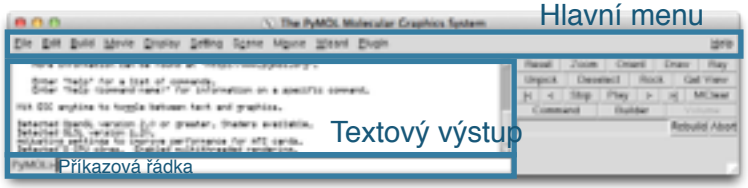
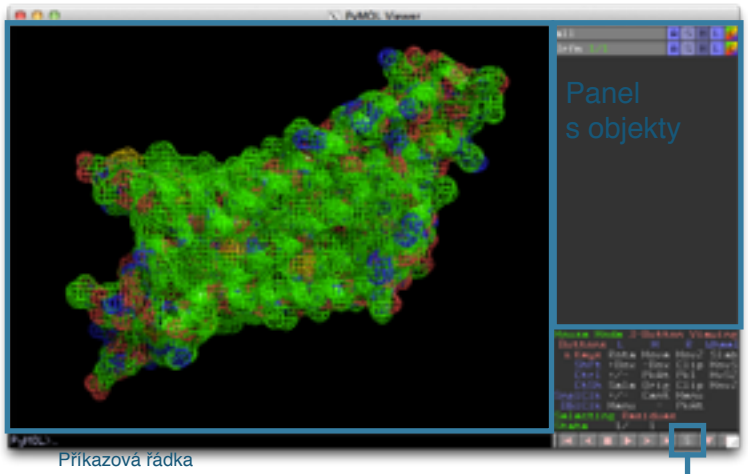
PyMol CheatSheet

Rozhraní

Externí rozhraní



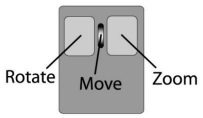
Interní rozhraní s prohlížečem



A (**a**ction) - akce
S (**s**how) - zobraz
H (**h**ide) - skryj
L (**l**abel) - popiš
C (**c**olor) - barva

Sekvence

Práce s myší



Levé tlačítko - rotace
Kolečko - posun
Pravé tlačítko - přiblížení

Otvírání souborů

```
load <soubor> [, <název objektu>]
```

Příklady:

```
load 3rfm.pdb, koefein
load caffeine.pse
```

Získání PDB z Protein Databank

```
fetch <čtyřmístný kód>
```

Příklad:

```
fetch 3rfm
```

Výraz výběr (v.v., selection-expression)

	Klíč. slovo	Zkr.	Příklad
Index	`id ?`		`id 2257`
Symbol	`symbol ?`	`e. ?`	`symbol C`
Název	`name ?`	`n. ?`	`name CA`
Název res.	`resn ?`	`r. ?`	`resn GLY`
Index residua	`resi ?`	`i. ?`	`resi 10`
Řetězec	`chain ?`	`c. ?`	`chain A`
Sek. struktura	`ss`		`ss H+S+L+""`
Všechno	`all`	`*`	
Nic	`none`		
Vodíky	`hydro`	`h.`	
Heteroatomy	`hetatm`	`het`	
A zároveň	`and`	`&`	`e. C & n. CA`
Nebo	`or`	`|`	`e. N | e. O`
Spojování		`+`	`e. N+O`
Negace	`not`	`!`	`! resn HIS`
V	`in`		`h. in het`
V okolí	`? around X`	`r.`	`CFF around 5`

Základní příkazy

Přiblížení

```
zoom <objekt nebo výraz výběru>
```

Příklady:

```
zoom *
zoom chain A
zoom r. CFF
```

Vytvoření výběru

```
select <výraz výběru>
select <název>, <výraz výběru>
```

Příklady:

```
select e. C
select kofein, r. CFF
```

Zobrazení show Skrytí hide

```
show <reprezentace>[, <objekt nebo výraz výběru>]
hide <reprezentace>[, <objekt nebo výraz výběru>]
```

Reprezentace: `lines, sticks, cartoon, ribbon, dots, spheres, surface, mesh`

Příklad: `hide lines; show cartoon`

Vytváření a mazaní

```
create <název>, <v.v.> # vytv. nový obj.
extract <název>, <v.v.> # extr. do n. obj.
delete <objekt>   # smaže celý objekt
remove <výraz výběru>   # smaže výběr
```

Barvy

```
color <barva>[, <objekt nebo výraz v.>]
bg_color <barva>
```

Vodíky

```
h_add [<objekt nebo výraz výběru>]
```

Počet atomů

```
count_atoms [<objekt nebo výraz výběru>]
```

Tvorba obrázku

```
ray [<šířka>, <výška>]
png <název souboru>
```

Nastavení

```
set <parametr>, <hodnota>[, <obj. | v. v.>]
```

Příklady:

```
set valence, 1    # Zobraz dvoj. vazby.
set internal_gui, 0 # Skryj panel s obj.
```

Nápověda

```
help [<téma nebo příkaz>]
```

Příklady:

```
help selection                help set
```

Ukládání

```
save <název>.<typ> [, <obj. | v. v.>]
```

Typ: pdb (struktura), pse (prac. plocha), png

Reinicializace

```
reinit
```

Popisky

```
label <výraz výběru>, <výraz>
```

Příklad: `label r. CFF, ID`

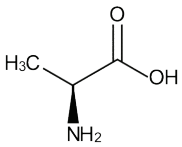
Autor: Stanislav Geidl
(standag@chemi.muni.cz)

Copyright © 2013 NCBR | http://ncbr.muni.cz/chemoinformatics/

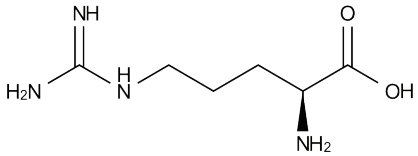
Přehled aminokyselin

CEITEC
Středoevropský technologický institut
BRNO | ČESKÁ REPUBLIKA

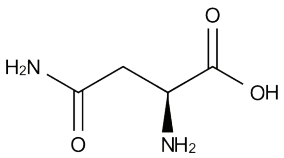
alanin - A (ALA)



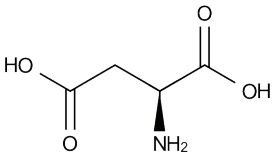
arginin - R (ARG)



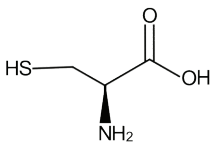
asparagin - N (ASN)



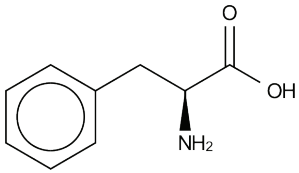
asparagová k. - D (ASP)



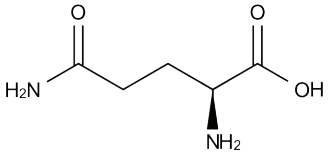
cystein - C (CYS)



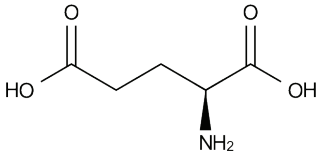
fenylalanin - F (PHE)



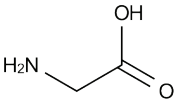
glutamin - Q (GLN)



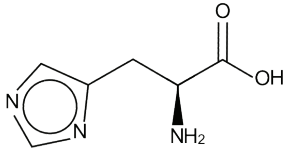
glutamová k. - E (GLU)



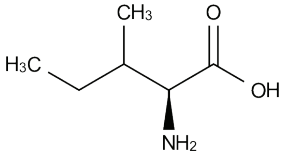
glycin - G (GLY)



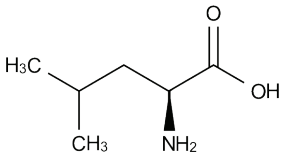
histidin - H (HIS)



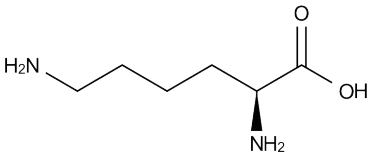
isoleucin - I (ILE)



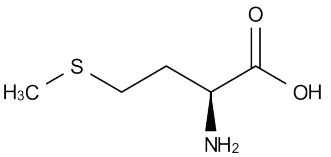
leucin - L (LEU)



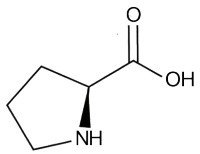
lysin - K (LYS)



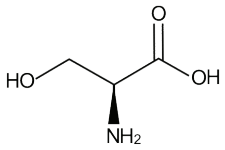
methionin - M (MET)



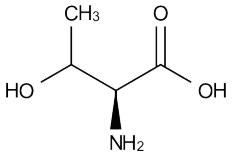
prolin - P (PRO)



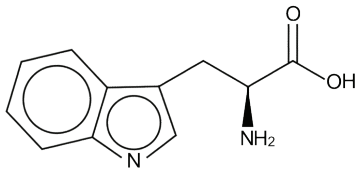
serin - S (SER)



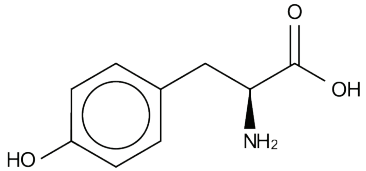
threonin - T (THR)



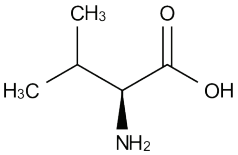
tryptofan - W (TRP)



tyrosin - Y (TYR)



valin - V (VAL)



Všechny aminokyseliny zde uvedené jsou v L- konfiguraci