

CONVENIOS

Las órdenes que deben ser tecleadas después de la impronta `RasMol>` se escribirán en tipo «Courier». Las órdenes que preferiblemente serán ejecutadas desde la barra de menús aparecerán en tipo «Arial». A lo largo del texto aparecerán una serie de líneas que comienzan por el símbolo [Q]; son las cuestiones que los alumnos han de resolver por sí mismos y entregar al final de la realización de la práctica.

EMPECEMOS




Tanto en un Macintosh como en un PC, para arrancar RasMol basta pulsar dos veces en el icono RasMol. Aparecen dos ventanas simultáneamente, una gráfica (de fondo negro) delante, y detrás (en MacOS) o minimizada (en Windows) la de órdenes —comandos— cuyo nombre es «RasMol Command Line». Se pueden seleccionar también a través del menú «**Windows**» de RasMol. En la versión Macintosh existe además un menú adicional **Edit** a través del cual podemos ejecutar **Select all** sin tener que teclearlo en la ventana de órdenes, como ocurre en las otras plataformas.

Cuando el puntero del ratón está sobre la ventana gráfica, este será representado como una **crux**. En cualquier otro caso aparecerá como una **punta de flecha**. Cualquier carácter que sea escrito en el teclado mientras la ventana gráfica esté delante (lo que quiere decir que está activa) se redirecciona a la ventana de la línea de comandos. Esto le proporciona la facilidad de no tener que conmutar de una a otra ventana para dar ordenes a RasMol.

ABRIR UN FICHERO

Aunque no siempre necesario, es conveniente que los ficheros que contengan las coordenadas de los átomos (ficheros PDB o ENT) estén en el mismo directorio que RasMol. Para abrir un fichero se pincha en el menú **File**, se selecciona el item **Open** (en adelante esto se indicará como **File-Open**) y se busca el fichero `1d66.pdb` dentro del carpeta `PDBFILES`. Este fichero contiene la información sobre Gal4p, un regulador de la transcripción de levaduras, unido a DNA. Los ficheros también se pueden abrir desde la ventana de comandos con la orden `load` y el nombre del fichero, si el fichero está en el mismo directorio. Puesto que es muy fácil equivocarse, la respuesta más frecuente será «**Error: File not found!**» indicando que la ruta indicada es incorrecta. En cualquier caso, siempre será más fácil utilizar el menú.

ROTACIÓN Y CAMBIO DE TAMAÑO

Con los botones de la barra de deslizamiento (*scroll bar*) se consigue rotar en el eje X o en el eje Y. Si se pincha en alguna parte de la pantalla y se mueve el ratón sin levantar el dedo del botón, el movimiento es combinado en los ejes X e Y. La rotación en el eje Z se consigue con el botón derecho y la tecla mayúsculas (o mayúsculas y  en el Mac y arrastrando el ratón sin pulsar el botón). Pinchando con el botón derecho del ratón (o con la tecla  en el Mac) se cambia de posición en la pantalla la imagen. Combinando el ratón con la tecla mayúsculas pulsada se consigue aumentar o disminuir el tamaño de la imagen (*zoom*). Para anular todos los desplazamientos, se puede usar `reset` o bien `CTRL-z` (-z en el Mac).

Se puede conseguir una rebanada de la molécula combinando el ratón con la tecla CTRL. Si lo pruebas, habrás activado el «**Slab mode**» del menú **Options**. Por tanto deberás hacer **Options—Slab Mode** para desactivar los cortes.

Acción	Windows	Macintosh
--------	---------	-----------

Rotar X,Y	Botón izquierdo	Pulsar botón
Trasladar X,Y	Botón derecho	Comando + botón*
Rotar Z	Shift-derecha	Shift-Commando + botón*
Zoom	Shift-izquierda	Shift + botón
Plano de corte (slab)	Ctrl-izquierda	Ctrl. + botón

IDENTIFICACIÓN DE ÁTOMOS Y RESIDUOS

Para identificar un átomo o enlace concreto que esté visualizándose, RasMol permite al usuario pinchar 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 el caso de que el ratón no esté exactamente sobre un objeto, RasMol se encarga de adjudicar la selección al átomo más próximo.

```
Atom: OG1 1631 Group: THR 55 Chain: B
Atom: CD 1712 Hetero: CD 30
```

En caso de que se haya pinchado sobre un átomo manteniendo simultáneamente pulsada la tecla CTRL o MAY, además de los datos anteriores, también devuelve las coordenadas del átomo

```
Atom: NE 1092 Group: ARG 46 Chain: H
Coordinates: 20.150 49.911 36.769
```

La descripción que aparece en la ventana de comandos comienza con dos letras y a veces un número que sirven para identificar el átomo en cuestión. La primera letra es la abreviatura del elemento atómico (recuerda que en las biomoléculas vas a encontrar C, N, O, H, S y P). La siguiente letra hace referencia a la posición α , β , γ o δ (A, B, G o D). Esto plantea a veces ambigüedades, como que CD puede ser «carbono delta» o cadmio. A continuación aparece la palabra 'Hetero' si el átomo pertenece a las moléculas heterogéneas (p. e. cofactores y solventes), o como 'Group' si es un residuo de la molécula principal. El siguiente descriptor es fácilmente identificable, puesto que describe el residuo en el que se incluye, y la posición de dicho residuo dentro de la molécula. Por último, se indica sobre qué cadena, de entre todas la representadas, se encuentra dicho átomo.

CAMBIO DE APARIENCIA

A través del menú **Display** se puede cambiar el aspecto de la estructura. Utiliza el zoom para acercar la imagen antes de hacer más modificaciones.

Por defecto, al abrir un fichero, éste aparece con la opción **Display—Wireframe** que representa las estructuras como un alambre. De manera similar **Display—Sticks** representa los mismos alambres, pero más gruesos. Para ver simplemente el esqueleto de la molécula, se utiliza **Display—Backbone**. La opción **Display—Spacefill** sirve para mostrar el espacio que ocuparía realmente la molécula si cada átomo ocupase una esfera con el radio de van der Waals. Una manera de ver mejor enlaces y átomos es utilizar la opción **Display—Ball & Stick** con la que Watson y Crick describieron por primera vez la estructura del DNA. Una representación muy útil

para la estructuras secundarias de las proteínas es la representación **Display—Ribbon**. que ha sido recientemente mejorada con la opción **Display—Cartoon** que permite identificar las estructuras secundarias de la proteína como una lámina más gruesa. Para verlo mejor ahora utiliza de nuevo el zoom para disminuir el tamaño de la imagen. La opción de **Display—Strands** es una representación similar a la de **Ribbons** pero en lugar de presentar superficies sólidas, presenta una serie de finas líneas paralelas que siguen el esqueleto de la molécula.

Para conseguir la representación que deseamos hay que saber que las ordenes dadas a través de *los menús* eliminan representaciones anteriores y muestra sólo la representación escogida, mientras que las ordenes tecleadas en la *ventana de comandos* superponen la representación escogida a la ya preexistente.

[Q1] Asocia cada una de las cintas de colores mostradas con proteína, DNA o cualquier otro tipo de molécula.

Antes de seguir selecciona **Display—Ball & Stick** para ver mejor los átomos. Escribe también `reset` o bien pulsa control-z (⌘-z en el mac) para eliminar todo desplazamiento y volver a la posición original

COLORES

RasMol permite cambiar los colores a las moléculas o a parte de ellas. Tiene definidos varios esquemas de colores, aunque por defecto muestra los C en gris, los N azules, los O rojos, y los P naranjas. Los hidrógenos no se suelen pintar, pero serían blancos. Por eso en los aminoácidos se ve azul el extremo amino y rojo el carboxilo. Este esquema es el de Corey, Pauling y Kultzin (CPK).

El tipo de colores por defecto se puede cambiar en el menú **Colours**. Seleccionando **Colours—CPK** estamos en los valores por defecto mencionados antes. **Colours—Group** colorea cada residuo de la cadena de acuerdo a su posición dentro de la misma, identificando los extremos N-terminal de las proteínas —o 5' en los ácidos nucleicos— en rojo y el resto de las posiciones se gradan hasta el azul. Seleccionando **Colours—Shapely** cambiarán de color según las propiedades químicas de cada residuo. Seleccionando **Colours—Chain** se consigue ver cuantas cadenas distintas hay en la imagen puesto que asigna un color distinto a cada cadena dentro de la molécula. Con **Colours—Structure** se consiguen distinguir las distintas estructuras secundarias presentes: magenta par las hélices α , amarillo para las hojas β , los giros en azul y el resto en blanco. **Colours—Temperature** colorea los átomos de acuerdo con su grado de movilidad o incertidumbre: los más móviles van en rojo, los fijos en azul, y entre ellos se gradan los colores.

También se puede colorear homogéneamente una molécula desde la ventana de órdenes: escribe:

```
RasMol> select all
RasMol> color green
```

y todo se pone verde. Si ahora escribes `color cpk` todo vuelve a los colores por defecto.

Deja la molécula con la selección **Colours—Chain** y **Display—Wireframe**.

SELECCIONAR MOLÉCULAS

Esta opción es muy útil para resaltar sólo unas partes de la molécula o eliminar aquello que no necesitamos. Son dos los comandos con los que se consigue: **select** (seleccionar) que permite escoger una parte de la molécula mientras se sigue mostrando lo demás, y **restrict** (restringir) que realiza una selección y además oculta aquello que no está seleccionado. Para ensayarlos comienza escribiendo:

```
RasMol> reset
```

```
||| Elimina cualquier cambio de posición o tamaño anterior, pero no afecta a las |  
||| selecciones ni a los cambios de apariencia. |
```

```
RasMol> select not (protein or dna)
```

Se seleccionan 55 átomos puesto que RasMol devuelve el mensaje `55 atoms selected!`. Para ponerlos en evidencia ejecuta **Display—Spacefill**. Lo que se ha hecho es no seleccionar ni el DNA ni la proteína, por lo que se han ilustrado los que quedan, esencialmente las moléculas de agua presentes. Pero pueden haber moléculas que no sean de agua. Para verlo, escribir

```
RasMol>restrict not water
```

```
||| Ocultará todo lo seleccionado que no sea agua |
```

Se ve claramente que hay una serie de átomos representados como esferas que no se han ocultado.

[Q2] Pincha sobre los 4 átomos para saber de qué se trata.

La molécula original de Gal4p usa como cofactor el Zn para formar los domios de unión al DNA. Esta estructura es parecida a un dedo de Zn, pero no lo es. Lo átomos identificados antes no son Zn porque para la cristalización de la proteína fue necesario sustituirlos por otro catión. Esto demuestra que los ficheros de estructuras cristalinas reflejan realmente lo que está cristalizado, no lo que 'debería' haber cristalizado. Por eso siempre es aconsejable leer el artículo en el que se describe el proceso por el que se obtuvo la cristalización.

Tanto **select** como **restrict** pueden utilizarse en combinación con el comando **within** para realizar una selección en torno a un punto determinado. Vamos a utilizarlo para reconocer quién interacciona con los cationes de Gal4p. Escribe:

```
RasMol> reset
```

```
RasMol> select cd
```

Display—Spacefill.

```
||| Si no habías tocado nada, la molécula debe permanecer con la misma apariencia: |  
||| las cadenas de distintos colores representadas como alambres y los 4 cationes en |  
||| forma de esferas |
```

```
RasMol> select within(2.6, selected)
```

```
||| selecciona todos los átomos que se encuentren a menos de 2'6 Å de lo |  
||| seleccionado. |
```

Display—Spacefill

Hemos utilizado la palabra reservada **selected** para hacer referencia a todo lo que se ha seleccionado anteriormente. Hubiera sido equivalente haber escrito **select within(2.6, cd)** puesto se habían seleccionado previamente los átomos de Cd.

[Q3] Pincha sobre cada una de las bolitas para descubrir de qué átomo se trata, y sobre qué residuo se encuentran.

[Q4] ¿Por qué no es realmente un dedo de Zn?

ESTRUCTURAS SECUNDARIAS

Para localizar las hélices α (púrpuras), las hojas β (amarillas) y las regiones sin estructura (gris), vamos a hacer lo siguiente:

```
RasMol> reset
```

Edit – Select All

*En la versión Windows sólo se puede seleccionar todo escribiendo en la ventana de comandos `select *` o bien `select all`.*

Display—Backbone

Colours—Structure

Sólo deben aparecer esqueletos coloreados de púrpura y de gris. No deben verse las esferas identificadas en el apartado anterior

Estos colores sugieren que el fichero PDB no indica que haya aminoácidos formando estructuras de giro (azul) ni de hoja β . Sin embargo, RasMol tiene implementado un algoritmo que le permite recalcular la estructura secundaria de la molécula en función de las coordenadas especificadas en el fichero PDB. Para ello:

```
RasMol> structure
```

En la ventana de comandos aparece la descripción de todas las estructuras que ha identificado RasMol

Colours—Structure

Vuelve a colorear la estructura y ahora aparecen algunos fragmentos en azul

[Q5] ¿Cuántos giros contiene la molécula?

CONTACTOS ENTRE DNA Y PROTEÍNA

RasMol no detecta los distintos tipos de puentes o enlaces entre distintas cadenas. Por eso, para visualizar los átomos implicados en el contacto entre dos moléculas hay que utilizar la siguiente estrategia:

```
RasMol> reset
```

Display – Backbone

```
RasMol> color green
```

```
RasMol> backbone 200
```

De esta manera hemos engrosado el esqueleto a 200 unidades RasMol.

```
RasMol> backbone 2.0
```

De nuevo se cambia el grosor del esqueleto, pero ahora son 2 Å. Se consideran Å todos los números que contienen el «punto» decimal (recuerda que la sintaxis es inglesa).

```
RasMol> backbone 0
```

|| *Disminuye el grosor del esqueleto al mínimo* |

```
RasMol> translate y -17
```

|| *El comando translate sirve para realizar una traslación de la molécula de manera precisa. Como en el caso de rotate, hay que especificar el eje por el que se traslada y el valor (en pixels) de la rotación.* |

[Q6] Sabiendo que el centro de la pantalla es el centro de coordenadas, determina hacia qué lados de los ejes X e Y se encuentran los valores positivos y negativos.

Para responder la pregunta anterior seguramente has cambiado la posición de la molécula. Las dos primeras órdenes de la siguiente lista sirven para que vuelvas a colocar la molécula en la posición correcta

```
RasMol> reset
```

```
RasMol> translate y -17
```

```
RasMol> rotate z 91
```

|| *El comando rotate sirve para especificar un giro de forma más precisa que con el ratón. Debe especificarse el eje en el que se realiza el giro y el ángulo en grados.* |

```
RasMol> zoom 200
```

|| *La molécula no se puede desplazar por el eje Z, por lo que su equivalente es el aumento/disminución de tamaño. Puedes ver que el resultado de los últimos movimientos ha sido centrar y agrandar la molécula sobre el DNA* |

```
RasMol> select dna
```

```
RasMol> color white
```

```
RasMol> spacefill
```

De esta forma hemos aprendido otra manera de cambiar la apariencia de la molécula y otra manera de localizarla en la pantalla sin utilizar el ratón. También se puede observar con toda claridad la estructura del DNA, con sus surcos mayor y menor. Activa un momento la opción **Options—Shadows** y verás cómo parece que hay una fuente de luz intensa detrás de la molécula que nos ilumina una parte y nos deja en sombras la otra. Desactívala volviendo a seleccionar lo mismo en el menú.

Las órdenes escritas con anterioridad se pueden recuperar pulsando la tecla que tiene la «flecha hacia arriba». Si hemos retrocedido demasiado, podemos avanzar entre las órdenes con la tecla de la «flecha hacia abajo». Recupera la orden `select dna` y añade a continuación `and backbone`:

```
RasMol> select dna and backbone
```

```
RasMol> color yellow
```

Ahora se puede ver el esqueleto del DNA (fosfatos y la ribosa) en amarillo y las bases nitrogenadas en blanco. La proteína sigue representada como un esqueleto de alambre. Procediendo como durante la identificación del catión:

```
RasMol> select within(3.1, dna) and not dna and not water
```

|| *Se consigue seleccionar todo lo que está a menos de 3'1 Å de la molécula de DNA, pero se descarta (uso de la negación not) el propio DNA y las moléculas de* |

agua circundantes. El programa debe indicarte que se han seleccionado 19 átomos.

```
RasMol> dots
```

Los átomos seleccionados aparecen rodeados por una esfera de puntos verdes puesto que sólo se han seleccionado los de la proteína, que están en verde. Es equivalente a «spacefill», pero las esferas no son sólidas, sino transparentes. Además se muestran sólo la parte de la esfera que queda dentro del radio de 3'1 Å

```
RasMol> spacefill 0.6
```

Se representa el centro del átomo como una esfera de 0'6 Å de radio. Es un ejemplo en el que se han superpuesto dos tipos de representaciones sobre el mismo átomo.

```
RasMol> color cpk
```

Ahora se ven los átomos de contacto en la proteína como pequeñas esferas azules (N) dentro de esferas verdes punteadas (dots). También se aprecian algunos átomos de oxígeno (rojos). Pinchando sobre los N que están en el centro de la imagen se obtiene

```
Atom: NH1 1601 Group: Arg 51 Chain: B
```

```
Atom: NH1 1134 Group: Arg 51 Chain: A
```

```
Atom: NE 1131 Group: Arg 51 Chain: A
```

```
Atom: NE 1124 Group: Arg 51 Chain: A
```

Que nos indica que se trata de Ns pertenecientes de la Arg 51 de ambas cadenas. Para seleccionar ambas Arg simultáneamente:

[Q7] ¿Por qué se han seleccionado principalmente grupos N cerca del DNA?

```
RasMol> select arg51
```

[Q8] Teniendo en cuenta el número de átomos que se han seleccionado, ¿cuántos átomos tiene cada arginina?

Display – Ball & Stick

Colours—CPK

Vamos a llevar la molécula hacia la región de reconocimiento específico de la secuencia:

```
RasMol> translate x -20
```

Pincha sobre todas las esferitas que corresponden a los residuos que interaccionan con el DNA.

[Q9] ¿Qué aminoácidos interaccionan con el DNA?

La interacción de este dominio puedes analizarla con detalle siguiendo la visita guiada al complejo Ga4p-DNA en <http://www.bmbq.uma.es/av/pract/ga14/>.

LIGANDOS, COFACTORES Y OTRAS MOLÉCULAS

Así se verán moléculas de agua, cationes y cofactores, si acaso están presentes. Para ello:

```
RasMol> reset
```

Edit – Select All

Display – Backbone

Volviendo a mostrar la molécula como un esqueleto, siguen quedando de manifiesto las esferas de puntos que se mostraron previamente. Si quieres hacerlas desaparecer, escribe *dots off*.

```
RasMol> select ligand
```

A diferencia de la vez anterior, no se seleccionan las moléculas de agua, sino sólo los ligandos.

Display—Spacefill

```
RasMol> select hetero s
```

```
RasMol> color white
```

Aunque RasMol había indicado que se seleccionaban como «hetero» 55 átomos, solamente aparecen blancos los 4 átomos ligandos. Esto es debido a que el resto de los átomos seleccionados no pueden mostrarse con el aspecto seleccionado previamente (backbone). La única manera de poder ver átomos que no están en una estructura secundaria reconocible es como «Ball & Stick» o como «Spacefill».

Display—Ball & Stick

SELECCIONAR PARTES DE LA MOLÉCULA.

Ya hemos visto que se puede seleccionar la «protein», el «dna», la «water», cada aminoácido por su nombre, así como los cationes («Cd»), «ligand», etc. Existen otras maneras de seleccionar partes de las moléculas, y la lista de las palabras clave que representan porciones interesantes de una molécula son:

Conjuntos predefinidos

<i>Proteínas</i>		<i>Ácidos nucleicos</i>		<i>Ambos</i>	<i>Otros</i>
acidic	alpha	purine	backbone	hydrogen	
acyclic	amino	pyrimidine	mainchain	selected	
aliphatic	cystine	nucleic	sidechain	ions	
aromatic	helix	rna	bonded	hetero	
basic	sheet(s)	dna	ligand	solvent	
turn	cystine	at		water	
cyclic	charged	cg		bonded	
hydrophobic	neutral				
polar	protein				
surface	buried				
small	medium				
large					

Veamos un ejemplo:

```
RasMol> reset
RasMol> select hydrophobic
RasMol> color magenta
```

Display—Spacefill

||| *Se observa bien donde están los residuos hidrofóbicos* |

Display—Sticks

||| *Otra manera de ver la localización en las hélices anfipáticas* |

Vamos a mostrar una estructura especial que sirve para dimerizar proteínas, que es la cremallera de leucinas. Con esta estructura se mantiene estable el dímero de Gal4p.

```
RasMol> select leu
RasMol> color green
```

||| *Se han puesto verdes todas las leucinas de las proteínas. Continúan de magenta el resto de los residuos hidrofóbicos.* |

```
RasMol> restrict helix
```

Display—Cartoons

```
RasMol> select leu61, leu54, leu49
```

Display—Spacefill

Puedes observar que las 3 leucinas seleccionadas interactúan entre sí, por lo que mantienen el dímero a través de interacciones hidrofóbicas. En el caso de Gal4p hay además otro aminoácido hidrofóbico entre las Leu 54 y 61

[Q10] ¿De qué aminoácido se trata? Muéstralo en forma de esferas para ver si interactúan entre sí

Para seleccionar todos los átomos de la cadena A y mostrarla en modelo de bolas hay que proceder de la siguiente forma:

```
RasMol> select *
```

Display –Sticks

||| *De esta manera se devuelve la estructura a la representación previa al estudio de la cremallera de leucinas.* |

```
RasMol> select *:A
```

Display – Spacefill

Para seleccionar la cadena B y ponerla en cintas:

```
RasMol> select *:B
```

Display – Ribbon

Incluso podemos hacer

```
RasMol> select *D
```

Display – Ball & Stick

Hemos conseguido que cada cadena se muestre de una manera distinta, además de observar los átomos de agua y Cd. También hay que fijarse en los maneras posibles en que se ha escrito la selección de una de las cadenas «* :A» y «*A»)

[Q11] Representa como esferas de color rojo los aminoácidos cargados, y como barritas (sticks) verdes todas las purinas

PUENTES DE HIDRÓGENO Y DISULFUROS

A menudo es útil ver los puentes de hidrógeno dentro de una molécula. Se ven muy claros cuando las moléculas se muestran como esqueleto o cintas. RasMol sólo va a mostrar los puentes de hidrógeno que se establezcan entre residuos de la misma cadena, nunca entre los que aparezcan en diferentes cadenas, salvo en el caso del DNA.

```
RasMol> reset
```

Edit – Select All

Display – Wireframe

```
Mostramos la molécula como alambres para que no se represente lo que no necesitamos. También se podría conseguir usando el comando restrict not hetero
```

Colours – Structure

```
RasMol> restrict helix
```

```
Sólo se ven los residuos que forman parte de las hélices  $\alpha$ 
```

```
RasMol> centre selected
```

```
El comando centre sirve para establecer un nuevo centro masas de la molécula basado en el argumento del comando (en este caso, selected). Puede observarse una reubicación de la molécula.
```

Display – Backbone

```
RasMol> hbonds 0.5
```

```
Engrosa los puentes de hidrógeno a 0.5 Å
```

```
RasMol> color hbonds yellow
```

Acercar la imagen con MAY-izq. Los puentes de hidrógeno aparecen «flotando» en el espacio porque los átomos entre los que se forma no se muestran.

Display—Ball & Stick

Colours—CPK

Ahora se puede ver qué átomos están formando puentes de hidrógeno. Si pinchas sobre ellos los puedes identificar.

También se puede conseguir una representación esquemática de la estructura de la siguiente forma:

```
RasMol> reset
```

```
RasMol> select helix
```

```
Repite esto por si acaso observando la estructura has cambiado la selección
```

Display – Cartoons

```
RasMol> set hbonds backbone
```

Puesto que estamos analizando hélices alfa, en esta representación se puede observar mejor cómo los puentes de hidrógeno que estabilizan las hélices α son paralelos entre sí. Para eliminar la presencia de los puentes de hidrógeno escribe:

```
RasMol> hbonds off
```

Para visualizar los puentes disulfuro se procede de manera similar, pero usando la orden `ssbonds`.

[Q12] Visualizar los puentes de hidrógeno del DNA

[Q13] Comprueba si hay puentes disulfuro en la proteína.

ESCRIBIR SOBRE LA MOLÉCULA

Para ciertas presentaciones ilustrativas puede ser conveniente enfatizar alguna posición o señalar expresamente algo. Para eso, lo primero es pinchar sobre el átomo en cuestión para identificarlo, como por ejemplo

```
Atom: O 1606 Group: ALA 52 Chain:B
```

con lo que sabemos que hemos tocado sobre un oxígeno de la Ala en posición 52 de la cadena B. Queremos marcar este átomo con la etiqueta «posición clave». Para ello escribiremos:

```
RasMol> select atomno=1606
```

La orden atomno sirve para identificar un átomo por su posición, que es única para cada molécula. Si en nuestra selección cubrimos más de un átomo, conseguiríamos después que todos ellos llevaran la misma etiqueta.

```
RasMol> label «Posición clave»
```

El color del texto toma por defecto el color del átomo afectado. Pero se puede cambiar el color de las etiquetas escribiendo:

```
RasMol> color label green
```

Si simplemente queremos identificar un átomo, podemos emplear la autoidentificación que lleva implementada RasMol escribiendo:

```
RasMol> set picking label
```

Pulsa ahora sobre varios átomos y observa lo que ocurre.

Para ocultar todas las etiquetas, escribiremos

```
RasMol> label off
```

DISTANCIAS ENTRE ÁTOMOS

Con RasMol se pueden obtener las distancias que separan dos átomos (longitud del enlace), así como el ángulo que forman dos enlaces, o el ángulo diédrico o de torsión entre dos planos de la molécula.

```
RasMol> reset
```

Edit—Select all

Display—Spacefill

```
RasMol> set picking distance
```

El comando `set picking` determina qué ha de hacer RasMol cuando se pincha con el ratón en alguna parte de la molécula. Por defecto, como hemos visto, RasMol identifica el átomo. Ahora lo hemos forzado a devolver distancias.

Ahora pincha sobre dos átomos y observa la información que aparece en la última línea de la ventana de comandos. Si estás usando una versión posterior a la 2.7.2, también te aparecerá sobre la molécula la distancia en cuestión. Para conseguir que no devuelva el resultado más que sobre la imagen, uniendo los dos átomos con una línea y pintando sobre la molécula la distancia en Å hay que seleccionar otra opción:

```
RasMol> set picking monitor
```

Vuelve a pinchar sobre dos átomos cualesquiera cerca de los bordes de la molécula y observa lo que ocurre.

Al igual que ocurre con las etiquetas, el color de las distancias lo toma del color de los átomos sobre los que has pinchado. Existe la posibilidad de poner todas las distancias del mismo color con:

```
RasMol> set monitor white
```

Para restablecer las condiciones por defecto de RasMol, escribe:

```
RasMol> set monitor off
```

Elimina sólo la etiqueta de las distancias, pero no afecta a la línea que une los átomos

```
RasMol> monitor off
```

Elimina la etiqueta y la línea que los une.

```
RasMol> set picking ident
```

Vuelve a establecerse que pinchar sobre un átomo lo identifique en la ventana de comandos

En la versión 2.7.2 y posteriores se pueden especificar todos estos cambios sin necesidad de escribir los comandos, sino utilizando el nuevo menú **Settings** y escogiendo las distintas posibilidades de **Pick Ident**, **Pick Distance** o **Pick Monitor**. Esto incluye también la opción **Settings—Pick Label** para etiquetar los átomos con su nombre.

GUARDAR Y RESCATAR IMÁGENES MODIFICADAS

A veces interesa guardar una determinada manera de visualizar una proteína por cuestiones de estética o para retomar más adelante la visualización en el mismo punto en que se dejó. La extensión que se pone al fichero puede ser cualquiera; habitualmente se usaba 'scr' por Script, pero es más adecuado poner 'spt' porque de esta manera se hace compatible con Chime —la versión web de RasMol—. Para ello hay que escribir

```
RasMol> save script mivista.spt
```

La imagen se puede cargar luego como

```
RasMol> script mivista.spt
```

Existe también la posibilidad de guardar el contenido de la ventana principal como un documento gráfico que ilustre un texto. Para eso está el menú **Export** que permite guardar la imagen en diversos formatos de intercambio (GIF, PICT, Postscript, etc) según la necesidad.

Por último, la imagen también se puede copiar empleando el menú **Edit—Copy**.

BIBLIOGRAFÍA

- R. A. Sayle, E. J. Milner-White (1995) RasMol: Biomolecular graphics for all, *Trends Biochem. Sci.* **20**;, 374-376
- H. J. Bernstein (2000) Recent changes to RasMol, recombining the variants. *Trends Biochem Sci* **25**, 35-37

Base de datos de ficheros PDB

```
http://www.rcsb.org/pdb/
```

Sitios principales de RasMol

```
http://www.umass.edu/microbio/rasmol/index2.html
```

```
http://www.OpenRasMol.org/
```

```
http://www.bernstein-plus-sons.com/software/rasmol/
```

Manuales y visitas guiadas más completas

```
http://www.ugr.es/~gebqmed/esrasmol.html
```

```
http://www.umass.edu/microbio/rasmol/rastut.htm
```

```
http://www.usm.maine.edu/~rhodes/RasTut/index.html
```

```
http://info.bio.cmu.edu/Courses/BiochemMols/RasFrames/RASMAIN
```

.HTM

Para ir más lejos, la evolución de RasMol es «Protein Explorer»

```
http://www.umass.edu/microbio/chime/explorer/
```

y su versión en español

```
http://www.bmbq.uma.es/biorom/contenido/pe/inicio.htm
```