

Manual de RasMol Version 2.6-beta-2

Programa de Visualización Molecular

Roger Sayle

Glaxo Wellcome Research and Development
Stevenage, Hertfordshire, U.K.

Traducción al castellano de Isabel Serván Martínez y José Miguel Fernández
Fernández

[Ir a Tabla de Contenidos](#)
[Fecha de la última revisión](#)

Si no está leyendo este manual en <http://www.umass.edu/microbio/rasmol/distrib/rasman.htm>, tal vez desee saber que revisiones o adiciones se han efectuado desde que se preparó esta copia. Pruebe en fecha de la última revisión (<http://www.umass.edu/microbio/rasmol/distrib/rasman.htm#revhist>). Otras formas de presentación de este manual y otras fuentes de información y ayuda para RasMol están disponibles en: <http://www.umass.edu/microbio/rasmol/getras.htm#rasmanual>.

RasMol en versiones para diferentes sistemas operativos, instrucciones de instalación, y fuentes suplementarias por extenso están disponibles en la [RasMol Home Page](#). Incluidas allí están las [Cuestiones Frecuentemente Consultadas \(o en inglés FAQ\)](#), [tutoriales sobre como usar RasMol](#), varios documentos sobre [como crear guiones "de películas"](#), y contada por el propio [Roger Sayle la historia de cómo fue que llegó a ser RasMol](#).

Use la herramienta **Find** de su navegador para localizar los temas de su interés. Es posible hacerlo ya que esta versión del Manual es una **única hoja html** (en lugar de varios trozos separados en distintos ficheros, como ocurre con otras versiones del Manual). El inconveniente es el tiempo de carga del Manual completo (140 kilobytes) en su navegador. Si clicas sobre un tema concreto puede que parezca perdido, si el documento aún se está cargando (Mensaje de "Document: Done").

Si utiliza frecuentemente el Manual, es recomendable que lo cargue en su ordenador. La secuencia de ordenes **File, Save** le permitirá hacerlo. Luego: **File, Open** le permitirán cargarlo cada vez que lo desee, ahorrando tiempo de espera. Ni siquiera necesitará conectarse con Internet.

[Salte a Tabla de Contenidos](#)

Roger Sayle, creador de RasMol, mantuvo este manual hasta la RasMol version 2.5. En julio de 1996, esta copia del Manual de RasMol fue parcialmente actualizada a partir de la versión 2.5 para la nueva versión 2.6-beta-2 por el Dr. Margaret Wong del Chemistry Department, Swinburne University of Technology, Australia (marg@chem1.chem.swin.edu.au). Eric Martz (emartz@microbio.umass.edu) ha añadido actualizaciones y revisiones, y ha mantenido esta hoja, por ello recibirá con agrado sugerencias para mejoras adicionales. La [historia completa de las revisiones](#) de este Manual se detalla mas adelante. Los gazapos solucionados y algunos otros

detalles no incluidos aquí se pueden encontrar en la documentación de cada puesta en circulación de [26beta1.txt](#) y [26beta2.txt](#). Una sucesión cronológica del desarrollo de RasMol y de la depuración de gazapos se puede encontrar en los [archivos ChangeLog](#) que acompañan al código fuente. El sitio de distribución original de RasMol es el servidor ftp de la [University of Edinburgh](#).

Sayle posee un sistema bien diseñado para convertir una copia maestra del manual en varios formatos incluyendo versiones HTML, PostScript, y el archivo que proporciona la ayuda de RasMol interconstruido en el propio programa. Desafortunadamente, ni Margaret Wong ni yo supimos acerca de este sistema hasta después de introducir los cambios en esta versión HTML. Cualquiera que planee seriamente hacer cambios en la documentación de RasMol debería considerar la posibilidad de obtener el programa de mantenimiento de la documentación, directamente de Roger (y por favor, ¡que me informe a [mi!](#)).

Tabla de Contenidos

- [Introducción](#)
 - [Operación general](#)
 - [Referencia de los comandos](#)
 - [Parámetros internos](#)
 - [Expresiones atómicas](#)
 - [Conjuntos predefinidos](#)
 - [Colores y esquemas de color](#)
 - [Historia de las revisiones](#)
-

Copyright (c) 1992-1995 by [Roger Sayle](#)

La información contenida en este documento es considerada fiable, pero no se asume ninguna responsabilidad debida a su uso o por la invasión de derechos de otras personas como resultado de su uso. La información en este documento está sujeta a cambios sin aviso previo, y no representa la adquisición de un compromiso por parte del suministrador. Este producto no puede ser usado, en ninguna forma, en la planificación, construcción, mantenimiento, operación o uso de cualquier instalación nuclear, ni en el vuelo, navegación o comunicación de nave aérea o equipo de apoyo en tierra alguno. El autor no será responsable, ni siquiera parcialmente, ante cualesquiera reclamaciones por daños y perjuicios derivados del uso de este manual, incluyendo muerte, insolvencia o declaración de guerra como consecuencia de su uso.

Introducción

RasMol2 es un programa de gráficos moleculares que permite la visualización de proteínas, ácidos nucleicos y moléculas pequeñas. Este programa está ideado para hacer posible la visualización, la enseñanza y la producción de imágenes con calidad de publicación. RasMol es compatible con los siguientes sistemas operativos y arquitecturas: Estaciones de trabajo SGI, sun4, sun3, sun386i, DEC, HP y E&S, DEC Alpha (OSF/1, Open VMS y Windows NT), IBM RS/6000, Cray, Sequent, VAX VMS (bajo DEC windows), IBM PC (bajo Microsoft Windows, Windows NT, OS/2, Linux, BSD386 y *BSD), Apple Macintosh y PowerMac. Las versiones UNIX y VMS requieren un tampón X Windows de 8bit, 24bit o 32bit (X11R4 o posterior). La versión X Windows de RasMol proporciona soporte opcional para una caja de mandos en hardware y comunicación mediante memoria compartida y acelerada. (vía XInput y las extensiones de MIT- SHM) si es que están disponibles en el X Server en uso.

El programa lee ficheros de coordenadas moleculares y muestra interactivamente la molécula en la pantalla en una serie de esquemas de colores y de representaciones moleculares. Los ficheros de entrada incluyen, específicamente, los formatos Brookhaven Protein Databank (PDB), Tripos Associates' Alchemy y Sybyl Mol2, Molecular Design Limited's (MDL) Mol, Minnesota Supercomputer Centre's (MSC) XYZ (XMol) y CHARMM. Si la información sobre conectividad no está contenida en el archivo, RasMol la calculará automáticamente. La molécula cargada puede ser representada en las formas de estructuras de alambre, enlaces en cilindros de Dreiding, esferas de espacio relleno (CPK), bolas y barras, cintas macromoleculares (lisas, sólidas y en filamentos) y superficie de puntos..

La molécula exhibida puede ser girada, desplazada, ampliada (zoom) y/o cortada en rebanadas interactivamente usando, bien el ratón, bien las barras de desplazamiento de windows, o bien la línea de comandos de la caja de ordenes adjunta. RasMol puede leer una sucesión de comandos previamente preparada en un archivo de **script** (guión) (o vía comunicación interactiva) para permitir cargar una imagen dado o un punto de vista concreto, de forma rápida. RasMol también puede crear un archivo **script** conteniendo los comandos requeridos para regenerar una imagen en uso. Finalmente, la imagen generada podría exportarse en una variedad de formatos incluyendo GIF, PPM, BMP, PICT, ficheros de salida Sun o como un **script** MolScript o Kinemage.

RasMol ha sido desarrollado en la University de Edinburgh, en la Unidad de Biocomputing Research y el Departamento de Estructura BioMolecular, de Investigación y Desarrollo Glaxo, Greenford, U.K.

Si desea hacer comentarios, preguntas, sugerencias por favor no dude en contactar con el autor:

Roger Sayle,	Email:	ras32425@ggr.co.uk
Biomolecular Structure		rasmol@dcs.ed.ac.uk
Glaxo Research and Development,		
Greenford Road, Greenford,	Tel:	(+44) (0) 81 966 3567
Middlesex UB6 OHE.	Fax:	(+44) (0) 81 966 4476
U.K.		

Operación General

- [Ejecutando RasMol bajo UNIX o VMS](#)
- [Ejecutando RasMol bajo Microsoft Windows](#)
- [Ejecutando RasMol en el Macintosh/PPC de Apple](#)
- [La ventana de RasMol](#)
- [Controles del ratón](#)
- [Barras de scroll](#)
- [Picando](#)
- [Caja de control](#)
- [Interface de línea de comandos](#)
- [Las dimensiones en RasMol](#)
- [Ficheros de inicialización de arranque](#)
- [Comunicación entre procesos](#)

Ejecutando RasMol bajo UNIX o VMS

Para arrancar RasMol desde el inductor de UNIX o el de VMS, teclee el comando 'rasmol'. A continuación del comando puede añadir un nombre de fichero. Por defecto, inmediatamente del arranque el programa visualiza el siguiente mensaje, para identificar el número de versión y la profundidad de visualización del programa que se va a correr:

```
RasMol Molecular Renderer  
Roger Sayle, October 1994  
Version 2.5  
[8bit version]
```

Inmediatamente debajo de este mensaje aparece el inductor de la línea de comandos de 'RasMol'. Si el programa se ejecuta en un sistema X windows, el programa determina el tipo de visualización que se emplea. Si la pantalla tiene un tampón de marco de color de 8 bit o de 24 bit, RasMol crea otra ventana, que se usa para visualizar opciones de menú y los imágenes que RasMol devuelve. Si hay una pantalla disponible, RasMol solo podrá ser empleado desde la línea de comandos. Los comandos pueden ser escritos para manipular el modelo, y para dar salida a la imagen generada hacia un fichero de salida.

Si el programa corre bajo entorno X Windows con una pantalla de color disponible, RasMol crea una ventana adicional para exhibir la molécula dada interactivamente, conforme es manipulada. Si RasMol no corre bajo entorno X Windows, el programa responderá con el mensaje "No se detectó un display utilizable". RasMol puede ser instruido para no presentar una ventana gráfica usando la opción de línea de mando "nodisplay". Esto es particularmente útil para usar RasMol como proceso en grupo (batch).

Es posible especificar el nombre de un fichero de coordenadas o bien de un **script**, o ambos, en la línea de ordenes UNIX/VMS. El formato para hacerlo es añadir la opción "- **script** "nombre de fichero" a la línea de comandos. Un fichero de coordenadas puede cargarse colocando su nombre en la línea de ordenes, precedido de la opción del formato de fichero. Si no se especifica el tipo de fichero, por defecto se asumirá que es PDB. Las opciones válidas son: '-pdb', '-mdl', '-mol2', '-xyz', '-alchemy' o '-charmm', que se corresponden a Brookhaven, MDL Mole, Sybyl Mol2, xyz de MSC, Alchemy y CHARMM respectivamente. Si simultáneamente se especifican tanto un fichero, como un **script** en la línea de comandos, la molécula se carga primero y después los comandos del **script** se aplican a él. Si el archivo no se encuentra, el programa muestra el mensaje de error "Error: File not found!" y ante el usuario recibe el inductor de RasMol.

Para cerrar RasMol, el usuario puede escribir el comando "quit" en el inductor de "RasMol", y el programa volverá al inductor de usuario de UNIX. Alternativamente, si un inductor distinto del principal de RasMol se visualiza, el usuario puede pulsar control-C (^C) para dejar el programa. El mensaje '***Quit***' aparece en la consola, antes del usual inductor de unix sea mostrado de nuevo. Otra forma de terminar el programa es seleccionando la opción Quit del menú, al fondo del menú principal.

Ejecutando RasMol bajo Microsoft Windows

Para arrancar RasMol en Microsoft Windows, haga doble clic en el icono RasMol del gestor de programas. Cuando RasMol arranca por primera vez el programa muestra una ventana principal única con un fondo negro y además provee de una ventana para la línea de comandos, minimizada, como un icono (win 3.x) o en la barra de funciones (95 y NT). La línea de comandos puede ser maximizada. Se puede especificar el nombre de un fichero de coordenadas atómicas o el nombre de un **script** o ambos en la ventana de línea de comandos. El formato será para un fichero **script** añadir la opción '- **script** <nombre-del-fichero>' a la línea de comando. Un archivo de coordenadas moleculares se especifica escribiendo su nombre en la línea de comandos, opcionalmente precedido por la opción de tipo de formato. Si no se especifica el tipo de fichero, por defecto se asumirá que es PDB. Las opciones válidas son: '-pdb', '-mdl', '-mol2', '-xyz', '-alchemy' o '-charmm', que se corresponden a Brookhaven, MDL Mole, Sybyl Mol2, xyz de MSC, Alchemy y CHARMM respectivamente. Si simultáneamente se especifican tanto un fichero, como un **script** en la línea de comandos, la molécula se carga primero y después los comandos del **script** se aplican a él. Si el archivo no se encuentra, el programa muestra el mensaje de error "Error: File not found!" y ante el usuario recibe el inductor de RasMol.

Ejecutando RasMol en el Macintosh/PPC de Apple

Para usar RasMol en un Macintosh, haga doble clic en el icono de RasMol empleando "Finder". Al empezar RasMol el programa muestra dos ventanas, la de encima (con el fondo negro) es la ventana gráfica o "canvas" y la de abajo (de fondo blanco) es la ventana de la línea de comandos de RasMol.

RasMol en un Macintosh puede arrancar, también clicando por duplicado en un archivo creado por la aplicación con la firma 'RSML'. Esto arrancará la aplicación y dará paso al archivo seleccionado para ser cargado. No hay forma de especificar el formato del archivo en la línea de ordenes en un Macintosh por lo que RasMol tiene que determinar el tipo de formato del fichero inspeccionando el nombre. Los archivos del tipo 'RSML' se asume que son **script** de RasMol, los del tipo 'mMOL' son asumidos como archivos MDL Mol y todos los demás (principalmente 'TEXT') se asume que están en formato PDB. A diferencia de las demás versiones de RasMol es imposible de especificar simultáneamente un **script** y un fichero de coordenadas..

Arrastrando y soltando (dragging and dropping) los ficheros **script** sobre alias, o accesos directos

de RasMol pueden fracasar debido a errores respecto al directorio correcto. Hacer doble clic sobre un " **script** puede tener las mismas consecuencias si existen diferentes copias del programa. Mas información puede encontrarse en el [documento de operación de 'movie' script](#), donde encontrará referencias a una explicación sobre [Macintosh signatures](#) y como cambiarlas.

Note que debido a que en un Macintosh solo una ocurrencia de cada aplicación puede correrse cada vez, si hiciera doble clic sobre otro archivo clasificado como 'RSML', la copia activa de RasMol expulsará la molécula en uso y la substituirá por la recién clicada.

La ventana de RasMol

En cualquier plataforma RasMol muestra dos ventanas, la principal de **gráficos** o **canvas** de fondo negro y una segunda ventana para la **línea de comandos** o ventana **terminal**. Arriba de ventana gráfica (en un MacIntosh en la parte superior de la pantalla esta la barra de menús de RasMol. El contenido de esta barra cambia de plataforma a plataforma para soportar las líneas generales de la interfase gráfica de usuario, sin embargo todas las plataformas soportan los menús desplegables 'File', 'Display', 'Colours', 'Export' y 'Options'. La ventana gráfica tienes dos barras de desplazamiento (scroll) a la derecha y abajo que pueden ser usadas para mover, interactivamente, la molécula.

La implementación Macintosh carece de ayuda en hipertexto interconstruida, disponible desde el menú 'Help' en MS Windows. El comando 'help' está disponible tecleándolo en la línea de ordenes siempre que el fichero 'rasmol.hlp' se encuentre en el mismo directorio que la aplicación, pero puede resultar poco agradable para el usuario. Por eso es recomendable que este manual en hipertexto se cargue en una ventana de un navegante de red si se necesita ayuda en un Macintosh. Ya que en RasMol 2.6 beta-2 el hipertexto de ayuda es aún el de la versión 2.5, lo anterior puede resultar recomendable para cualquier otro sistema operativo. Se puede obtener una copia de esta manual con la orden guardar (o save en las versiones en inglés) del menu Archivo del navegante, y puede ser visualizada en el mismo navegante, aún cuando no se disponga de conexión a la red.

Mientras el puntero del ratón está localizado en el área de gráficos de la ventana principal, este será representado como una cruz, para poder centrar los objetos susceptibles de ser [picados](#); en cualquier otro caso aparecerá como una punta de flecha. Cualquier carácter que sea escrito en el teclado mientras la ventana gráfica esté 'enfocada' (lo que quiere decir que está activa) se redirecciona a la ventana de la línea de órdenes.. Esto le proporciona la facilidad de no tener que commutar de una a otra ventana para dar ordenes a RasMol.

La ventana principal puede redimensionarse en cualquier momento de la sesión. Lo cual tiene por efecto reescalar la imagen visualizada, si la hubiera. RasMol impone como limites al tamaño de la ventanael permitir visualizar las barras de desplazamiento y el menú superior, y que todo junto ocupe una única pantalla. En máquinas con insuficiente memoria de video los intentos de agrandar la ventana pueden fracasar, en cuyo caso RasMol produce el mensaje de error 'Renderer Error: Unable to allocate frame buffer!' o similar (según el sistema operativo en que corra).

En los sistemas de visualización de 8 bits, cuando el número de colores requerido por el programa exceda los colores libres en la pantalla, el programa usa su propio mapa de colores. El efecto es que temporalmente todo lo que aparezca en la pantalla que no sea la ventana gráfica de RasMol aparece en falsos colores cuando el puntero del ratón esté sobre dicha pantalla. Si el puntero del ratón se desplaza fuera de la pantalla de visualización de RasMol, los colores originales de la otra ventana vuelven, y la imagen sobre el fondo es a su vez mostrada en falso color. En cuanto el número de colores requerido vuelve a los límites de la capacidad de la pantalla vuelve la normalidad.

Controles del ratón

Aquí se presenta un resumen de los controles clic-a-y-arrastra de ratón de RasMol. El comando [set mouse](#) por defecto está ajustado a **set mouse rasmol**, que proporciona los controles resumidos a continuación. Sin embargo, también existen los modos **set mouse insight** y **set mouse quanta** (que no se muestran aquí).

Acción	Windows	Macintosh
Rotar X,Y	Izquierda	No modificado
Trasladar X,Y	Derecha	Comando*
Rotar Z	Shift-derecha	Shift-Commando*
Zoom	Shift-izquierda	Shift
Plano seccionado (slab)	Ctrl-izquierda	Ctrl

*En algunos Macs, la opción (Alt) tecla tiene el mismo efecto que el comando "key" de RasMol..

Barras de desplazamiento (Scroll)

La barra de desplazamiento (scroll bar) que atraviesa la parte inferior del marco se usa para rotar la molécula sobre el eje y, i.e. gira el punto mas próximo de la molécula a derecha o izquierda, mientras que la de la derecha del marco lo hace sobre el eje x, i.e. el punto mas próximo sube o baja. Cada una de estas barras tiene un indicador que señala la posición relativa de la molécula. El punto inicial de este indicador es el centro de cada barra. Esta barra de desplazamiento puede ser operado en otras dos formas. La primera pulsando cualquier botón del ratón en cualquier punto de la barra de desplazamiento, indicando una rotación relativa respecto a la posición actual. El segundo es picando una de las flechas en los extremos de las barras rotando la moléculas en cantidades incrementales fijas. Rotar la molécula por el segundo método puede causar que los indicadores de las barras de desplazamiento salten de un extremo a otro de la barra. Eso indica una revolución completa (desplazamiento de toda la longitud de la barra). El ángulo girado usando las flechas depende del tamaño de la ventana.

Picando

Para identificar un átomo o enlace concreto que esté visualizandose, RasMol permite al usuario picar sobre cualquier objeto que está en pantalla.. El ratón es utilizable para este fin siempre que esté mostrando como puntero la cruz, y que este puntero se encuentre sobre el objeto que se desea seleccionar. En ese momento pulsar cualquier botón del ratón tiene como resultado seleccionarlo. En el caso de que el ratón no este, exactamente sobre un objeto RasMol se encarga de adjudicar la selección al átomo más próximo.

El programa dará como salida en la ventana terminal (la de la línea de comando), el tipo atómico, número de serie, nombre y número del residuo. Si el átomo forma parte de una cadena con nombre, este tambien se visualiza.. A continuación se dan dos ejemplos de la salida generada seleccionando un átomo:

```
Atom: CA 349      Group: SER 70
Atom: O 526      Hetero: HOH 205   Chain: P
```

La primera línea describe el carbono alfa de la serina 70 de una proteina El número de serie de

Brookhaven para este átomo es el 349. La siguiente línea describe el átomo de oxígeno de una molécula de agua unida a la cadena P de la molécula principal. La palabra 'Hetero' distingue las moléculas heterogeneas (p. e. cofactores) de los residuos de la molécula principal, anotada como 'Group'. [Estos dos átomos son descritos por las dos expresiones 'SER70.CA' y 'HOH205:P.O', respectivamente, cuando se usan los comandos de RasMol **select** y **restrict**.]

Clicar el ratón sobre un átomo puede ser una forma de identificarlo (orden **identify**), pero también para hallar las distancias (**distances**) entre dos átomos (o para activar un monitor distante (**distance monitor**)), o el ángulo de enlace (**the bond angle**) definido por 3 átomos, el ángulo de torsión (**torsion angle**) definido por 4 átomos, activar o desactivar las etiquetas (**labels on** o **off**), o para especificar el centro de rotación (**center of rotation**). Vease la orden [set picking](#) para detalles.

Caja de control

Si RasMol detecta una caja de control unida al puesto de trabajo del usuario, automáticamente se podrá manipular la molécula interactivamente con los mandos. Una vez que RasMol arranca, marca los visualizadores LED sobre cada mando, 'ROTATE X', 'ROTATE Y', 'ROTATE Z' y 'ZOOM' en la fila superior de izquierda a derecha, y 'TRANS X', 'TRANS Y', 'TRANS Z' y 'SLAB' de izquierda a derecha en la fila de abajo. Rotando cada uno de los botones automáticamente se transformará y revisualizará, interactivamente, la molécula. Los controles solo serán activos mientras el puntero del ratón esté sobre la ventana gráfica. Si varias aplicaciones simultáneamente usan la caja de controles, deben recordarse las etiquetas o marcas asignadas a cada programa, ya que cada aplicación puede sobrescribir en los LEDs.

La rotación sobre los ejes X e Y actualizará automáticamente los indicadores en las barras de desplazamiento apropiadas. Todos los mandos de rotación giran la molécula 180 grados por cada vuelta completa del mando. El resto de los botones adecuan sus valores a los rangos permitidos; girar esos diales más allá de sus límites no provoca efecto alguno. El centro de rotación de la molécula puede cambiarse con el comando [centre](#) desde la línea de comandos, o con la orden [set picking centre](#) seguidos por un clic de ratón.

El mando 'ZOOM' permite ampliar interactivamente la molécula entre el 10% y el 200% del tamaño fijado por defecto como el original. Girando el dial en el sentido de las agujas del reloj aumenta el tamaño de la molécula y en el contrario la disminuye. Una revolución del mando se corresponde con el 100% de cambio de tamaño.

El mando 'SLAB', que solo es efectivo cuando la opción **slab** está activada, permite al usuario desplazar el plano frontal desde el más próximo punto al más lejano. Una rotación completa del botón **slab** se corresponde con un movimiento equivalente a la mitad de la distancia entre el más próximo y el más lejano de la molécula. El giro en el sentido de las agujas del reloj acerca el plano al usuario (incrementando el número de objetos visibles), y el contrario lo aleja (eliminando objetos de la visualización).

El modo de rebanado (**slab**) tecleando la orden 'slab on' en la línea de comandos o activando la opción slab del menú de opciones.

Desplazar a lo largo de los ejes X e Y permite mover el centro de la molécula en la zona gráfica de la pantalla. Rotación y ampliación también se ejecutan respecto al centro de rotación y al de la molécula, respectivamente, que a menudo pueden no coincidir con el centro de la zona gráfica. El mando TRANS Z no tiene efecto por el momento.

Interface de línea de comandos

RasMol mantiene una historia de las órdenes usadas recientemente, de tal forma que no se necesita reescribir repetidamente. Control P ^P en la línea de comandos recupera el anterior comando y control N ^N el siguiente. Estas órdenes pueden ser editadas como se describe mas adelante. Moviéndose atrás y adelante en la historia de las ordenes se deshacen las modificaciones creadas en la orden editada. El número de comandos retenidos depende de su longitud. RasMol puede retener mas ordenes cortas y menos si son largas.

Los usuarios de Microsoft Windows o de X windows y aquellos con un terminal 'vt100' compatible (como p.e. un 'xterm') pueden usar los caracteres de control del teclado para el puntero (las flechas) para hacer mas rápida la manipulación de la historia de órdenes. Las flechas derecha e izquierda tienen el mismo efecto que control F ^F y control B ^B, y mueven adelante y atrás un carácter cada vez.. Las flechas arriba y abajo simulan ^P y ^N, evocando las ordenes anterior y posterior respectivamente.

RasMol permite una edición básica de la línea de órdenes. Pulsando espacio-atrás, borrar (backspace, delete) o ^H (Control-H) se eliminará el carácter previo, ^D puede ser empleado para borrar el carácter en el que está el cursor. Diversos caracteres pueden emplearse para mover el cursor a lo largo de la línea de comandos. Los caracteres ^B, ^F, ^A y ^E mueven el cursor un solo carácter atrás, adelante, hasta el principio de la línea y al final de la línea, respectivamente. Si el cursor no está al final de la línea, los caracteres que se tecleen serán insertados sin sobrescribir. Tras editar una línea, con nueva-línea o retorno de carro la ejecutará, a partir de donde el cursor estuviera situado. Ya que RasMol es incapaz de mover el cursor hacia la línea previa, tenga cuidado cuando esté editando ordenes que ocupen varias líneas. En el caso de que otro proceso sobrescriba o corrompa la línea de comandos, el carácter ^L puede usarse para visualizar otra vez la línea en pantalla.

Dimensiones en RasMol

Todas las dimensiones en RasMol, como radios y distancias, pueden especificarse tanto en unidades RasMol como en Angstroms. Las unidades RasMol fueron creadas para poder especificar valores de tamaños razonables para operaciones ejecutadas en RasMol. Una unidad RasMol se corresponde con 1/250 de Angstrom, así que sus valores aparecen principalmente como cientos. Por esta razón, si a RasMol se le da una distancia dada en cifras que no contengan decimales se asume que son unidades RasMol. Por ejemplo, el comando 'spacefill 300' especifica una esfera con un radio de 300 unidades RasMol, o sea 1.2 Angstroms.

Sin embargo, las dimensiones en RasMol se pueden especificar, también, en Angstroms colocando un punto decimal en el número. Por ejemplo, 'spacefill 1.2' especifica una esfera con el radio en Angstroms. Esto es particularmente útil para la distancia de corte en expresiones con parámetro 'within' (en).

Archivos de inicialización de arranque

Cada vez que se arranca RasMol, busca un archivo de comandos de inicialización para ejecutarlo antes de presentar el prompt (inductor) al usuario. Este archivo se llama **.rasmolrc** en sistemas UNIX, y **RASMOL.INI** en sistemas VMS y Microsoft Windows. El formato y la ejecución de este archivo es idéntico tal de un fichero **script** de RasMol.

RasMol busca, en primer lugar, el fichero de inicialización en el directorio actual, y si no lo encuentra, en el hogar ("home") del usuario. En todos los sistemas la variable de entorno **HOME** se puede emplear para nombrar el directorio hogar apropiado. Si no existe un archivo personal de

personal inicialización se leerá el archivo **rasmolrc** (o **RASMOLRC**) en el directorio del sistema RasMol al que apunte la variable de entorno **RASMOLPATH**. Este directorio debería contener también el archivo de ayuda on-line **rasmol.hlp**. En sistemas UNIX, RASMOLPATH se ajusta, típicamente para ser '/usr/local/lib/rasmol'.

A diferencia de la orden **script**, **.rasmolrc**, no generará un mensaje de error si no encuentra el archivo. El archivo del sistema **rasmolrc** se emplea comúnmente por los gestores de sistemas para visualizar información sobre la instalación local y para que quien necesita ayuda reciba una orden eco de RasMol detallando un número de teléfono, o dirección de correo electrónico para contactar.

Comunicación entre procesos

RasMol soporta Comunicación entre procesos (Inter Process Communication (IPC)) en una u otra forma, en cualquier plataforma.. En Microsoft Windows, IPC se implementa usando Dynamic Data Exchange (DDE), en un Macintosh IPC se implementa usando Apple Events y en un sistema X Windows IPC se implementa usando el protocolo de comunicación de John Ousterhaut Tcl/Tk.

Cuando RasMol arranca en un sistema **X window** se registra ante el servidor X window Server como un **interprete Tcl**. Desde una aplicación Tcl tal como 'wish', se puede usar ordenes Tcl 'wininfo interps' para determinar el interprete registrado actualmente en la pantalla. En primera instancia RasMol se registra como 'rasmol', en segunda instancia como 'rasmol2', en tercera como 'rasmol #3' y así sucesivamente. El interprete Tcl puede fácilmente enviar una orden a rasmol empleando el comando **send** interconstruido. RasMol interpreta el parámetro de cadena para la orden **send** no como una función Tcl para ejecutar, sino como una orden de RasMol. Así, teclear 'send {rasmol} {background red}' en el interprete deseado causará que la ventana de visualización de RasMol cambie de color. Usando lo mismo codificado como protocolo Microsoft's DDE Execute, pueden enviarse ordenes múltiples en un único 'send', colocando los comandos consecutivamente entre corchetes. RasMol ejecutará todos los comandos que haya en un 'send' antes de refrescar una pantalla.

En **Microsoft Windows**, RasMol soporta un protocolo DDE completo. Las funciones más simples son accesibles enviando una orden de ejecución DDE a la aplicación 'RasWin' y alguna especificación. Esto arrancará una conversación DDE con la más recientemente arrancada instancia de RasMol. Aunque cualquier tema puede ser especificado, se recomienda emplear 'System' y/o 'RemoteControl'. De nuevo los contenidos del paquete ejecutable es una cadena para su ejecución por RasMol. Si el primer carácter distinto de espacio en blanco es una apertura de corchetes, la cadena se interpreta como una secuencia de ordenes encadenadas entre corchetes; pero la cadena puede constar de un único comando. Los comandos entre corchetes opcionalmente pueden separarse por espacios y/o dos puntos. RasMol puede también actuar como un 'servidor de datos' soportando uniones (links) calientes, fríos y templados. Los items DDE actualmente soportados incluyen 'Name', 'Image', 'Pick', 'Count' que significan nombre de molécula, imagen actualmente visualizada (en formato Microsoft DIB), la expresión átomo del último átomo picado (o una cadena vacía) y el número de átomos seleccionados, respectivamente. Usar un enlace caliente o templado (hot o warm link) en el item 'Pick', p.e., permite que una aplicación como Microsoft Word, Excel o Visual Basic responda cada vez que el usuario clicla un átomo en RasMol.

RasMol en un **Apple Macintosh** soporta **AppleEvents**. Actualmente solo soporta los cuatro sucesos 'core', Abrir aplicación, Abrir documento, Imprimir documento y salir de todo, ya que Abrir documento determina sus acciones por la firma de tipo de documento se puede usar para implementar un IPC genérico. Debido a que RasMol para Macintosh trata todos los archivos de

tipo 'RSML' como **script** (guiones), solo se necesita que la aplicación que envía coloque todos los comandos para ser ejecutados en un archivo temporal, ajustar el tipo del archivo a 'RSML' y entonces enviar a RasMol un Abrir documento AppleEvent con el nombre del archivo como parámetro.

Referencia de órdenes

RasMol permite ejecutar comandos interactivos tecleados tras el inductor "**RasMol**" en la ventana de la línea de comandos (una ventana blanca separada de la de gráficos). Las órdenes se dan siempre en líneas separadas. Se pueden utilizar tanto letras mayúsculas como minúsculas para los comandos, ya que es insensible a esta característica. Los espacios en blanco son ignorados excepto en aquellos casos en los que sirvan para separar las ordenes de sus argumentos. A continuación presentamos una lista de los comandos y claves reconocidos actualmente por RasMol. Para una información más detallada sobre cada una de las funciones de RasMol teclee "help <command>".

Los comandos/palabras-clave actualmente reconocidos por RasMol son los siguientes:

Backbone	Load	Show
Background	Monitor	Slab
Cartoon	Pause	Source
Centre	Print	Spacefill
Clipboard	Quit	SSBonds
Colour	Renumber	Stereo
Connect	Refresh	Strands
CPK	Reset	Structure
Dots	Restrict	Trace
Define	Ribbons	Translate
Echo	Rotate	Wireframe
Exit	Save	Write
HBonds	Script	Zap
Help	Select	Zoom
Label	Set*	

*Observe que el comando [Set](#) incluye un gran número de importantes opciones, incluyendo, por ejemplo,, [set picking](#) que permite la medida de **distancias, angulos y angulos de torsión** entre otras cosas.

Backbone

Sintaxis: backbone {<boolean>}
backbone <valor>

backbone dashes

La orden "**backbone**" de RasMol hace posible la representación del esqueleto del polipéptido como una serie de enlaces que conectan los carbonos alfas adyacentes de cada aminoácido en una cadena. La visualización de estos enlaces a lo largo del eje de la molécula se activa o desactiva con el parámetro de la orden, al igual que con la orden [wireframe](#). Con la orden "**backbone off**" se desactivan los "enlaces" seleccionados y con "**backbone on**" o un número se activan. El número puede ser utilizado para especificar en unidades angstroms o unidades de rasmol el radio del cilindro de la representación. Un valor de parámetro de 500 (2.0 angstroms) o mayor puede resultar en un error que aparecerá como "Valor del parámetro demasiado grande" (Parameter value too large). Los elementos de la representación se pueden colorear utilizando el comando de RasMol [colour backbone](#).

El esqueleto creado por esta orden se puede utilizar como un conjunto predefinido ("help sets") y como un parámetro para las órdenes "**set hbond**" y "**set ssbond**". El comando de RasMol [trace](#) es sinónimo de "backbone", en contraste con **backbone** que conecta los carbonos alfa mediante líneas rectas. Las representaciones usando [Wireframe](#), [backbone](#) y [strands](#) pueden visualizarse como líneas discontinuas. Esto se consigue al permitir usar la opción **dash** o **dashes** con dichas órdenes [wireframe](#), [backbone](#) y [strands](#).

Background

Sintaxis: `background <colour>`

La orden de RasMol **background** selecciona el color del "lienzo" de fondo. El color puede ser determinado a través del nombre del color o por medio de componentes triples de Rojo, Verde y Azul (RVA) separados por comas y delimitados por corchetes. Al teclear la orden [help colours](#) se obtendrá una lista de los nombres de colores predefinidos y reconocidos por RasMol. Si se utiliza X Windows, RasMol es capaz de reconocer aquellos colores que se encuentran en la base de datos de nombres de colores del servidor X.

La orden **background** es sinónima de [set background](#).

Cartoon

Sintaxis: `cartoon <number>`

La orden de RasMol **cartoon** extiende las representaciones de cintas para permitir mostrar la representación de Richardson (MolScript). Actualmente se implementan como cintas delgadas. La forma más simple de obtener este tipo de representación es su uso desde el menú "display". Si empleamos la orden "cartoon" o "cartoons" en la línea de órdenes de RasMol se verán así representados los residuos seleccionados actualmente como una cinta estrecha, cuya anchura de especifica con los argumentos de la orden. Si usamos la orden **cartoon** sin parámetro alguno el ancho de las cintas tomará del tipo de estructura secundaria de la proteína, tal y como se describe

en el comando ribbons. Por defecto, el extremo C-terminal de las hojas beta representará como la cabeza de la flecha..

Todo esto puede mejorarse o desactivarse usando la orden [set cartoons](#). La profundidad de la cinta se puede fijar usando el comando. Este comando, sin parámetro devuelve ambas opciones a sus valores por defecto.

Centre

```
Sintaxis:  center {<expression>}
           centre {<expression>}
```

La orden **center** determina el punto alrededor del que la orden [rotate](#) y las barras de desplazamiento hacen girar la molécula en cuestión. Sin un parámetro, la orden "centre" reubica el centro de rotación en el centro de gravedad de la molécula. Si se especifica una expresión de átomo, RasMol hace girar la molécula alrededor del centro de gravedad del grupo de átomos especificados por la expresión. Por lo tanto, si la expresión especifica un único átomo, dicho átomo permanecerá "inmóvil" durante las rotaciones.

Clipboard

```
Sintaxis:  clipboard
```

La orden de RasMol **clipboard** coloca la imagen representada en un determinado momento en "clipboard" de gráficos local.

Nota: esta orden aún no se puede utilizar con los sistemas UNIX o VMS; está ideada para hacer más fácil la transferencia de imágenes entre aplicaciones bajo Microsoft Windows o Apple Macintosh

Si se está operando con el programa RasMol sobre los sistemas UNIX y VMS, esta función se puede realizar generando una "raster image" en un formato que el programa receptor puede leer usando la orden de RasMol [write](#).

Colour

```
Sintaxis:  colour {<object>} <colour>
           color  {<object>} <colour>
           color  {<object>} <[RGB triplet]>
```

Esta orden sirve para colorear los átomos (u otros elementos) de la región seleccionada. El color puede ser determinado a través del nombre del color o de componentes triples de Rojo, Verde y Azul (RVA) separados por comas y delimitados por corchetes. Un triplete típico es [255,255,255] que representa el color blanco. Al teclear el comando [help colours](#) se obtendrá una lista de los nombres de colores predefinidos reconocidos por RasMol.

Los objetos permitidos son **atoms**, **bonds**, [backbone](#), [ribbons](#), [labels](#), [dots](#), [hbonds](#), y [ssbonds](#).. Si no se especifica ningún objeto, la clave que, por omisión, se adopta es **atom**. Cierta tipo de objetos definen algunos esquemas de colores.

El esquema de color "none" (ninguno) puede ser aplicado a todos los objetos excepto átomos y puntos, dejando claro que los objetos seleccionados no tienen color propio sino que usan el color de sus átomos asociados (es decir, los átomos que ellos conectan). Los elementos del átomo se pueden colorear también por [cpk](#), [amino](#), [chain](#), [group](#), [shapely](#), [structure](#), [temperature](#), [charge](#), y [user](#). Con la ayuda de [type](#), se pueden colorear también los enlaces de hidrógeno y con [electrostatic potential](#) las superficies de punto.

Para obtener más información vea [colours](#).

Connect

Sintaxis: `connect {<boolean>}`

La orden de RasMol **connect** obliga a RasMol a (re) calcular la conectividad de la molécula con la que estamos trabajando. Si el archivo original de entrada de datos contenía información sobre la conectividad, se descarta. La orden **connect false** utiliza un algoritmo heurístico muy rápido adecuado para determinar el enlace en grandes biomoléculas tales como proteínas o ácidos nucleicos. La orden **connect true** usa un algoritmo más lento pero más exacto basado en radios covalentes que es más apropiado para moléculas que contienen elementos inorgánicos o "anillos tensionados". Si no se introduce ningún parámetro, RasMol determina qué algoritmo utilizar tomando como base el número de átomos en el archivo. Una cantidad mayor que 255 átomos hace que RasMol utilice la ejecución más rápida. Este es el método aplicado para determinar el enlace, si es necesario, cuando una molécula es leída en primer lugar utilizando la orden "[load](#)".

Define

Sintaxis: `define <identifier> <expression>`

La orden **define** permite al usuario asociar un grupo arbitrario de átomos con un identificador único. Esto hace posible la definición de grupos definidos por el usuario. A estos grupos se les declara estáticamente, es decir, una vez definidos, el contenido de los grupos no cambian, incluso

si la expresión que los define depende de las transformaciones llevadas a cabo en ese preciso momento y de la representación de la molécula.

Dots

```
Sintaxis: dots {<boolean>}
          dots <value>
```

La orden **dots** se usa con el fin de generar una superficie de puntos Van der Waal alrededor de los átomos seleccionados en un determinado momento. Las superficies de puntos visualizan puntos a una distancia regular en una esfera de radio Van der Waas alrededor de cada átomo seleccionado. Aquellos puntos que estarían "enterrados" dentro del radio de Van der Waal de cualquier átomo (seleccionados o no) no se visualizan. La orden **dots on** borra cualquier superficie de puntos existentes y genera una superficie de puntos alrededor del conjunto de átomos actualmente seleccionados con una densidad de error de puntos de 100. El comando **dots off** borra cualquier superficie de puntos existente. Podemos especificar la densidad de puntos proporcionando un parámetro numérico entre 1 y 1000. Este valor corresponde aproximadamente al número de puntos que aparece en la superficie de un átomo de tamaño medio.

Por defecto, el color de cada punto en la superficie de puntos es el mismo que el del átomo que se encuentre más próximo a él en el momento de generar la superficie. Con la orden [colour dots](#) podemos cambiar el color de la superficie de puntos completa.

Echo

```
Sintaxis: echo {<string>}
```

La orden de RasMol **echo** se utiliza para visualizar un mensaje en la pantalla del terminal de RasMol. El parámetro de cadena puede ser opcionalmente delimitado en caracteres seprados por comillas. Si no especificamos ningún parámetro, la orden **echo** visualiza una línea en blanco. Este comando es especialmente útil a la hora de visualizar un texto del archivo de RasMol [script](#)

Exit

```
Sintaxis: exit
```

El comando **exit** de RasMol se usa para terminar la ejecución de un **script** (volviendo a la línea de órdenes, o el **script** que lo había llamado), o un interproceso de comunicación, cerrando la ligadura entre los dos programas.

La orden [quit](#), por contra, termina la ejecución de RasMol.

HBonds

```
Sintaxis:  hbonds {<boolean>}
           hbonds <value>
```

La orden de RasMol **hbond** se utiliza para representar los enlaces de hidrógeno del eje de la molécula de proteína. Esta información sirve para evaluar la estructura secundaria de la proteína. Los enlaces de hidrógenos se representan como líneas punteadas o cilindros entre los residuos donante y aceptante. La primera vez que usamos la orden **hbond**, el programa se encarga primeramente de buscar la estructura de la molécula con el fin de encontrar residuos enlazados de hidrógenos y después de informar al usuario del número de enlaces. La orden **hbonds on** visualiza los enlaces seleccionados como líneas punteada y el comando **hbonds off** lo desactiva. Podemos cambiar el color de los elementos del enlace hidrógeno (hbond) con el comando [colour hbond](#). En un principio, cada enlace hidrógeno es del color de los átomos conectados con él.

Por defecto, las líneas punteadas aparecen entre el oxígeno aceptante y el nitrógeno donante. En su lugar, con la orden [set hbonds](#) se pueden utilizar las posiciones del carbono alfa de los residuos apropiados. Esto es especialmente útil cuando examinamos proteínas en representación de "eje" (**backbone**).

Help

```
Sintaxis:  help {<topic> {<subtopic>}}
           ? {<topic> {<subtopic>}}
```

La orden de RasMol **help** provee ayuda en línea (on-line) sobre un tema concreto.

Label

```
Sintaxis:  label {<string>}
          label <boolean>
```

La orden de RasMol "label" permite asociar una cadena de texto formateado aleatoriamente con cada átomo seleccionado en un preciso momento. Esta cadena puede contener, ya insertados, especificadores de expansión (expansion specifiers) que visualizan las propiedades del átomo al que se está etiquetando. Un especificador de expansión consiste en un carácter "%" seguido de un único carácter alfabético que especifica la propiedad que va a ser visualizada. Se puede visualizar un carácter "%" real usando el especificador de expansión "%%".

Con el comando **label off** se desactiva el etiquetaje de los átomos seleccionados actualmente. Por defecto, si no se designa ninguna cadena como parámetro, RasMol utiliza etiquetas adecuadas para la molécula con la que trabajamos.

La orden **colour label** hace posible el cambio de color ([colour label](#)) de cada etiqueta. Por defecto, cada etiqueta obtiene el mismo color que el del átomo al que está adjunta. Podemos cambiar el tamaño del texto visualizado con la orden [set fontsize](#).

Al teclear "help specifiers" obtenemos una lista de especificadores de expansión:

%a	Nombre del átomo.
%b %t	factor B/temperatura.
%c %s	Identificador de cadena.
%e	Símbolo del elemento atómico.
%i	Número serial del átomo.
%m	Código de una letra del aminoácido.
%n	Nombre del residuo en forma de código de tres letras.
%r	Número de residuo.

La sintaxis de las expresiones atómicas de RasMol permiten seleccionar la conformación de la molécula individual si está presente en un fichero RMN (**NMR file**). La forma más simple es la sintaxis:

```
::25           para seleccionar el modelo 25 de la molécula.
```

Lo que equivale a la expresión atómica
`model = 25`

de la misma forma que la orden **model** puede ser usada en expresiones comparativas. La forma más general de una expresión atómica es ahora `CYS32:A:25.SG` que hace referencia al azufre gamma de la cisteína 32 de la cadena A del modelo 25.

Las cadenas individuales pueden especificarse por la sintaxis ":A" para la cadena A, o ":1" para la cadena 1 (i.e. el comodín puede eliminarse de la expresión "*:A"). Podemos extender esta idea a los modelos de RMN; ":A:4" significa cadena A del modelo 4, y ":4" todos los átomos de todas las cadenas del modelo 4.

Load

```
Sintaxis: load {<format>} <nombre de archivo>
          load {<format>} inline
```

Carga un archivo de coordenadas moleculares en RasMol2. Los formatos válidos son Brookhaven Protein Databank (**PDB**), **Alchemy** de Tripos Associates y Sybyl **Mol2**, **Mol** de Molecular Design Limited (**MDL**), Minnesota Supercomputer Centre's (MSC) **XYZ (XMol)** y **CHARMm**. También, **mopac** (formato de archivo mopac; bien sea cartesiano o formato de z-matrix), **nmrpdb** (formato de archivo multi-pdb nmr). Si no se especifica el formato, se asume que por defecto será **pdb**. Solo una molécula puede ser visualizada en un momento dado. Antes de cargar una nueva molécula hay que eliminar la anterior con la orden de RasMol [zap](#).

La orden **load** selecciona todos los átomos de la molécula, centrándola en la pantalla y produciendo un modelo coloreado (colores CPK) en el modelo de alambre (wireframe). Si la molécula no contiene enlaces (i.e. contiene solo carbonos alfa), se dibuja como un esquema (backbone) que une los carbonos alfa. Si el archivo especifica menos enlaces que átomos, RasMol determina la conectividad usando la orden [connect](#).

El comando **load inline** también permite **almacenar coordenadas atómicas en scripts** para permitir una integración mejor en los visualizadores WWW. Un comando **load** ejecutado dentro de un archivo **script** puede especificar la palabra **inline** en lugar de un nombre de archivo. Esta opción especifica que las coordenadas de la molécula que se debe cargar se almacenan en el mismo archivo como las órdenes que se están ejecutando. Habitualmente esto se usa con el formato de la orden **load pdb inline**, que se sigue de un cierto número de ordenes y finaliza con **exit**. La orden **exit** termina la ejecución del actual **script** y devuelve el control a la línea de comandos (o el fichero **script** desde el que se le que llamó). Esto significa que ninguna línea que siga a **exit** será interpretada por RasMol. Todo ello puede ser usado para almacenar coordenadas atómicas en un fichero de formato PDB. Ya que en el formato PDB de Brookhaven, cualquier línea que el intérprete no reconozca debería ignorarse, solo las líneas que empiezan por ATOM, HETATM, TER, etc. se examinan. Así un archivo puede ser a la vez un **script** de RasMol y un archivo PDB simultáneamente, lo que permite que las coordenadas y la representación se transmitan en un único fichero. Un posible uso es un prefijo standard de **script** de RasMol que puede ser concatenado con un archivo adecuado PDB.

Monitor

```
Sintaxis: monitor <number> <number>
          monitor {<boolean>}
```

La orden **monitor** de RasMol permite activar la visualización de monitor de distancia. Un monitor de distancia es una línea discontinua entre un par cualquiera de átomos, opcionalmente etiquetado con la distancia que separa a ambos.

monitor <número> <número> añade tal monitor de distancia entre los dos átomos indicados por los los números dados como parámetros.

Los monitores de distancia se desconecta con el comando **monitors off**. Por defecto, los monitores visualizan la distancia entre sus dos puntos extremos como una etiqueta en el centro del monitor. Estas etiquetas de distancia pueden ser desconectadas mediante la orden [set monitors off](#), y reactivados con [set monitors on](#). Como muchas de las demás manifestaciones el

color de un monitor se toma del color de sus extremos a menos que se especifique con la orden [colour monitors](#).

Los monitores de distancia pueden ser añadidos a una molécula interactivamente, con el ratón, usando el comando [set picking monitor](#). Clicando sobre un átomo produce su identificación en la línea de comandos. Además cada átomo picado produce un incremento de un módulo contador tal como el modo monitor, y cada segundo átomo visualiza la distancia entre este y el picado previamente. La tecla de desplazamiento puede usarse para formar monitores de distancia entre el átomo fijado y distintas posiciones consecutivas. Un monitor de distancia puede también eliminarse seleccionando el par apropiado de átomos (los unidos en el monitor de distancia) una segunda vez.

Pause

Sintaxis: `pause`
`wait`

La orden **pause** de RasMol se usa en archivos **script** para detener momentaneamente la ejecución de dichos ficheros para su manipulación local con el ratón, hasta que al pulsar cualquier tecla se reanuda la ejecución. **wait** es sinónimo de **pause**.

Este comando puede ser ejecutado en los ficheros **script** para suspender la ejecución secuencial de ordenes permitiendo al usuario examinar la imagen actual. Cuando RasMol ejecuta una orden "pause" en un archivo **script**, suspende la ejecución del resto del fichero, refresca la imagen en la pantalla y permite la manipulación de la imagen usando el ratón y las barras de desplazamiento, o redimensionando la ventana gráfica. Una vez que se presiona una tecla, el control vuelve al archivo a la línea consecutiva a la orden "pause". Mientras el fichero de órdenes se está ejecutando la molécula puede rotarse, trasladarse, escalarse, rebanarse (**slab**) y picarse como habitualmente, pero todos los comandos del menú están desactivados. El comando "pause" se podrá, probablemente, emplear mas efectivamente con ordenes "echo" en demostraciones para enseñanza, en las que se presenta una descripción de la imagen que se está visualizando al usuario/alumno. Lo razonable sería que la línea anterior a pause fuera: "echo Presione una tecla para continuar".

La ejecución de un **script** puede ser cancelada presionando Control-D o Control-Z (en sistemas VAX/VMS, Control-C) mientras se está en una pausa. La orden [set picking none](#) desactiva el picado, lo que evita la visualización de mensajes espereos mientras el **script** está suspendido con la orden **pause**.

Print

Sintaxis: `print`

La orden de RasMol **print** envía la imagen actualmente visualizada a la impresora local, si no se especifica otra, utilizando el controlador original de la impresora del sistema operativo. Nota: este comando todavía no se puede utilizar con los sistemas UNIX o VMS. Esta ideado para la utilización y aprovechamiento de los controladores de impresora de Microsoft Windows y Apple Macintosh. Así, por ejemplo, hace posible imprimir una imagen directamente en una impresora de matriz de puntos.

Si utilizamos RasMol con lo sistemas UNIX y VMS esta función se puede llevar a cabo creando un archivo PostScript con los comandos [write ps](#) o [write vectps](#) e imprimiendolo posteriormente; o bien mediante la creación de un archivo de imágenes exportables y utilizando alguna herramienta para mandarlo a la impresora local.

Las tecnicas de impresión con alta relolución (**high-resolution**) se discuten en la [FAQ](#).

Quit

Sintaxis: `quit`

Salir del programa RasMol. El comando de RasMol [exit](#) tiene una función diferente.

Refresh

Sintaxis: `refresh`

La orden de RasMol **refresh** se usa en archivos **script** para redibujar la imagen local.

Renumber

Sintaxis: `renumber [{-} <value>]`

El comando de RasMol **renumber** numera secuencialmente los residuos en una cadena macromolecular. El parámetro opcional especifica el valor del primer residuo de la secuencia; por defecto, este valor es uno. En el caso de la proteína, a cada aminoácido se numera consecutivamente desde el término N hasta el C. En los ácidos nucleícos, cada base es numerada desde el término 5' hasta el 3'. En la base de datos actual, todas las cadenas se numeran y se ignoran los huecos en la secuencia original. El valor de comienzo de la numeración puede ser negativo.

Reset

Sintaxis: `reset`

La orden de RasMol **reset** restaura la transformación de la imagen original y el centro de la rotación. La escala se sitúa en su valor por defecto, [zoom 100](#); el centro de rotación se sitúa en el centro geométrico de la molécula actualmente cargada; con [centre all](#), este centro se traslada al centro de la pantalla y el punto panorámico a la orientación establecida inicialmente.

Es importante no confundir éste con la orden de RasMol [zap](#), que borra la molécula almacenada actualmente, volviendo al estadio inicial del programa.

Restrict

Sintaxis: `restrict {<expression>}`

La orden de RasMol **restrict**, por una parte, define la parte de la molécula seleccionada actualmente y, por otra, inhabilita (la mayoría o) aquellas partes de la molécula no seleccionadas. Las acciones posteriores llevadas a cabo por otras órdenes que modifican el color de la molécula o la representación afectan únicamente a la región de la molécula determinada en dicho momento.

El parámetro de una orden **restrict** es una expresión RasMol de átomo evaluada para cada átomo de la molécula actual. Ésta orden es muy similar a [select](#) con la diferencia de que "restrict" desactiva las representaciones de [wireframe](#), [spacefill](#) y [backbone](#) en la parte no seleccionada de la molécula.

Para obtener más información sobre las expresiones de átomos RasMol, teclee "help expression".

Ribbons

Sintaxis: `ribbons {<boolean>}`
`ribbons <value>`

La orden de RasMol "ribbons" visualiza la proteína o ácido nucleico actualmente cargados como una superficie de "cintas" densa y lisa que pasa a lo largo del eje de la proteína. La cinta aparece entre los aminoácidos cuyos carbonos alfa están seleccionados. Podemos cambiar el color de la cinta con la orden de RasMol [colour ribbon](#). Si el color es **none** (ninguno, el preestablecido),

toma el color del carbono alfa que se encuentre a su misma altura. El parámetro opcional en las unidades normales de RasMol determina el ancho de la cinta en cada posición.

Por defecto, la anchura de la cinta se adopta de la estructura secundaria de la proteína o, para los ácidos nucleicos, de un valor constante de 720 (2,88 angstróms). La anchura por defecto de las hélices alfas de las proteínas y de las hojas plegadas beta es de 380 (1,52 angstróms) y de 100 (0,4 angstróms) para los giros y las hélices al azar. La asignación de la estructura secundaria es extraída del archivo PDB o se calcula utilizando el algoritmo DSSP como hace la orden [structure](#). Este comando es parecido a [strands](#) que representa la cinta biomolecular como cintas curvadas transparentes.

Rotate

Sintaxis: `rotate <axis> {-} <value>`

Esta orden hace girar a la molécula alrededor del eje especificado. Los valores permitidos para el eje son "x", "y" y "z". El parámetro entero establece en grados el ángulo que la estructura rotará. En el caso de los ejes X e Y, los valores positivos desplazan el punto más cercano hacia arriba y a la derecha: mientras que los valores negativos lo desplazan hacia abajo y a la izquierda. En cuanto al eje Z, una rotación positiva actúa en la dirección de las agujas del reloj y una negativa en sentido opuesto.

Save

Sintaxis: `save {pdb} <nombre de archivo>`
`save alchemy <nombre de archivo>`
`save mdl <nombre de archivo>`

Guarda el grupo de átomos seleccionados actualmente en un fichero Brookhaven Protein Database (PDB) o un archivo de formato Alchemy (tm). La diferencia existente entre esta orden y [write](#) se ha eliminado. La única diferencia estriba en que sin un especificador de formato el comando "save" crea un archivo "PDB", mientras que [write](#) genera una imagen "GIF".

Script

Sintaxis: `script <nombre de archivo>`

El comando de RasMol **script** lee un conjunto de ordenes RasMol secuencialmente a partir de

un fichero de texto y los ejecuta. Ello permite ejecutar secuencialmente las ordenes que usamos, y efectuarlas con un único comando. Un archivo **script** puede contener un segundo comando llegando a una "profundidad" máxima de 10, lo que permite secuencias complicadas de acciones a ejecutar. RasMol ignora todos los caracteres tras el primer '#' en cada línea, lo que permite comentar los **scripts**. Los ficheros **script** a menudo se comentan usando el comando de RasMol [echo](#).

La forma más común de crear un archivo **script** de RasMol es por medio de las órdenes [write script](#) o [write rasmol](#) con el fin de producir la secuencia de órdenes que se necesitan para volver a generar la imagen actual, la representación y los colores de la molécula visualizada en ese momento. Tales ficheros generados automáticamente producen solo una imagen.

Se pueden, también, crear archivos **script** de RasMol manualmente con un editor de texto. Tales **script**, con el uso de [pause](#) y [refresh](#), pueden producir "películas". Existe una [guía de creación de scripts](#) muy detallada.

Las órdenes de RasMol **source** y **script** son sinónimos.

Select

Sintaxis: `select {<expression>}`

Define la parte de la molécula ya seleccionada. En lo sucesivo, todos las órdenes que manipulan una molécula o modifican su color o representación, afectan únicamente a la parte ya seleccionada. El parámetro de una orden **select** es una expresión RasMol interpretada para cada átomo de la molécula con la que trabajamos. La parte de la molécula actualmente seleccionada son esos átomos que hacen que la expresión sea interpretada como verdadera. Para definir la molécula entera se utiliza el comando de RasMol **select all**. Los parámetros [hetero](#) e [hydrogen](#) determina el comportamiento del comando **select** cuando no aparece definido por ningún otro parámetro.

Al teclear "help expression" se obtiene más información sobre las expresiones de átomos RasMol.

Existe una introducción diferente en [Comandos selectos de Chime y RasMol](#).

Set

Sintaxis: `set <parameter> {<option>}`

El comando de RasMol **set** permite al usuario cambiar algunos parámetros internos del programa tales como los que controlan las opciones de representación. Cada parámetro posee una serie propia de opciones de parámetros permisibles. Normalmente, la omisión de la opción parámetro reajusta dicho parámetro a su valor por defecto.

A continuación aparece una lista de nombres válidos de parámetros; si se requiere más información sobre cada parámetro, teclee "help set parameter":

[Ambient](#)
[Axes](#)
[Background](#)
[BackFade](#)
[BondMode](#)
[Bonds](#)
[BoundingBox](#)
[Cartoon](#)
[Display](#)
[FontSize](#)
[Hbonds](#) [SlabMode](#)
[Solvent](#)
[Specular](#)
[SpecPower](#)
[SSBonds](#)
[StereoViewing](#)
[Strands](#)
[TransparentGif](#)
[UnitCell](#)
[VectPS](#)
[Write](#)

Show

```
Sintaxis:  show information
           show sequence
           show symmetry
```

La orden de RasMol **show** muestra detalles del estado de la molécula con la que trabajamos. El comando **show information** proporciona el nombre de la molécula, la clasificación, el código PDB y el número de átomos, cadenas y grupos que contiene. En caso de que se hayan determinado el enlace de hidrógeno, los puentes de disulfuro o la estructura secundaria, el número de enlaces por puente de hidrógeno, enlaces disulfuro, hélices, plegamientos y giros beta se visualizan respectivamente. El comando **show sequence** facilita una lista de los residuos que componen cada cadena de la molécula.

Slab

```
Sintaxis:  slab {<boolean>}
           slab <value>
```

La orden de RasMol **slab** activa, desactiva, o sitúa el plano que corta el eje Z de la molécula. El programa sólo dibuja aquellas porciones de la molécula que se encuentran más alejadas que el plano de corte respecto al observador. Los valores oscilan desde cero en la parte más trasera de la molécula y 100, completamente delante de la molécula. Valores intermedios determinan el porcentaje de la molécula que va a ser dibujada.

La rotación de la molécula es a través del plano fijado para **slab**. Sin embargo, [stereo](#) no produce resultados válidos cuando la orden **slab** está activa.

Ver también [set slabmode](#).

Spacefill

```
Sintaxis:  spacefill {<boolean>}
           spacefill temperature
           spacefill user
           spacefill <value>
```

La orden de RasMol **spacefill** (espacio relleno) se usa para representar todos los átomos actualmente seleccionados como esferas sólidas. Este comando se emplea para producir tanto esferas unidas como modelos de bola y barra de una molécula. El comando, **spacefill true**, el por defecto, representa cada átomo como una esfera de Van der Waal. El comando **spacefill off** anula la representación de los átomos seleccionados como esferas. Se puede especificar el radio de la esfera como un número entero en unidades RasMol (1/250 Angstrom) o un valor que contenga punto decimal. Un valor igual o superior a 500 (2.0 Angstroms) produce un error del tipo "Parameter value too large" (valor de parámetro demasiado grande). La opción **temperature** (temperatura) iguala el radio de la esfera al del valor almacenado en su campo de temperatura. Los valores negativos o cero no tienen efecto; mientras que aquéllos mayores que 2,0 se truncan a 2. La opción **user** (usuario) hace que el radio de cada esfera sea especificado a través de líneas adicionales en el archivo PDB de la molécula por medio de una extensión del registro COLOR de Raster 3D.

Los comandos **cpk** y **spacefill** son sinónimos".

SSBonds

```
Syntax:  ssbonds {<boolean>}
         ssbonds <value>
```

La orden **ssbonds** se utiliza para representar los puentes disulfuro de la molécula de proteína, bien como líneas punteadas, bien como cilindros entre las cisteínas conectadas. La primera vez que se usa la orden **ssbonds**, el programa busca la estructura de la proteína con el fin de encontrar pares de semicisteínas (cisteínas cuyos sulfuros estén unos 3 angstróms de la otra) e informa al usuario del número de puentes. La orden **ssbonds on** visualiza los enlaces

escogidos como líneas de puntos y `ssbonds off` desactiva la visualización de enlaces-azufre en el área seleccionada. La selección de puentes de disulfuro se hace de la misma forma que la de enlaces normales, y podemos ajustarla utilizando la orden [set bondmode](#). El color de los enlaces de disulfuro se puede cambiar con la orden [colour ssbonds](#). Por defecto, cada enlace de disulfuro posee el color de los átomos que están conectados a él.

Por defecto, los enlaces disulfuro se dibujan entre los átomos de sulfuro del grupo cisteína. En vez de esto, con el comando [set ssbonds](#) se puede utilizar también la posición de los carbonos alfas de cisteína.

Stereo

```
Syntax: stereo on
         stereo [-] <number>
         stereo off
```

La orden `stereo` de RasMol activa una visualización de imágenes estéreo lado con lado. Esta visualización puede conectarse y desconectarse bien mediante el menú de opciones (**Options menu**) seleccionando `stereo`, o bien tecleando la orden `stereo on` o `stereo off`. El ángulo de separación entre las dos vistas puede regularse con la orden [set stereo \[-\] <number>](#), donde los valores positivos producen una visión "bizca" y los negativos "relajada" (ojos en pared). Incluir `[-] <number>` en la orden `stereo`, como por ejemplo en `stereo 3` o `stereo -5`, también permite controlar el ángulo y dirección.

El comando estereo solo está parcialmente implementado. Cuando se activa la imagen estereo no queda bien centrada. (Esto se puede arreglar con [translate x -<number>](#).) Tampoco está soportada en el vector de archivos de salida PostScript, no es salvada por la orden `write script`, y en general no está bien intercomunicadas con diversas otras funciones del programa. Cuando se activa [slab](#) junto a estereo, la imagen resultante no es una visión estereoscópica.

Strands

```
Syntax: strands {<boolean>}
         strands <value>
         strands dashes
```

La orden de RasMol `strands` visualiza la proteína o ácido nucleico con que trabajamos como una "cinta" lisa curvada "depth-cued" que pasa a lo largo del eje de la proteína. La cinta está

compuesta de una serie de filamentos que corren paralelos entre sí a lo largo del plano peptídico de cada residuo. La cinta aparece dibujada entre aquellos aminoácidos cuyo carbono alfa haya sido seleccionado. La orden [colour ribbon](#) cambia el color de la cinta. Si el color de la cinta con la que trabajamos es (el inicial) **none** (ninguno), adopta el color del carbono alfa con el que se encuentre en su recorrido longitudinal. El filamento central y aquél que se encuentra en la parte más externa se pueden colorear independientemente con las órdenes [colour ribbon1](#) y [colour ribbon2](#), respectivamente. La orden [set strands](#) altera el número de filamentos de la cinta.

El parámetro opcional determina la anchura de la cinta en cada posición en unidades RasMol. Por defecto, la cinta adquiere una anchura extraída de la estructura secundaria de la proteína o de un valor constante de 720 para ácidos nucleicos (lo cual significa una anchura de 2,88 angstróms). La anchura inicial de las hélices alfas de proteína y de las hojas plegadas beta es de 380 (1,52 angstróms) y 100 (0.4 angstróms) para giros y espirales. La asignación de la estructura secundaria procede del archivo PDB o se calcula utilizando el algoritmo DSSP como ocurre con la orden [structure](#). Esta orden es parecida a [ribbons](#) que representa la cinta biomolecular como una superficie sombreada lisa.

Las representaciones [wireframe](#), [backbone](#) y [strands](#) puede ser visualizada con líneas "borradas" (dotted). Se activa añadiendo los parámetros **dash** o **dashes** a las órdenes [wireframe](#), [backbone](#) and [strands](#).

Structure

Syntax: `structure`

La orden **structure** calcula las asignaciones de estructura secundaria para la proteína cargada. Si el archivo original PDB contenía registros de asignaciones estructurales (HÉLICE y HOJA PLEGADA), éstas se descartan. En primer lugar se localizan los enlaces de hidrógenos de la molécula, en caso de que no se hubiera hecho previamente. La estructura secundaria es determinada a través de los algoritmo DSSP de Kabsch y Sander. Una vez finalizado, el programa informa del número de hélices, filamentos y giros encontrados.

Trace

Syntax: `trace {<boolean>}`
`trace <value>`
`trace temperature`

La orden de RasMol **trace** visualiza una línea lisa entre dos carbonos alfa consecutivos. Esta línea no pasa exactamente a través de la posición del carbono alfa de cada residuo, sino que sigue la misma vía de [ribbons](#), [strands](#), y [cartoons](#). Advierta que cada residuo puede ser visualizado como "ribbon", "strands", "cartoon" o trace, y activando una de esas representaciones

se inactivan las otras. Sin embargo, un residuo puede visualizarse simultáneamente como backbone y una de las representaciones anteriores [aunque esto podría cambiar en versiones futuras de RasMol]. [Antes de la versión 2.6, **trace** era sinónimo de **backbone**.]

Trace temperature permite visualizar la columna como un cilindro mas ancho para factores de alta temperatura y mas delgado para factores de baja. Esta representación es util para cristalografos and espectroscopista NMR.

Translate

Syntax: `translate <axis> {-} <value>`

La orden de RasMol **translate** mueve la posición del centro de la molécula en la pantalla. El parámetro de eje especifica a lo largo de qué eje se va a trasladar la molécula y el parámetro entero especifica la posición absoluta del centro de la molécula desde la parte central de la pantalla. **x**, **y**, y **z** son los valores permitidos para el parámetro eje. Los valores de desplazamiento deben oscilar entre -100 y 100, más allá de ellos, la molécula desaparece de la pantalla. Un desplazamiento positivo **x** mueve la molécula hacia la derecha; y uno positivo **y** hacia abajo. Las órdenes `translate x 0` y `translate y 0` centran la molécula en la pantalla.

Wireframe

Syntax: `wireframe {<boolean>}`
`wireframe <value>`
`wireframe dashes`

La orden **wireframe** representa cada enlace de la región seleccionada como un cilindro, una línea o un vector depth-cued. Las órdenes `wireframe 0` o `wireframe on` activan la visualización de los enlaces a manera de vectores depth-cued (aparecen más oscuros cuanto más lejos estén del observador). Los enlaces seleccionados se visualizan como cilindros especificando un radio como un número entero en unidades RasMol o como decimal en angstróms. Un valor de parámetro de 500 (2.0 angstróms) o más resulta en un error de "valor de parámetro demasiado grande" ("Parameter value too large"). La orden [colour bonds](#) colorea los enlaces.

Las representaciones [wireframe](#), [backbone](#) y [strands](#) pueden visualizarse con líneas "borradas" (dotted). Esto se consigue con los parámetros `dash` o `dashes` de las órdenes [wireframe](#), [backbone](#) y [strands](#).

Write

Syntax: `write {<format>} <nombre de archivo>`

Sirve para copiar la imagen en un archivo en un formato de exportación estándar. Los formatos de archivos de imágenes actualmente disponibles son: "**gif**" (Compuserve GIF), "**iris**" (formato IRIS RBG), "**ppm**" (Portable Pixmap), "**ras**" (Archivo exportable de Sun), "**ps**" y "**epsf**" (PostScript Encapsulado), "**monops**" (PostScript Monochrome Encapsulado), "**vectps**" (Vector PostScript, *ver mas adelante*), "**bmp**" (mapa de bits de Microsoft) y "**pict**" (Apple PICT).. La orden **write** sirve también para crear órdenes "scripts" para otros programas de gráficos. El formato "script" copia un archivo que contiene ordenes de RasMol para reproducir la imagen actual. El formato **molscript** copia las órdenes necesarias para representar la imagen de la molécula con la que trabajamos como cintas en el programa Molscript de Per Kraulis; mientras que el formato **kinemage** las órdenes para el programa Mage de David Richardson.

La orden de RasMol **write vectps <nombre de archivo>** crea un archivo postscript para la resolución de la impresora, que puede ser enviado a imprimir. (Este comando no aparece en el menú de exportar de RasMol ni tiene ayuda en línea. La orden **write ps <nombre de archivo>** crea el archivo para la resolución de la pantalla). La inconveniente de postscript vectorial es que no soporta "ribbons", "cartoons", "strands", o "traces". Advierta que [set vectps on](#) añade bordes a los enlaces cilíndricos o esféricos. Sin embargo, actualmente solo trabaja con esferas que intercepcionen con una única esfera. Así, funciona bien con imágenes "stick" o "ball and stick" pero no con la mayoría de las imágenes "spacefilling".

Las técnicas de impresión en alta resolución (**high-resolution**) se discuten en la [FAQ](#).

No existe ya ninguna diferencia entre esta orden y la orden de RasMol [save](#). La única diferencia consiste en que [save](#), sin un especificador de formato, genera un archivo **PDB** y la orden **write** genera una imagen **GIF**.

La orden [set write](#) activa y desactiva el uso de "save" y "write" en "scripts".

La orden **write gif <nombre de archivo>** permite producir imágenes GIT transparente. Esto puede controlarse mediante los comandos **set transparent on** y **set transparent off**.

Zap

Syntax: `zap`

Esta orden borra el contenido de la base de datos actual y vuelve a colocar las variables de parámetros en su estado inicial.

Zoom

```
Syntax:  zoom {<boolean>}  
        zoom <value>
```

Esta orden altera el aumento de la imagen visualizada. Los parámetros booleanos o bien aumentan o bien recolocan a cero la escala de la molécula actual. Un parámetro entero entre 10 y 200 señala el aumento deseado como un porcentaje de la escala inicial. El parámetro mínimo es 10, el máximo depende del tamaño de la molécula que se está visualizando. Para una proteína de tamaño medio es de aproximadamente 500.

Internal Parameters

RasMol posee un cierto número de parámetros internos que pueden ser modificados usando la orden [set](#). Estos parámetros controlan un cierto número de opciones del programa como las opciones de presentación y el mapa de botones del ratón.

Una lista completa de nombres de parámetros internos se da bajo la orden [set](#).

Set Ambient

```
Syntax:  set ambient {<value>}
```

El parámetro **ambient** de RasMol se usa para controlar la intensidad de la luz de fondo en la pantalla. El valor de **ambient** debe estar comprendido entre 0 y 100; este valor se encarga de controlar la intensidad, en porcentaje, de la sombra más oscura de un objeto. En el caso de que el objeto sea opaco, este valor es la intensidad de las superficies que estén fuera de la fuente de luz o a la sombra. Para objetos con profundidad (depth-cued) es la intensidad de los objetos más alejados del observador.

Este parámetro se utiliza para monitores con diferentes valores gamma de brillo, para cambiar el grado de claridad u oscuridad con el que aparece una imagen al ser imprimida desde pantalla; o bien para alterar la sensación de profundidad producida en las representaciones de alambre o cinta.

Set Axes

```
Syntax:  set axes <boolean>
```

```
set axes on
set axes off
```

El parámetro de RasMol **axes** controla la visualización de los ejes de coordenadas ortogonales en la representación actual. Los ejes coordinados son aquellos utilizados en el archivo de datos de la molécula y el origen es el centro de la caja de unión de la molécula. La orden **set axes** es parecida a [set boundingbox](#) y [set unitcell](#), que visualizan la caja de unión y la célula unidad cristalográfica respectivamente.

Con **set axes on** los caracteres X, Y y Z se visualizan en la dirección positiva de los ejes cartesianos.

Set Backfade

```
Syntax:  set backfade on
          set backfade off
```

Se puede "sombrear" un color de fondo arbitrario, en lugar del simplemente negro. Se controla con los comandos "set backfade on" y "set backfade off". Por ejemplo, podemos usar esta característica para generar representaciones wireframe (alambre) con profundidad que se desplacen al blanco, en lugar de simplemente negras.

Set Background

```
Syntax:  set background {<colour>}
```

El parámetro de RasMol **background** se utiliza para establecer el color del fondo. Puede especificarse el color con el nombre correspondiente, o bien por medio de componentes tripletes de Rojo, Verde y Azul (RVA) separados por comas y delimitados por corchetes. [Help colours](#) proporciona una lista de los nombres de colores predefinidos y reconocidos por RasMol. Si se utiliza X Windows, RasMol es capaz de reconocer aquellos colores que se encuentran en la base de datos de nombres de colores del servidor X.

Las órdenes **set background** y [background](#) son sinónimas.

Set BondMode

```
Syntax:  set bondmode and
          set bondmode or
```

La orden de RasMol **set bondmode** controla el mecanismo utilizado para seleccionar enlaces individuales. Al utilizar las órdenes [select](#) y [restrict](#) se selecciona un determinado enlace si

a) el modo de enlace es **or** cualquiera de los átomos conectados es seleccionados; o b) si el modo de enlace es **and** los dos átomos conectados por el enlace son seleccionados. Por lo tanto, se puede seleccionar un enlace dado identificado con la orden "**set bondmode and**" y luego seleccionando únicamente los átomos a ambos extremos.

Set Bonds

Syntax: `set bonds <boolean>`

La orden RasMol **set bonds** controla la visualización de enlaces dobles y triples como líneas o cilindros múltiples. Actualmente esta orden solo puede ser leída en ficheros de formatos MDL Mol, Sybyl Mol2, Tripos Alchemy y algunos Brookhaven PDB. Los enlaces dobles (y triples) se especifican en archivos PDB especificando un enlace dos o tres veces en registros CONECT. El comando "set bonds on" activa la visualización de la orden bond, y las ordenes "set bonds off" y "set bonds off" la desactiva. Vease la [FAQ](#) para ejemplos detallados.

Set BoundBox

Syntax: `set boundbox <boolean>`

El parámetro **boundbox** de RasMol controla la visualización de las cajas de unión de la molécula en cuestión. La caja de unión es ortogonal a los ejes coordinados originales del archivo de datos. La orden **set boundbox** es parecida a [set axes](#) y [set unitcell](#); éstas últimas visualizan ejes de coordenadas ortogonales y la celda unidad respectivamente.

Set Cartoon

Syntax: `set cartoon <boolean>`
`set cartoon <number>`

Por defecto, el extremo C-terminal de las hojas beta se visualiza como cabeza de flecha. Podemos activar o desactivar usando la orden **set cartoons**. La profundidad del dibujo puede ser ajustada usando el comando **set cartoons**. La orden **set cartoons** sin parámetros devuelve las opciones a sus valores por defecto.

Set Display

```
Syntax:  set display selected
         set display normal
```

Esta orden controla el modo de visualización en RasMol. Por defecto, `set display normal`, visualiza la molécula en la representación especificada por el usuario. La orden `set display selected` cambia el modo de visualización de tal manera que la molécula aparece temporalmente dibujada para indicar su parte seleccionada. El esquema de color especificado por el usuario y la representación permanecen inalterados. En esta representación los átomos seleccionados aparecen en amarillo, mientras que los no seleccionados en azul. El color de fondo pasa a ser gris oscuro para indicar el cambio en el modo de visualización. En la mayoría de los casos, esta orden es únicamente utilizada por Interfaces Gráficas del Usuario externos (IGU).

Set HBonds

```
Syntax:  set hbonds backbone
         set hbonds sidechain
```

El parámetro de RasMol `hbonds` determina si los enlaces de hidrógeno se trazan entre los átomos donantes y aceptantes del enlace de hidrógeno (`set hbonds sidechain`), entre los átomos de carbonos alfa del eje de la proteína, (`set hbonds backbone`), o entre los átomos de fósforo del eje del ácido nucleico (`set hbonds backbone`). La orden [hbonds](#) controla la visualización real de los enlaces de hidrógeno. El trazado de enlaces de hidrógeno entre los carbonos alfa de proteína o los átomos de fósforo de los ácidos nucleicos resulta útil cuando el resto de la molécula es representada esquemáticamente, con los modelos "[backbone](#) (eje), [ribbons](#) ("cintas") o [strands](#). ("filamentos"). Este parámetro es parecido a [ssbonds](#).

Set FontSize

```
Syntax:  set fontsize {<value>}
```

La orden `set fontsize` sirve para controlar el tamaño de los caracteres de las etiquetas de los átomos. Este valor corresponde a la altura de los caracteres visualizados en pixels. El valor máximo de `fontsize` es de 32, mientras que el valor inicial es de 8 pixels de altura. Para visualizar las etiquetas de los átomos en la pantalla se utiliza el comando de RasMol [label](#), y para cambiar el color de dichas etiquetas, [colour labels](#).

Set Hetero

Syntax: `set hetero <boolean>`

El parámetro **hetero** sirve para modificar el funcionamiento preestablecido de la orden [select](#) de RasMol, esto es, el funcionamiento de **select** sin ningún parámetro. Cuando este valor es falso, **false**, la región inicial de [select](#) no incluye ningún átomo heterogéneo (vease [hetero](#)). Cuando este valor es verdadero, **true**, la región inicial [select](#) puede contener átomos hetero. Este parámetro es parecido a [hydrogen](#), que determina si los Átomos de hidrógeno deberían incluirse en el grupo inicial. Para los parámetros [hetero](#) e [hydrogen](#) si son "verdaderos", (**true**), la orden [select](#) es equivalente a [select all](#). Véase también [esquema de colores de grupo](#), que es afectada por el valor del parámetro **hetero**. El tema *Hetero Atoms* en el Menu de opciones de RasMol puede también ser usado para modificar el valor del parámetro **hetero**.

Set HourGlass

Syntax: `set hourglass <boolean>`

Este parámetro **hourglass** sirve para que el usuario pueda activar o desactivar el uso del cursor "reloj de arena", utilizado por RasMol para indicar que el programa en esos momento está ocupado configurando el siguiente marco. La orden `set hourglass on` activa el indicador; mientras que `set hourglass off` impide a RasMol cambiar el cursor. Esto resulta especialmente útil al girar a molécula, ejecutar una secuencia de órdenes desde un fichero de texto (script) o al utilizar la comunicación entre procesos para ejecutar secuencias complejas de órdenes. En éste caso un cursor parpadeante podría distraer la atención.

Set Hydrogen

Syntax: `set hydrogen <boolean>`

Este parámetro **hydrogen** modifica el comportamiento por defecto de la orden [select](#), es decir el comportamiento de **select** sin ningún parámetro. Si este valor es "falso" (**false**), la región por defecto de [select](#) no incluye ningún átomo de hidrógeno o deuterio (sino que se refiere al grupo predefinido "hidrógeno" [-hydrogen-](#)). Si el valor del es "verdadero" ("true"), la región por defecto de [select](#) puede contener átomos de hidrógeno. Este parámetro es parecido a [hetero](#), que determina si los átomos heterogeneos deberían ser incluidos en el grupo inicial. Si el valor de los dos parámetros ([hydrogen](#) y [hetero](#)) es verdadero, [select](#) equivale a [select all](#).

Set Kinemage

Syntax: `set kinemage <boolean>`

La orden de RasMol `set kinemage` controla la cantidad de detalles almacenados en un archivo de salida Kinemage, creado por la orden [write kinemage](#). Los archivos de salida kinemage están pensados para que el programa Mage de David Richardson los visualice. `set kinemage false`, la orden preestablecida, sólo almacena en el archivo de salida de datos generados la representación que está siendo visualizada en ese momento. La orden `set kinemage true` genera un Kinemage más complejo que contiene tanto las representaciones de alambre y de backbone, como los ejes coordinados, la caja de unitaria y la célula de unidad de cristal.

Set Menus

Syntax: `set menus <boolean>`

La orden `set menus` activa la barra o botones del menú sobre el fondo de la pantalla. Por lo general, únicamente hacen uso de esta orden los Interfaces Gráficos de Usuario. En Microsoft Windows, esta orden se utiliza para crear imágenes lo más grandes posibles.

Set Monitor

Syntax: `set monitor on`
`set monitor off`

Las etiquetas de monitor a distancia `distance monitor labels` pueden ser anuladas con la orden `set monitors off`, y restablecidas con la orden `set monitors on`.

Set Mouse

Syntax: `set mouse rasmol`
`set mouse insight`
`set mouse quanta`

La orden `set mouse` ajusta los enlaces de rotación, desplazamiento, escalado y zoom del ratón.

El valor inicial es `rasmol` que es adecuado para ratones de dos botones (en los ratones de dos botones, el segundo y el tercer botón son sinónimos). El primer botón controla las rotaciones X-Y, y el segundo los desplazamientos X-Y. Al pulsar una tecla modificadora se controlan funciones adicionales:

Tecla de desplazamiento [Shift] y el primer botón escala. Desplazamiento [Shift] y el segundo botón produce rotaciones sobre el eje Z.

[Control] y el primer botón del ratón controla el plano de corte. `insight` y `quanta` producen los mismos efectos que el de esos paquetes, para usuarios experimentados.

Set Picking

```
Syntax:  set picking on
         set picking off
         set picking none
         set picking ident
         set picking distance
         set picking monitor
         set picking angle
         set picking torsion
         set picking label
         set picking centre
```

La serie de órdenes **set picking** actúa modificando como un usuario interacciona con una molécula visualizada en la pantalla de Rasmol.

Activando/Desactivando Atom Picking.

Clicar sobre un átomo con el ratón produce la identificación y visualización del nombre del grupo (o residuo), número del grupo, nombre del átomo, número de serie del átomo y cadena en la ventana de órdenes. Esta conducta se desactiva con la orden **set picking none** y se restaura con **set picking ident**.

Desactivar el picado usando **set picking off** es útil cuando efectuamos una pausa con la orden **pause** en los script de RasMol ya que previene la aparición de mensajes espurios en la ventana de comandos mientras el script esta suspendido.

Midiendo Distancias, Angulos y Torsiones.

Se pueden medir interactivamente distancias, ángulos y torsiones usando los comandos

set picking distance

set picking monitor

set picking angle

y

set picking torsion

respectivamente. En estos modos, clicar sobre un átomo resulta en que esta sea identificado.

Además cada átomo picado incrementa un módulo contador tal que en modo de distancia se visualiza la distancia entre ese y un segundo átomo, y siempre así. En modo angular, cada tercer ángulo picado visualiza el ángulo entre los tres átomos picados anteriormente, y en modo torsión

cada cuarto ángulo clicado produce la visualización del ángulo de torsión entre los cuatro. Pulsando la tecla de desplazamiento (shift) mientras picamos sobre un átomo, este módulo contador no se incrementa, por lo que podemos medir distancias de otra forma. Vease el [monitor command](#) para saber como controlar las líneas y etiquetas del monitor de distancia..

Marcando átomos con el ratón.

El ratón puede ser usado tambien para obtener información en forma de etiqueta de un átomo dado. La orden de RasMol **set picking label** elimina la etiqueta de un átomo picado si la tenía, o la visualiza si no la tenía.

Centering Rotation with the Mouse.

Una molécula puede ser centrada sobre el átomo especificado usando **set picking centre** o **set picking center**. En este modo, picar un átomo hace que todas las rotaciones sean alrededor de ese punto.

Set Radius

Syntax: `set radius {<value>}`

La orden de RasMol **set radius** se utiliza para alterar el comportamiento de la orden [dots](#) dependiente del valor del parámetro [solvent](#). Cuando el parámetro [solvent](#) es "verdadero" (**true**), el parámetro **radius** controla la posibilidad de que la orden [dots](#) genere una superficie Van der Waal verdadera. Si el valor de **radius** no es cero, éste se utiliza como el radio de cada átomo en lugar de su valor VdW verdadero. Cuando el valor de [solvent](#) es verdadero (**true**), este parámetro determina el radio para el disolvente de "la esfera de prueba" ('probe sphere'). El parámetro se puede especificar en unidades rasmol enteras o en decimales en unidades angstróms. El valor por defecto de este parámetro es determinado por el valor de [solvent](#); y cambiando [solvent](#) se reestablece **radius** en su nuevo valor inicial.

Set Shadow

Syntax: `set shadow <boolean>`

La orden de RasMol **set shadow** activa y desactiva el trazamiento de radios de la imagen representada. Hasta ahora, sólo la representación Spacefilling puede ser sombreada o emitir sombras. La capacidad de emisión de sombras desactivará automáticamente el plano que corta el eje Z utilizando la orden [slab off](#).. El trazado de radios dura aproximadamente 10 segundos en un proteína de tamaño medio. Se recomienda que el proceso de sombrear sea desactivado mientras que se manipula o transforma la molécula y que se active únicamente una vez que se haya seleccionado un perspectiva apropiada, con el fin de proporcionar una mayor sensación de profundidad.

Set SlabMode

Syntax: `set slabmode <slabmode>`

El parámetro de RasMol `slabmode` controla el método de representación de los objetos cortados por el plano que corta el eje Z. Solo la representación de **spacefill** permite visualizar en modo slab. Bonds, cartoons, ribbons y strands no son susceptibles de visualizarse en modo **slab**. Los parámetros válidos de "slabmode" son **reject** (el **por defecto** para bonds y cartoons), **half**, **hollow**, **solid** (por **defecto** para átomos en spacefill), y **section**.

No hay modo de slab en RasMol que visualice un auténtico slab, es decir, una sección de grosor constante distinto de cero. Tales planos de corte son definidos por dos planos sucesivos de corte. Cualquier cosa por detrás del plano de corte, o por delante del plano frontal, está oculta. (De forma diferente a RasMol, el modo slab de MAGE es un slab auténtico; el grosor del corte se controla con "zslab", y el centro del corte se desplaza de adelante a atrás con "ztran".)

- **reject**: Todos los átomos y enlaces se visualizan conjuntamente. Los átomos o enlaces cortados por el plano z se ocultan por completo. Cartoons, ribbons, y strands se cortan en o cerca del plano z. Esta es la forma inevitable de presentación de todo excepto los átomos representados en spacefill.
 - **half**: Solo las mitades frontales de los átomos representados en spacefill que sean cortados por el plano z se visualizan, presentándose como una superficie lisa esférica.
 - **hollow**: Los átomos en spacefill que son cortados por el plano de slab se visualizan como una superficie esférica hueca con la porción frontal al plano de corte oculta. Así puede verse a través de estos átomos los átomos de atrás.
 - **solid**: Los átomos representados en spacefill que cortan el plano Z se presentan como esferas sólidas con una superficie cortada y lisa (como si se hubieran cortado con una navaja). Esta es la forma por defecto.
 - **section**: Solo las superficies de corte de los átomos (sólidos) cortados por el plano se visualizan. Todos los átomos por detrás o por delante de dicho plano se ocultan. La imagen es un plano de grosor cero paralelo a la pantalla.
-

Set Solvent

Syntax: `set solvent <boolean>`

La orden de RasMol `set solvent` controla el comportamiento de la orden [dots](#). Dependiendo del valor del parámetro `solvent`, la orden [dots](#) genera bien una superficie Van der Waal o una superficie accesible al soluto alrededor del grupo de átomos seleccionados. Al cambiar este

parámetro se recoloca el valor del parámetro "radius". La orden `set solvent false`, el valor inicial, indica que deberíamos generar una superficie VdW y reestablecer el valor de [radius](#) a cero. La orden `set solvent true` indica que un disolvente accesible a la superficie de "Connolly" o "Richards" debería ser dibujado y establecer el parámetro [radius](#), el radio disolvente, a 1, 2 angstróms (o 300 unidades rasmol).

Set Specular

Syntax: `set specular <boolean>`

La orden de RasMol `set specular` activa y desactiva la visualización de reflejos luminosos sobre aquellos objetos opacos dibujados por RasMol. Los haces de luces especulares aparecen como reflejos blancos de la fuente de luz sobre la superficie del objeto. La aplicación actual de RasMol utiliza una función de aproximación para generar este haz de luz.

El coeficiente de reflexión especular puede alterar los haces de luces especulares sobre la superficie de objetos opacos; dicho coeficiente se puede modificar con la orden [set specpower](#).

Set SpecPower

Syntax: `set specpower {<value>}`

El parámetro `specpower` determina el brillo de los objetos sólidos representados por RasMol. Este valor, entre 0 y 100, ajusta el coeficiente de reflexión utilizado en los cálculos de haces de luces especulares. La orden [set specular](#) activa y desactiva estos haces de luces especulares. Los valores comprendidos entre 20 y 30 dan lugar a superficies con apariencia de plástico. Los valores altos (20 o 30) crean superficies más brillantes, como metales; mientras que los más bajos producen superficies más difusas u oscuras.

Set SSBonds

Syntax: `set ssbonds backbone`
`set ssbonds sidechain`

El parámetro de RasMol `ssbonds` determina si se dibujan los puentes de disulfuro entre los átomos de azufre de la cadena lateral (lo preestablecido) o entre los átomos de carbono alfa en el eje de los residuos de cisteína. La orden [ssbonds](#) controla la visualización actual de puentes de disulfuro. El dibujar puentes de disulfuro entre los carbonos alfas resulta útil cuando el resto de

la proteína aparece representada esquemáticamente en "eje" ([backbone](#)), "cintas" ([ribbons](#)), o "filamentos" ([strands](#)). Este parámetro es parecido a [hbonds](#).

Set Stereo

command.

```
Syntax:  set stereo on
         set stereo off
         set stereo <boolean>
```

El parámetro de RasMol **set stereo** controla la separación entre las imágenes izquierda y derecha. Activar y desactivar estereono reposiciona el centro de la molécula.

La orden **stereo on**. El ángulo de separación entre las dos vistas puede ser ajustado con la orden **set stereo [-] <number>**, donde los valores positivos representan visión relajada y negativos ojos cruzados. Actualmente, la visión estereo no está implementada para los archivos de salida "vector PostScript".

Set Strands

```
Syntax:  set strands {<value>}
```

El parámetro de RasMol **strands** controla el número de filamentos paralelos que se visualizan en las representaciones en "cintas" ("ribbons") de las proteínas. Los valores permitidos para este parámetro son 1, 2, 3, 4, 5 y 9. El valor inicial es 5. En todas las cintas visualizadas, el número de filamentos es constante. No obstante, la anchura de la cinta (la separación entre los filamentos) sobre un residuo se puede controlar a través de una base de residuo con el comando [ribbons](#).

Set Transparent

```
Syntax:  set transparent on
         set transparent off
```

La orden de RasMol **write gif <nombre de archivo>** permite la generación de imágenes transparentes GIF. Se puede controlar con los comandos "set transparent on" y "set transparent off".

Set UnitCell

Syntax: `set unitcell <boolean>`

El parámetro `unitcell` controla la visualización de la célula unidad cristalográfica. La célula de cristal se activa únicamente si la información apropiada sobre la simetría de cristal se encuentra en el archivo PDB. La orden [show symmetry](#) visualiza detalles de los grupos espaciales y los ejes de las células de unidad cristalográfica. La orden `set unitcell` es parecida a las órdenes [set axes](#) y [set boundingbox](#) que visualizan ejes coordinados ortogonales y la caja de unión respectivamente.

Set VectPS

Syntax: `set vectps <boolean>`

El parámetro `vectps` controla la forma en que la orden [write](#) genera archivos de salida vectoriales. La orden `set vectps on` activa el uso de perfiles negros alrededor de las esferas y enlaces de cilindro con lo cual se produce un resultado de alta resolución, similar al conseguido en los "dibujos animados". No obstante, la actual aplicación de RasMol ilustra incorrectamente esferas intersectadas, a su vez, por más de una esfera. Por lo tanto, los modelos "ball and stick" son representados correctamente pero no los modelos de esferas spacefilling. `set vectps off` desactiva, por defecto, los perfiles negros.

Set Write

Syntax: `set write <boolean>`

La orden de RasMol `set write` activa (y desactiva) el uso de `save` y `write` en los guiones (scripts), pero solo puede ser ejecutada desde la línea de comandos. Por defecto, su valor es `false`, prohibiendo la producción de archivos en cualquier script ejecutado al arrancar (como aquellos cargados de un navegador WWW como Mosaic o NetScape). Sin embargo, se puede arrancar RasMol interactivamente, escribiendo `set write on` y entonces ejecutar el script para generar cada marco usando el comando `source`.

Atom Expressions

Las expresiones de átomos RasMol solo identifican, arbitrariamente, un grupo de átomos dentro de una molécula

Las expresiones de átomos se componen de expresiones primitivas, conjuntos predefinidos, operadores de comparación, expresiones internas (**within**), o combinaciones lógicas (booleanas) de los tipos de expresiones arriba mencionadas.

Los operadores ógicos hacen posible búsquedas complejas a partir de búsquedas simples utilizando los conectores booleanos estándares **and**, **or** y **not**, que pueden ser abreviados por los siguientes símbolos: "&", "|", y "!", respectivamente. Los paréntesis pueden emplearse para alterar la precedencia de los operadores. Es conveniente utilizar una coma para la disyunción booleana.

Para cada átomo se evalúa la expresión de átomo, por tanto **protein and backbone** selecciona átomos del eje de la proteína, y, no los átomos de eje de proteínas y ácidos nucleicos.

Ejemplos: **backbone and not helix**

```
within( 8.0, ser70 )
not (hydrogen or hetero)
not *.FE and hetero
8, 12, 16, 20-28
arg, his, lys
```

- [Ejemplos](#)
- [Expresiones primitivas](#)
- [Conjuntos predefinidos](#)
- [Operadores comparativos](#)
- [Expresiones en "within"](#)

Expresiones de ejemplo

En el cuadro siguiente aparecen ejemplos útiles de expresiones de átomos RasMol. Con **help expressions** se obtiene la sintaxis adecuada para cada ejemplo.

Expresión	Interpretación
*	Todos los átomos
cys	Átomos de cisteínas
hoh	Átomos heterogéneos o moléculas de agua
as?	Átomos de asparagina o ácido aspártico
*120	Átomos en el residuo 120 de todas las cadenas
*p	Átomos en la cadena P
*.n?	Átomos de nitrógeno
cys.sg	Átomos de azufre en residuos de cisteína
ser70.c?	Átomos de carbono en la serina 70
hem*p.fe	Átomos de hierro en los grupos hemo de la cadena P

Expresiones Primitivas

Las expresiones primitivas de RasMol son los pilares fundamentales de las expresiones de átomos. Hay dos tipos de expresiones primitivas. El primero, sirve para identificar el número de un residuo determinado o una gama de números de residuos. Un único residuo se identifica por su número (posición en la secuencia), mientras que una gama por un límite superior e inferior separados por un guión. Por ejemplo `select 5,6,7,8` es lo mismo que `select 5-8`. Nótese que así se seleccionan los números de residuos determinados en todas las cadenas de la macromolécula.

El segundo tipo de expresiones primitivas especifica una secuencia de campos que deben corresponder a un átomo dado. La primera parte especifica un residuo (o grupo de residuos) y una segunda parte opcional especifica los átomos dentro de esos residuos. La primera parte consiste en un nombre de residuo seguido, opcionalmente, de un número de residuo y/o de un identificador de cadena. La segunda parte consiste en un carácter periódico seguido por el nombre de un átomo. Un asterisco puede servir de comodín para un campo completo y un signo de interrogación de comodín para un único carácter.

"help examples" proporciona una lista de expresiones RasMol.

El segundo tipo de expresión especifica una serie de campos que deben ajustarse para un átomo determinado. La primera parte especifica un residuo (o un grupo de residuos) y una segunda parte opcional señala los átomos concretos de esos residuos. La primera parte es el nombre de un residuo, opcionalmente seguido de un número de residuo y/o un indicador de cadena.

Un nombre de residuo consta de hasta tres caracteres alfabéticos, caso-insensibles. Las expresiones primitivas como `SER` y `ser` son equivalentes, identificando a todas las serinas. Los nombres de residuos que contengan caracteres no alfabéticos, como por ejemplo grupos sulfato, pueden delimitarse con corchetes, esto es `[SO4]`

El número de residuo es la posición del residuo en la secuencia de la macromolécula. Se pueden usar números de secuencia negativos. P. E. `SER70`. Se debe estar seguro, si se especifica tanto el nombre como el número, de que ambos se correspondan. En caso contrario no se seleccionará átomo alguno.

El identificador de cadena es típicamente un único carácter alfabético caso-insensible, o bien un carácter numérico. Los identificadores de cadena de tipo numérico deben separarse de los números de residuo e identificarse mediante un signo de dos puntos. Por ejemplo: `SER70A` o `SER70:1`

La segunda parte consta de un carácter seguido por un nombre de átomo. Un nombre de átomo puede constar de hasta 4 caracteres alfabéticos o numéricos. Se puede usar un asterisco como un comodín para todo un campo, y una interrogación como comodín para un solo carácter.

Operadores comparativos

Diferentes partes de una molécula pueden definirse usando operadores como igual, desigual y operadores de orden en sus propiedades. El formato de tal comparación es el nombre de la propiedad, seguido del operador de comparación y a continuación un número entero. El formato de tales expresiones de comparación es el nombre de una propiedad, seguido de un operador de comparación y después de un valor entero.

Las propiedades del átomo que se pueden utilizar en RasMol son **atomno**, para el número de serie del átomo, **elemno** para el número atómico del átomo (elemento), **resno**, para el número de residuo, **radius**, para el radio spacefill en unidades RasMol (o cero si no se representa como una esfera) y **temperature**, para el valor anisótropo de temperatura en PDB.

El operador de igualdad es indicado como "=" o como "=="; El de desigualdad como "<>", "!=" o "/=". Los operadores de orden son "<" para "menor que", "<=" para "menor o igual que"; ">" para "mayor que" y ">=" para "mayor o igual que".

```
Ejemplos: resno <23
           temperature = 900
atomno == 487
```

Expresiones en "within"

Una expresión **within** (en) permite seleccionar átomos en la proximidad de otros átomos. Una expresión **within** toma dos parámetros rodeados por un paréntesis. El primero es un valor entero llamado distancia de corte "cut-off" de la expresión en (within) y el segundo argumento es cualquier expresión atómica válida. La distancia de corte se representa como un entero en unidades Rasmol, o en amstromg conteniendo un número decimal. Un átomo es seleccionado si se encuentra en la distancia de corte de los átomos definidos en el segundo argumento. Esto permite expresiones complejas usando expresiones **within** anidadas.

Por ejemplo, la orden **select within (3.2,backbone)** selecciona cualquier átomo en un radio de 3.2 Angstrom a partir de cualquier átomo en el esqueleto (backbone) de una proteína o ácido nucleico. Las expresiones **within** son particularmente útiles para seleccionar átomos alrededor de un sitio activo.

Conjuntos predefinidos

Las expresiones de átomos RasMol pueden incluir grupos predefinidos. Estos grupos consisten en claves que representan algunas regiones de la molécula que nos ocupa. Con frecuencia, los grupos predefinidos son abreviaciones de expresiones de átomos primitivas, y en otros casos, de

áreas que se seleccionan de una molécula que de otra manera no podrían ser distinguidas. A continuación aparece una lista de los grupos predefinidos. Además, RasMol trata los nombres de elementos (y sus plurales) como grupos predefinidos que contienen todos los átomos de dicho tipo de elemento; es decir, la orden [select oxygen](#) equivale a la orden [select elemno=8.](#)

AT	Cyclic	Polar
Acidic	Cystine	Protein
Acyclic	Helix	Purine
Aliphatic	Hetero	Pyrimidine
Alpha	Hydrogen	Selected
Amino	Hydrophobic	Sheet
Aromatic	Ions	Sidechain
Backbone	Large	Small
Basic	Ligand	Solvent
Bonded	Medium	Surface
Buried	Neutral	Turn
CG	Nucleic	Water
Charged		

AT Set

Este grupo contiene los átomos de la adenosina de nucleótidos complementaria y de la timidina (A y T respectivamente). Todos los nucleótidos son clasificados bien como del grupo **at**, o bien, como del grupo [cg](#). Este grupo es equivalente a las expresiones de átomos de RasMol "**a,t**" y "**nucleic and not cg**".

Acidic Set

Este es el grupo de los aminoácidos ácidos; son los tipos de residuos Asp y Glu. Todos los aminoácidos se clasifican como **acidic** (ácido), [basic](#) (básico) o [neutral](#). (neutro). Este grupo es equivalente a las expresiones de átomos RasMol "**asp, glu**" y "**amino and not (basic or neutral)**".

Acyclic Set

Se refiere al grupo de aminoácidos que no contienen un ciclo o anillo. Los aminoácidos son clasificados como [cyclic](#) o **acyclic**. Este grupo es equivalente a la expresión de átomo RasMol **"amino and not cyclic"**.

Aliphatic Set

Este es el conjunto de los aminoácidos alifáticos. Es decir Ala, Gly, Ile, Leu y Val. Este set es equivalente a la expresión atómica de RasMol **"ala, gly, ile, leu, val"**

Alpha Set

El conjunto de los carbonos alfa en la molécula de la proteína. Equivale aproximadamente a la expresión atómica de RasMol **"*.CA"** Este comando no debe ser confundido con el conjunto predefinido [helix](#) que contiene los átomos de los aminoácidos en las alfa hélices.

Amino Set

Este conjunto contiene todos los átomos de todos los residuos aminoácidos. Es útil para distinguir la proteína de los ácidos nucleicos y los átomos heterogéneos en los datos de la molécula activa.

Aromatic Set

Se refiere al grupo de átomos en los aminoácidos que contienen anillos aromáticos. Son los siguientes: His, Phe, Trp y Tyr. Al tener anillos aromáticos, todos los miembros de este grupo pertenecen al grupo predefinido [cyclic](#). Este grupo equivale a la expresión de átomo RasMol **"his, phe, trp, tyr"** y **"cyclic and not pro"**.

Backbone Set

Este grupo contiene los cuatro átomos de cada aminoácido que forman el eje polipéptido N-C-C-O de las proteínas y los átomos del eje de fosfoazúcar de los ácidos nucleicos. Los grupos predefinidos RasMol **protein** y **nucleic** diferencian entre los dos posibles ejes. Los átomos en los ácidos nucleicos y en las proteínas son **backbone** or [sidechain](#). Este grupo es equivalente a la expresión de átomo RasMol "**(protein or nucleic) and not sidechain**"

El grupo predefinido **mainchain** es sinónimo del grupo **backbone**.

Basic Set

El conjunto de los aminoácidos básicos: Los residuos de Arg, His and Lys. Todos los aminoácidos se clasifican como. [acidic](#), (ácidos) **basic** (básicos) [neutral](#) (neutros). Este conjunto es equivalente a las expresiones atómicas de RasMol "**arg, his, lys**" y "**amino and not (acidic or neutral)**"

Bonded Set

Este grupo contiene todos los átomos de la molécula en uso que están unidos, al menos, a otro átomo.

Buried Set

Este conjunto contiene a los átomos de aquellos aminoácidos que tienden a estar incluidos en el interior de la proteína, lejos del contacto con las moléculas del disolvente. Este conjunto se refiere a la preferencia de los aminoácidos, y no a su situación en la molécula concreta. Todos los aminoácidos son así clasificados en [surface](#) or **buried**. Este conjunto es equivalente a la expresión atómica de RasMol "**amino and not surface**", o "**ala, leu, val, ile, phe, cys, met, trp**", o "**(hydrophobic and not pro) or cys**".

CG Set

Este conjunto contiene los átomos presentes en los nucleótidos complementarios citidine y guanina (C y G respectivamente). Todos los nucleótidos se clasifican como conjunto [at](#) o conjunto `cg` Este grupo es equivalente a las expresiones atómicas de RasMol "`c,g`" y "`nucleic and not at`"

Charged Set

Este conjunto contiene a los aminoácidos con carga. Estos aminoácidos pueden ser [acidic](#) (ácidos) o [basic](#) (básicos). Los aminoácidos resultan clasificados en `charged` (cargados) o [neutral](#) (neutros). Este conjunto es equivalente a las expresiones atómicas de RasMol "`acidic or basic`" y "`amino and not neutral`"

Cyclic Set

El conjunto de los átomos de los aminoácidos que contienen anillos o ciclos. Todos los aminoácidos se clasifican en `cyclic` (cíclicos) o [acyclic](#) (acíclicos). Este grupo consta de los aminoácidos His, Phe, Pro, Trp and Tyr. Los miembros del conjunto predefinido [aromatic](#) (aromáticos) son miembros de este conjunto. El único cíclico y no aromático es prolina. Este grupo es equivalente a las expresiones atómicas de RasMol "`his, phe, pro, trp, tyr`" y "`aromatic or pro`" y "`amino and not acyclic`"

Cystine Set

Este grupo contiene los átomos de residuos de cisteínas que forman parte de un puente de disulfuro, i. e., semi cisteínas. RasMol determina automáticamente puentes de disulfuro en caso de que ni el grupo predefinido `cystine`, ni la orden [ssbonds](#) se hayan utilizado desde que se cargó la molécula. El grupo de cisteínas libres puede ser definido con la expresión de átomo RasMol "`cys and not cystine`".

Helix Set

Este grupo contiene todos los átomos que forman parte de una hélice alfa de proteína como determinan el autor del archivo PDB o el algoritmo DSSP de Kabsch y Sander. Por defecto, RasMol utiliza la determinación de estructura secundaria dada en el archivo PDB, si existe. De otra manera, utiliza el algoritmo DSSP como lo hace la orden [structure](#).

Este grupo predefinido no debe ser confundido con el grupo predefinido [alpha](#) que contiene los átomos de carbonos alfas de una proteína.

Hetero Set

Este grupo contiene todos los átomos heterogéneos de la molécula. Son los átomos descritos bajo la entrada HETATM en el archivo PDB. Normalmente contiene agua, cofactores y otros disolventes y ligandos. Todos los átomos "hetero" son clasificados como [ligand](#) (ligandos) o [solvent](#) (disolvente). Estos átomos heterogéneos [solvent](#) (disolvente) son más tarde clasificados como [water](#) (agua) o [ions](#) (iones).

Hydrogen Set

Este grupo predefinido incluye todos los átomos de hidrógeno y deuterio de la molécula con la que trabajamos. Es equivalente a la expresión de átomo RasMol "`elemno=1`".

Hydrophobic Set

Este grupo está compuesto de todos los aminoácidos hidrófobos, a saber, Ala, Leu, Val, Ile, Pro, Phe, Met y Trp. A los aminoácidos se les clasifica como **hydrophobic** (hidrófobos) o [polar](#) (polares). Este grupo equivale a las siguientes expresiones de átomos RasMol: "`ala, leu, val, ile, pro, phe, met, trp`" y "`amino and not polar`".

Ions Set

Este grupo incluye todos los fosfatos heterogéneos e iones de sulfatos del archivo de datos sobre moléculas con el que trabajamos. En ocasiones, un gran número de estos iones son asociados con estructuras de proteínas y ácidos nucleicos determinados por cristalografía de rayos X. Estos átomos tienden a rellenar desordenadamente una imagen. Los átomos [hetero](#) son clasificados como átomos [ligand](#) (ligando) o [solvent](#) (sovente); a su vez, todos los átomos [solvent](#) son clasificados como [water](#) (agua) o [ions](#) (iones).

Large Set

Todos los aminoácidos son clasificados como [small](#) (pequeños), [medium](#) (medios) o [large](#) (grandes). Este grupo equivale a la expresión de átomo RasMol "amino and not (small or medium)".

Ligand Set

Este grupo contiene todos los cofactores heterogéneos y semi ligandos que se encuentran en el archivo de datos sobre moléculas con el que trabajamos. En este grupo, todos los átomos que no son [solvent](#) (disolvente) pasan a ser [hetero](#). De esta manera, este grupo equivale a la expresión de átomo RasMol "hetero and not solvent".

Medium Set

Todos los aminoácidos son clasificados como [small](#) (pequeños), [medium](#) (medios) o [large](#) (grandes). Este grupo equivale a la expresión de átomo "amino and not (large or small)", o "val, thr, asp, asn, pro, cys".

Neutral Set

Se refiere al grupo de los aminoÁcidos neutros. Todos los aminoÁcidos son clasificados como "acidic" (Ácidos), "basic" (bÁcidos) o "neutral" (neutros). Este grupo es equivalente a la expresión de Átomo RasMol "amino and not (acidic or basic)".

The set of neutral amino acids. All amino acids are classified as either [acidic](#), [basic](#) or [neutral](#). This set is equivalent to the RasMol atom expression "amino and not (acidic or basic)"

Nucleic Set

Se refiere al grupo de todos los átomos en los ácidos nucleicos que está compuesto de las cuatro bases nucleótidas de adenosina, citidina, guanosina y timidina (A, C, G y T respectivamente). Todos los nucleótidos se clasifican como [purine](#) (purina) o [pyrimidine](#) (pirimidina). Este grupo es equivalente a las expresiones de RasMol "a,c,g,t" y "purine or pyrimidine"

Polar Set

Este conjunto incluye a los aminoácidos polares. Los aminoácidos se clasifican en [hydrophobic](#) (hidrofóbicos) o [polar](#) (polares). Esta conjunto es equivalente a la expresión atómica de RasMol "amino and not hydrophobic"

Protein Set

El conjunto de todos los átomos de una o varias proteínas. Consta del grupo predefinido de RasMol [amino](#) y las modificaciones post-traduccion mas frecuentes

Purine Set

El conjunto de los nucleotidos de purina. Son las bases adenosina and guanosina (A y G respetivamente). Todos los nucleotidos son, bien [purines](#) (purinas) o [pyrimidines](#)

(pirimidinas). Este conjunto es equivalente a las expresiones atómicas de RasMol "a,g" y "nucleic and not purine"

Pyrimidine Set

Este es el grupo de los nucleótidos de pirimidina, es decir, las bases citidina y timidina (C y T respectivamente). Todos los nucleótidos son [purines](#) o [pyrimidines](#). Este grupo equivale a las expresiones de átomos RasMol "c,t" y "nucleic and not pyrimidine".

Selected Set

Este grupo contiene el grupo de átomos seleccionado en un momento dado. La región seleccionada queda definida por las órdenes previas [select](#) o [restrict](#) y no por aquellas expresiones de átomos que contienen la clave **selected**.

Sheet Set

Este grupo está compuesto de todos los átomos que forman parte de una hoja plegada en la proteína como aparece determinado tanto por el autor del fichero PDB o por el algoritmo DSSP de Kabsch y Sander. Por defecto, Rasmol utiliza la denominación de estructura secundaria dada en el fichero PDB, en el caso de que exista. De otra forma utiliza el algoritmo DSSP como lo hace la orden [structure](#).

Sidechain Set

Este grupo se compone de las cadenas laterales funcionales de cada aminoácido y de la base de cada nucleótido. Son precisamente los átomos que no forman parte del eje N-C-C-O de polipéptido o del de fosfato de azúcar de los ácidos nucleicos. Los grupos RasMol predefinidos **protein** y **nucleic** sirven para distinguir entre las dos formas de cadenas laterales. Los **À_À** Átomos de los ácidos nucleicos y de las proteínas son, bien, [backbone](#) (eje), bien, **sidechain** (cadena lateral). Este grupo equivale a la expresión RasMol "(protein or nucleic) and not backbone".

Small Set

Todos los aminoácidos se clasifican en **small**, [medium](#) or [large](#). Este Grupo es equivalente a las expresiones atómicas de RasMol "**amino and not (medium or large)**", o "**ala, gly, ser**".

Solvent Set

Este grupo se compone de los átomos disolventes del archivo coordinado de moléculas, es decir, moléculas de agua heterogéneas e iones de fosfato y sulfato. A todos los átomos [hetero](#) se les clasifica como átomos [ligand](#) (ligandos) o **solvent** (solvente); a su vez, a los átomos solubles se les clasifica como [water](#) (agua) o [ions](#) (iones). Este grupo equivale a las expresiones de átomo RasMol "**hetero and not ligand**" y "**water or ions**".

Surface Set

Este grupo se compone de aquellos átomos de aminoácidos que tienden (prefieren) a estar en la superficie de las proteínas, en contacto con las moléculas de disolvente. Este grupo tiene que ver con la preferencia de los aminoácidos y no con la accesibilidad real del disolvente a la proteína en cuestión. A todos los aminoácidos se les clasifica como **surface** (superficie) o [buried](#) (enterrado). Este grupo equivale a la expresión de átomo RasMol "**amino and not buried**" o "**gly, ser, thr, lys, asp, asn, glu, pro, arg, gln, tyr, his**" o "**(polar and not cys) or pro**".

Turn Set

Este grupo se compone de todos los α -Átomos que forman parte de un giro de proteína α -Ána como queda determinado por el autor del fichero PDB o por el algoritmo DSSP de Kabsch y Sander. Por defecto, RasMol utiliza la determinación α -Án de estructura secundaria dada en el archivo PDB, si existe; de otra forma, utiliza el algoritmo DSSP como lo hace la orden "structure".

This set contains all atoms that form part of a protein turns as determined by either the PDB file author or Kabsch and Sander's DSSP algorithm. By default, RasMol uses the secondary structure determination given in the PDB file if it exists. Otherwise, it uses the DSSP algorithm as used by the RasMol [structure](#) command.

Water Set

Este grupo se compone de todas las moléculas heterogéneas de agua existentes en la base de datos con la que trabajamos. Un gran número de moléculas de agua aparecen, a veces, asociadas con estructuras de proteínas y ácidos nucleicos determinadas por cristalografía de rayos X. Estos átomos tienden a desordenar la imagen. A todos los átomos [hetero](#) se les clasifican como "ligand" (ligando) o [solvent](#) (disolvente); los átomos de disolvente ([solvent](#)) son clasificados luego como **water** (agua) o [ions](#) (iones).

Colours and Colour Schemes

La orden de RasMol [colour](#) permite dar un color especificado a diferentes objetos (como átomos, enlaces y segmentos de cinta). Habitualmente este color es el nombre de color predefinido por RasMol o un triplete RGB. Además RasMol también soporta:

- [cpk](#)
- [amino](#)
- [chain](#)
- [group](#)
- [shapely](#)
- [structure](#)
- [temperature](#)
- [charge](#) y
- [user](#) esquemas de colores para átomos,
- [hbond type](#) para puentes de hidrogeno, y el
- [electrostatic potential](#) esquema de color para superficies de puntos.

Los nombres predefinidos de color, con sus correspondientes tripletes RGB son:

NOMBRE	RASMOL	HTML *
black (negro)	[0,0,0]	00 00 00
white (blanco)	[255,255,255]	FF FF FF
blue (azul)	[0,0,255]	00 00 FF
green (verde)	[0,255,0]	00 FF 00
red (rojo)	[255,0,0]	FF 00 00
yellow (amarillo)	[255,255,0]	FF FF 00
magenta (magenta)	[255,0,255]	FF 00 FF
cyan (cian)	[0,255,255]	00 FF FF
orange (naranja)	[255,165,0]	FF A5 00
redorange (rojoanaranjado)	[255,69,0]	FF 45 00
violet (violeta)	[238,130,238]	EE 82 EE
purple (purpura)	[160,32,240]	A0 20 F0
greenblue (verdeazulado)	[46,139,87]	2E 8B 57

* RGB = Red (rojo), Green (verde), Blue (azul). Los valores decimales se utilizan para definir el color asignado al comando color de RasMol. Los valores hexadecimales se emplean para lograr un color en HTML, e.g.

`Nitrogen`,

que se representa así: **Nitrogen**.

Aquí aparece una clave de colores CPK como una tabla HTML que podría usarse para, por ejemplo, una visualización de Chime:



Haga click aquí [para la clave de color CPK sola](#). Podría teclear **view source**, y entonces cortar y pegar el código HTML en su documento.

Si emplea frecuentemente un color no definido, podría escribir un script de una línea. Por ejemplo, si crea el archivo **grey.spt** con la línea

```
colour [180,180,180] #grey
```

el comando **script grey.spt** colorea el átomo seleccionado de gris. (Or, you can color it gray. :-)

Amino Colours

El esquema de color RasMol **amino** colorea los aminoácidos de acuerdo con las propiedades tradicionales de éstos. Los colores sirven para identificar los aminoácidos en un ambiente inusual o "sorprendente". Las partes externas de una proteína que son polares son colores visibles (brillantes) y los residuos no polares, más oscuros. La mayoría de los colores son normalmente adscritos por tradición. Este esquema de color es parecido al esquema [shapely](#).

ASP, GLU	brightred (rojo fuerte)	[230,10,10]	E6 0A 0A
LYS, ARG	blue (azul)	[20,90,255]	14 5A FF
PHE, TYR	mid blue (azul medio)	[50,50,170]	32 32 AA
GLY	light grey (gris claro)	[235,235,235]	EB EB EB

ALA	dark grey(gris oscuro)	[200,200,200]	C8 C8 C8
HIS	pale blue (azul pálido)	[130,130,210]	82 82 D2
CYS,MET	yellow (amarillo)	[230,230,0]	E6 E6 00
SER,THR	orange (naranja)	[250,150,0]	FA 96 00
ASN,GLN	cyan (cian)	[0,220,220]	00 DC DC
LEU,VAL,ILE	green (verde)	[15,130,15]	0F 82 0F
TRP	pink (rosa)	[180,90,180]	B4 5A B4
PRO	flesh (encarnado, carne)	[220,150,130]	DC 96 82

Chain Colours

El esquema de color de RasMol **chain** asigna a cada cadena macromolecular un color único. Este esquema es particularmente útil para distinguir partes de una estructura multimérica o cada "tira" de una cadena de DNA.

CPK Colours



El esquema de color de RasMol **cpk** se basa en los colores de los populares modelos de bolas desarrollados por Corey, Pauling y más tarde mejorado por Kultun. Según este esquema los objetos átomo son coloreados por tipo. Es el esquema convencionalmente usado por los químicos. La relación de colores asignados se da más adelante.

(Esta información se basa en el código fuente de RasMol del 19 de febrero de 1998, que se cree completo y correcto.)

ELEMENTO	COLOR NAME	NOMBRE DEL COLOR	RGB DECIMAL
RGB HEXADECIMAL			
Carbon	light grey	gris claro	[200,200,200]
C8 C8 C8			
Oxygen	red	rojo	[240,0,0]
F0 00 00			
Hydrogen	white	blanco	[255,255,255]
FF FF FF			
Nitrogen	light blue	azul claro	[143,143,255]
8F 8F FF			
Sulphur	sulphur yellow	amarillo azufre	[255,200,50]
FF C8 32			
Chlorine, Boron	green	verde	[0,255,0]

00 FF 00				
	Phosphorus, Iron, Barium	orange	naranja	[255,165,0]
FF A5 00	Sodium	blue	azul	[0,0,255]
00 00 FF	Magnesium	forest green	verde arbol	[34,139,34]
22 8B 22	Zn, Cu, Ni, Br	brown	marrón	[165,42,42]
A5 2A 2A				
	Ca, Mn, Al, Ti, Cr, Ag	dark grey	gris oscuro	[128,128,144]
80 80 90	F, Si, Au	goldenrod	amarillo dorado	[218,165,32]
DA A5 20	Iodine	purple	purpura	[160,32,240]
A0 20 F0				
	Lithium	firebrick	rojo ladrillo	[178,34,34]
B2 22 22	Helium	pink	rosa	[255,192,203]
FF C0 CB	Desconocido	deep pink	rosa oscuro	[255,20,147]
FF 14 93				



Group Colours

El esquema de color **group** colorea los residuos de acuerdo con su posición en una cadena macromolecular. Cada una de las cadenas aparece como un espectro desde el azul al rojo pasando por el verde, el amarillo y el naranja. Por tanto, el extremo N de la proteína y el 5' del ácido nucleico serán rojos y los extremos C de la proteína y 3' del ácido nucleico azules. Si una cadena contiene un gran número de moléculas hetero puede que la macromolécula no aparezca en la "extensión" completa del espectro.

Si una cadena tiene muchas moléculas heterogéneas asociadas, la macromolécula no se representara con todo el rango de colores. Cuando RasMol colorea por grupo decide el rango de colores a usar a partir de los numeros de los residuos en la PDB. El residuo de número menor será azul, y el de mas alto rojo. Desgraciadamente si una proteína contiene un gran número de heteroátomos, por ejemplo aguas, ocuparan los mas altos de los residuos numéricos, y por tanto los colores mas próximos al rojo, y la proteína se visualiza en la zona verde-azul. Esto se ve agravado por que es frecuente que haya más moléculas de agua que de residuos aminoácidos. La solución es usar la orden [set hetero off](#) antes de aplicar este esquema de colores. Tambien se puede conseguir lo mismo desactivando la opción *Hetero atoms* el en menú *Options* antes de seleccionar *Group* en el menú de *Colour*. Esta orden instruye a RasMol para usar solo residuos no hetero en la escala de colores de grupo.

Shapely Colours

El esquema de color **shapely** colorea los residuos de acuerdo con las propiedades del aminoácido. Este esquema se basa en los "Shapely Models" de Bob Fletterick. A cada aminoácido y ácido nucleico se le asigna un único color. El programa Raster3D de David Bacon también utiliza este esquema **shapely**. Es parecido al esquema de color [amino](#).

Structure Colours

El esquema de color **structure** colorea la molécula de acuerdo con la estructura secundaria de la proteína. Las hélices alfas aparecen en magenta [240,0,128], las hoja plegadas beta en amarillo [255,255,0], los giros en azul claro [96,128,255], y el resto de los residuos en blanco. La estructura secundaria es leída tanto desde el fichero PDB (registros HELIX (hélice) y SHEET (hoja plegada)), si está disponible, o es determinada a través del algoritmo DSSP de Kabsch y Sander. La orden de RasMol [structure](#) se puede utilizar para forzar el uso de la asignación de estructura DSSP.

Temperature Colours

El esquema de color RasMol **temperature** colorea los códigos de cada átomo de acuerdo con el valor de temperatura anisótropo (beta) almacenado en el fichero PDB. Normalmente, proporciona una medida aproximada de la movilidad/incertidumbre de la posición de un átomo determinado. Los valores más altos aparecen en colores más cálidos (rojo) y los más bajos en colores más fríos (blue). Este aspecto sirve a menudo para asociar un valor "scale" (tales como la variabilidad de los aminoácidos en las mutantes víricas) a cada átomo de un fichero PDB y colorea la molécula apropiadamente.

La diferencia entre los esquemas de colores **temperature** y [charge](#) consiste en que los valores de temperatura que aumentan van desde el azul al rojo; mientras que los valores de carga en aumento del rojo al azul.

Charge Colours

El esquema de colores de RasMol **charge** (carga) codifica cada átomo de acuerdo con el valor de carga almacenado en el fichero de entrada (o campo factor betade los archivos PDB). Los valores altos se colorean en azul (positivos) y los bajos en rojo (negativos). Mas que usar una escala fija este esquema determina unos valores máximos y mínimos del campo carga/temperatura e interpola apropiadamente desde el rojo al azul.. Así el verde significa "sin carga neta".

La diferencia entre los esquemas de color **charge** (carga) y **temperature** (temperatura) es que al incrementar los valores de temperatura se va de azul a rojo, mientras que incrementar carga va de rojo a azul.

Si los campos de carga/temperatura almacenadostienen valores razonables es posible usar la orden de RasMol **colour dots potential** para colorear una superficie de puntos (generados por la orden **dots**) en función a su potencial electrostatico..

User Colours

El esquema de colores **user** (usuario) de RasMol permite a este programa usar el esquema de colores almacenado en el fichero PDB. El color de cada átomo esta guardado en los registros COLO del archivo de datos PDB. Esta convención fue introducida por el programa de David Bacon Raster3D.

Si desea usar un esquema de colores definido por usted mismo, resulta mas facil construir un corto **script** (guión, vease el correspondiente apartado) que insertar los valores en el fichero PDB. El **script** tiene tambien la ventaja de que puede llamarse para cualquier molécula visualizada.. Un [ejemplo](#) de un script así está disponible.

HBond Type Colours

El esquema de colores **type** (tipo) de RasMol es aplicable solo a enlaces por puente de hidrogeno, así se usa en el comando "**colour hbonds type**". Este esquema de colores codifica cada enlace de acuerdo con la distancia entre aceptor y dador de hidrógeno. Este tipo de esquema de colores fue introducido por Belhadj-Mostefa y Milner-White. Esta representación da una buena visión de la estructura secundaria de la proteína (los puentes de hidrógeno que forman alfa hélices aparecen rojos, los que forman hojas se visualizan amarillos y los de los giros magenta).

Offset	Color	Triple
+2	blanco	[255,255,255]
+3	magenta	[255,0,255]
+4	rojo	[255,0,0]
+5	naranja	[255,165,0]
-3	cian	[0,255,255]
-4	verde	[0,255,0]
defecto	amarillo	[255,255,0]

Potential Colours

El esquema de color de `potential` (potencial) es aplicable solo a superficies de puntos, y así es usado en la orden "`colour dots potential`". Este esquema de colores visualiza cada concurrencia como el potencial electrostático en un punto dado del espacio. Este potencial se calcula usando las leyes de Coulomb tomando el campo temperatura/carga del fichero de entrada, como la carga asociada a un átomo. Esta es la misma interpretación usada por la orden [colour charge](#). Como en el esquema de color de carga [charge](#) los valores bajos son azul/blanco y los altos rojos. La tabla que sigue muestra las asignaciones estáticas de colores para un valor dieléctrico constante de 10.

25 < V	rojo	[255, 0, 0]
10 < V < 25	naranja	[255, 165, 0]
3 < V < 10	amarillo	[255, 255, 0]
0 < V < 3	verde	[0, 255, 0]
-3 < V < 0	cian	[0, 255, 255]
-10 < V < 3	azul	[0, 0, 255]
-25 < V < -10	purpura	[160, 32, 240]
V < -25	blanco	[255, 255, 255]

Historia de las Revisiones

- 98/08/10: Adición [Venn diagram of predefined terms](#) por Kurt Giles.
- 98/04/26: Adición de definiciones de Medium, Small (whence Large), Buried, and Surface [predefined terms](#) obtenidos examinando el código fuente. Se preparó una introducción separada para las expresiones seleccionadas, accesible con el comando [Select](#).
- 98/03/23: Adición de una frase al principio del manual que permite acceder a la fuente original. Además se reorganizó la sección anterior a la tabla de contenidos.
- 98/02/28: Se añadieron más detalles a las descripciones de las órdenes [slab](#) y [set slabmode](#).
- 98/02/19: Adición de la opción `vectps` a la orden [write](#). Se suministraron vínculos al debate sobre la impresión de alta resolución en la FAQ bajo las órdenes [write](#) y [print](#). Se completó la tabla de asignación de colores [CPK](#) usada por RasMol, y se añadió una imagen coloreada para ilustrarlo.
- 97/07/25: Adición de algunos valores RGB perdidos en el [esquema de color CPK](#), y también [tabla clave de muestras de color en HTML](#).
- 97/07/04: Adición de valores hexadecimales RGB para colores amino y predefinidos.

- 97/06/29: Adición de valores RGB al [cpkcoloursesquema de color CPK](#) tanto decimales como hexadecimales.
- 97/03/16: Ampliación de la sección sobre [esquema de color de grupo](#), explicando el uso de [set hetero off](#) para controlar espectro de colores. También se corrigieron los colores de los extremos de las proteínas, que inadvertidamente se invirtieron en el manual de referencia.
- 96/09/02: Adición de una nueva sección sobre el comando **trace**, y la consiguiente revisión de **backbone**. Se añadió la opción **dashes** a los comandos **backbone**, **strands**, y **wireframe**. Adición de una sección para **set bonds**. Adición de más detalles sobre el uso de pausa **pause** incluyendo su relación con **wait**. Adición de una sección sobre **set bonds**. Fue indexada la sección **set write** bajo **set** (había sido inadvertidamente omitido). Adición de una nueva sección sobre **exit** ahora es distinta de **quit**.
- 96/08/14: El nombre del archivo rasman26.htm pasó a ser **rasman.htm** y los vínculos se hicieron independiente de la versión. También se hicieron pequeños cambios en los tipos y formato del texto.
- 96/08/13: Actualización de la [Introducción](#) y adición de las secciones [Operaciones Generales](#), tomadas desde el manual de referencia no-html version 2.5. Fueron revisadas para hacerlas acordes con la versión 2.6 beta-2 (veanse comentarios en la fuente html).

Revision History

- 98/08/10: Adición [Venn diagram of predefined terms](#) por Kurt Giles.
- 98/04/26: Adición de definiciones de Medium, Small (whence Large), Buried, and Surface [predefined terms](#) obtenidos examinando el código fuente. Se preparó una introducción separada para las expresiones seleccionadas, accesible con el comando [Select](#).
- 98/03/23: Adición de una frase al principio del manual que permite acceder a la fuente original. Además se reorganizó la sección anterior a la tabla de contenidos.
- 98/02/28: Se añadieron más detalles a las descripciones de las órdenes [slab](#) y [set slabmode](#).
- 98/02/19: Adición de la opción **vectps** a la orden [write](#). Se suministraron vínculos al debate sobre la impresión de alta resolución en la FAQ bajo las órdenes [write](#) y [print](#). Se completó la tabla de asignación de colores [CPK](#) usada por RasMol, y se añadió una imagen coloreada para ilustrarlo.
- 97/07/25: Adición de algunos valores RGB perdidos en el [esquema de color CPK](#), y también [tabla clave de muestras de color en HTML](#).
- 97/07/04: Adición de valores hexadecimales RGB para colores amino y predefinidos.
- 97/06/29: Adición de valores RGB al [cpkcoloursesquema de color CPK](#) tanto decimales como hexadecimales.

- 97/03/16: Ampliación de la sección sobre [esquema de color de grupo](#), explicando el uso de [set hetero off](#) para controlar espectro de colores. También se corrigieron los colores de los extremos de las proteínas, que inadvertidamente se invirtieron en el manual de referencia.
 - 96/09/02: Adición de una nueva sección sobre el comando **trace**, y la consiguiente revisión de **backbone**. Se añadió la opción **dashes** a los comandos **backbone**, **strands**, y **wireframe**. Adición de una sección para **set bonds**. Adición de más detalles sobre el uso de pausa **pause** incluyendo su relación con **wait**. Adición de una sección sobre **set bonds**. Fue indexada la sección **set write** bajo **set** (había sido inadvertidamente omitido). Adición de una nueva sección sobre **exit** ahora es distinta de **quit**.
 - 96/08/14: El nombre del archivo rasman26.htm pasó a ser **rasman.htm** y los vínculos se hicieron independiente de la versión. También se hicieron pequeños cambios en los tipos y formato del texto.
 - 96/08/13: Actualización de la [Introducción](#) y adición de las secciones [Operaciones Generales](#), tomadas desde el manual de referencia no-html version 2.5. Fueron revisadas para hacerlas acordes con la versión 2.6 beta-2 (veanse comentarios en la fuente html).
-