within X of S2 选择 S1 中在 S2 X 埃范围内的原子

byres S1 按 S1 的残基

neighbor S1 选择直接与 S1 有键连接的 S1 的原子

Align 叠合 align (source), (target) # the source object will be moved and rotated to fit the target object

align mol1 & resi N1, mol2 & resi N2 按某一个残基叠合

align (prot1 and chain A), (prot2 and chain B) 按两条链叠合

align mol1 & resi N1-N2 & name n+ca+o, mol2 & resi N3-N4 & name n+ca+o

按某段残基的主链进行叠合

添加/删除键

select o3g, resn atp and name o3g

select mg1, resi 336 and name mg

bond o3g, mg1 (unbond 可以删除键)

show lines, mg1 (lines, sticks)

set line-width = 1.2 (设置 line 的粗细)

set stick-radius = 0.15 (设置 sticks 半径)

添加虚键 (测量原子间距离) dist

select o3g, resn atp and name o3g

select mg1, resi 336 and name mg

distance dist, o3g, mg1

球棍模型设置

select atp, resn atp

show spheres, atp

show sticks, atp

set stick-radius = 0.075 棍

alter atp, vdwr = 0.3 球

rebuild

