

# Jmol - Folha de Dicas

AUTHOR  
José Mauricio Schneedorf F Silva

## Acessando o *JSmol* pela internet

O mais simples e flexível, com Console, é o do [Solarf College](#)

## Comandos gerais

Ajuda: help # help zoom  
Sair: quit  
Desfazer: undo  
Refazer: redo  
Retorno ao modelo original: reset  
Inicialização do programa: initialize  
Minimização por campos de força: minimize  
Espera entre ação de comandos: delay (em seg)

## Obtendo modelos moleculares

Da internet:  
moléculas em geral: load Scholsterol  
moléculas do PDB (Protein Data Bank):  
load:1pgp  
compostos do site PubChem:  
load "nafamostat"  
  
Do computador (os arquivos precisam estar  
no diretório raíz ou pré-selecionado  
por "cd": load "zayy.pdb"

## Visualizando os modelos:

Visualizar: display 1.1  
(indica "quadro 1 do modelo 1")  
Esconder: hide 1.1  
Remover os modelos: zap  
Plano de fundo: background white  
Corte na visualização: slab on; slab 30

## Apresentando informações do modelo

Não apresentar nada: show none  
Modelo: show model  
Átomos: show atom  
Informações de minimização estrutural:  
show DSSP  
Superfícies (molecular, eletrostática):  
show isosurface  
Grupos: show groups  
Informações do modelo: show info

## Movimentando o modelo

Rotacionar a estrutura:  
spin 10 # velocidade  
rotate 20  
rotate x 90 # eixo x

## Salvando e exportando modelos (write)

# (salva como imagem)  
Imagem do modelo:  
padrão (png): write nome-do-modelo  
com especificações: write PNG 2000 2000 "big.png"  
outros (jpg, pdf): write nome.jpg  
Coordenadas do modelo  
write nome.mol # ou outro atributo (ex: pdb)

## Calculando distâncias e ângulos (measure)

Além do uso simples e interativo do mouse para cálculo de distâncias (duplo clique com o botão direito do mouse no 1o. átomo e arraste ao 2o. átomo) ou de ângulos (3 cliques do mouse), é possível obter as mesmas informações pelo Console.

Distância: measure no. átomo1 no. átomo2  
Ângulo: measure no. átomo1 no. átomo2  
no. átomo 3  
Obs: para se obter o no. do átomo basta  
cliquear no ponto desejado do modelo  
Ângulo de torção: measure átomo1 átomo2 átomo3  
átomo4  
  
Medidas: measure on. ou off...ou delete  
Escolha da unidade de medida: set measure  
em # ou pm, angstroms, au (unidade atômica de Bohr)

## Obtendo & visualizando quantidades

Ligações de hidrogênio: calculate hbonds  
(ou...hbonds calculate)  
Cargas formais (efetivas): calculate  
formalcharge # para etiquetar: label %C  
Cargas parciais: calculate partialcharge  
# para etiquetar: label %P  
Estruturas 2as numa proteína: calculate  
structure # algoritmo DSSP -  
Todas as ligações do modelo e com respectivas  
distâncias: measure allconnected ("()")

## Alterando as representações

Há diversas formas de renderização de estruturas no *Jmol*. Os comandos abaixo resumem essa capacidade:

wireframe, backbone, trace, strands, cartoon  
, ribbons, meshribbon, rockets, cpk (ou spacefill), ball&stick (somente pelo Menu,  
abaixo no Console)  
  
Para visualizar uma única forma: wireframe only  
Para esconder uma forma: backbone off  
Para renderizar como "ball&stick":  
wireframe only;wireframe reset;spacefill reset

As representações renderizam a estrutura pelo tamanho de seus átomos. A renderização por *spacefill*, por exemplo, expressa-se como uma função do *raio de van der Waals* do átomo. Exemplificando:

spacefill on / off  
wireframe 0.5 # 0,5 Angstrom  
(o "." refere-se a valor absoluto)  
backbone 50 # 50/250 Angstrom, ou 0,2  
# Angstrom (ausência de ponto refere-se a valor relativo)  
cartoon 90# # 90% a mais que o padrão  
spacefill 2 # 2/250 Angstrom = 0,008 Angstrom  
# (observe a ausência de ponto)  
spacefill 2.0 # 2 Angstrom (observe o ponto)

## Selecionando cores

A opção padrão para cores dos modelos é a *CPK* (Corey, Pauling, Koltun), para carbono (cinza), nitrogênio (azul), hidrógeno ou enesofre (amarelo), hidrogênio (branco), iodo (violeta), etc. Contudo é possível alterar cores globalmente no modelo, ou especificamente sobre grupos selecionados de átomo. O programa aceita o comando *color* ou *colour*.

color [255,125,185] # cor específica  
color {#FF0000} # cor específica  
color cpk # padrão do programa  
color molecule # todos os átomos conectador por  
# uma ligação  
color formalcharge  
color partialcharge  
color amino # para aminoácidos  
color structure # para estrutura secundária  
Proteínas: vermelho (alfa-hélice), amarelo  
#(folhas-beta), azul (voltas), branco (restante)  
Ácido nucleico: violeta (DNA), avermelhado (RNA)  
color chain: cadeias  
color inherit: os objetos herdam a cor de seus átomos associados  
color shapely: esquema de cor que inclui nucleotídeos  
color group: gradiente de arco-íris (azul; N- ou 5'-terminal; vermelho; C- ou 3'-termi

## Ampliação do modelo

Ampliação 2x: zoom in  
Ampliação em 3x: zoom \"3  
Redução em 2x: zoom out  
Redução em 3x: zoom /3  
Eliminar ampliação: zoom off  
Restrição a ligante e ampliação:  
restrict ligand; zoom 0

## Ampliação animada (*zoomto*)

Esse recurso permite visualizar de forma ampliada temporariamente algumas partes de interesse do modelo, tais como sítios de interação de ligantes ou grupos próstéticos. A sintaxe da expressão é:

zoomto ou zoomTo (expressão do átomo/grupo)  
tamanho ou...  
zoomto tempo (expressão do átomo/grupo) tamanho

Exemplos:

Aumentar em 3x, meio segundo por vez:  
zoomto 0.5 \"3  
Aumentar em 4x, meio segundo por vez:  
zoomto 0.5 400  
Focar num ligante com ampliação de 2x:  
zoomto 2(ligand) 0  
Focar num ligante com ampliação de 4x,  
a meio segundo por vez: zoomto 0.5(ligand)\" 4

## Superfícies

O *Jmol* permite renderizar alguns tipos de superfícies em torno dos átomos do modelo. Para macromoléculas deve-se observar que a renderização levará um tempo maior.

dots on / off \"# superfície de van der Waals dots only \"# somente a superfície de vdW  
  
isosurface on/off # superfície molecular  
isosurface solvent # excluindo o solvente  
isosurface molecular # incluindo o solvente  
isosurface molecular 5 # superfície a um  
# determinado raio de VDW  
isosurface sasurface # área acessível ao  
# solvente ("surface accessible solvent")  
isosurface mep # "molecular electrostatic potential"  
isosurface map mep # potencial eletrostático  
# (ex: H2O, isosurface resolution 0 molecular map mep)  
isosurface molecular map property  
PartialCharge # ou temperature, vanderwaals

library(pagedown)

```
chrome_print("jmol.cheatsheet.final24set.html",
  format = "pdf",
  options = list(
    printBackground = TRUE,
    landscape = TRUE,
    scale = 0.5, # Ajuste a escala para caber no espaço
    margin = "0.5in" # Ajuste as margens conforme necessário
  ))
```