



Jmol – כלי המשמש להצגת מודלים מבניים תלת-ממדיים של מולקולות.



Jmol – תוכנת קוד פתוח מבוססת JAVA המיועדת להצגת מודלים מבניים תלת-ממדיים של מולקולות כגון: חלבונים, חומצות גרעין, גבישים, תרכובות כימיות או כל מולקולה שיש לה קובץ מבני. התוכנה תומכת במגוון סוגים של קובצי מבנה, שבנק נתוני החלבונים (Protein Data Bank-PDB) הוא הנפוץ שבהם.

באמצעות Jmol ניתן להציג מולקולות במגוון דרכי תצוגה, כל דרך תצוגה ממחישה היבט אחר במבנה. כך לדוגמה, ניתן להציג מודל של השלד הפפטידי, של שלד המבנים השניוניים, של האטומים והקשרים ביניהם, של נפח קשרי הואן-דר-ואלס ועוד. התוכנה מאפשרת גם להציג את האטומים ואת הקשרים הכימיים ביניהם של נפח קשרי הואן-דר-ואלס ועוד. התוכנה מאפשרת גם להציג את האטומים ואת הקשרים הכימיים ביניהם בדרכים שונות, בדרך של עיצוב הצבע, עיצוב הגודל ועוד. באמצעות התוכנה ניתן גם לבחור מרכיב מסוים בדרכים שונות, בדרך של עיצוב הצבע, עיצוב הגודל ועוד. באמצעות התוכנה ניתן גם לבחור מרכיב מסוים במולקולה כגון חומצות אמינו מסוג מסוים (לדוגמה: הידרופוביות או טעונות שלילית וכו׳); בעמדה מסוימת (חומצה אמינית בעמדה 30 או אלו בעמודת 52–41 אוכו׳); באטומים מסוג מסוים (לדוגמה: אטומי פחמן, חמצן (חומצה אמינית בעמדה 30 או אלו בעמודת 52–41 אוכו׳); באטומים מסוג מסוים (לדוגמה: אטומי פחמן, חמצן (חומצה אמינית בעמדה 30 או אלו בעמודת 52–41 אוכו׳); באטומים מסוג מסוים (לדוגמה: אטומי פחמן, חמצן (חומצה אמינית בעמדה 30 או אלו בעמודת 52–41 אוכו׳); באטומים מסוג מסוים (לדוגמה: אטומי פחמן, חמצן (חומצה אמינית בעמדה 30 או אלו בעמודת 52–41 אוכו׳); באטומים מסוג מסוים (לדוגמה: אטומי פחמן, חמצן (עודב); במולקולה אפשר לבצע פעולה מסוימת כגון: עוד); במולקולות מים; בליגנד ועוד. רק על המרכיב הנבחר במולקולה אפשר לבצע פעולה מסוימת כגון: להסתירו, לשנות את הצבע, לעצב את דרך הצגה, לקבוע את הגודל ועוד. את המולקולה ניתן להזיז ולסובב, לקרב ולהרחיק באופן שיאפשר מבט מיטבי על מרכיביה ולמידה מעמיקה על המרכיב הנחקר במולקולה.



הנחיות להתקנת התוכנה במחשב ביתי יוצגו בסוף הסיור מודרך.



גישה לאתר הבית של Jmol: גישה לאתר הבית של

<u>http://wiki.jmol.org/index.php/Main_Page</u> :WiKi-ב Jmol גישה לדף קהילת



ברוכים הבאים לסיור המודרך של סביבת העבודה Jmol .Jmol היא סביבת עבודה ממוחשבת המציגה מודלים מבניים של מולקולות. בהדרכה זו נתמקד בהצגת מודלים של חלבונים, אבל תכנת Jmol יכולה להציג גם מבנים של חומצות גרעין, תרכובות אורגניות, או כל מולקולה שיש לה קובץ מבני.

התקנת Jmol במחשב ביתי

אם אתם במהלך שיעור כיתתי, קרוב לוודאי שכבר הותקנה על מחשבכם תכנת Jmol, ותוכלו למצוא אותה בספריית Jmol על שולחן העבודה. אם כן לחצו על הקובץ Jmol.bat בעל צלמית של גלגלי-שיניים, וסביבת העבודה תיפתח. אם אתם עובדים מהבית, עליכם לבצע תחילה את ההוראות להתקנת Jmol במחשב הביתי.

סרגל הכלים

זהו סרגל הכלים של Jmol. שימו לב שניתן לעבור עם העכבר מעל סרגל הכלים, ותיאור קצר של כל כפתור יופיע מתחתיו.



הטענת קובץ מבנה

התוכנה Jmol מקבלת כקלט קובצי מבנה של מולקולות. קובצי מבנה של חלבונים הם מסוג PDB ולכן נושאים סיומת זו. ניתן למצוא קבצים מסוג זה במאגר הנתונים RCSB-PDB. במהלך הסיור המודרך נתבונן בקובץ המבנה של החלבון Green Fluorescence Protein או בראשי תיבות: GFP.

B Jmol	- ē 🔀
<u>File Edit Display View Tools Macros</u>	<u>H</u> elp
מסר פתיחת הורא	
File→Open	
🔮 Open	X
Look In: imol-11.8.24	
	Preview
COPYRIGHT.txt hs err pid8256.Jog	
hs err pid2308Jog	
hs err pid#16.log	
hs_err_pid5240.log 🚺 Jmol.jar	Append models
File or LIPL IEMé ndh	
Files of Type: All Files	
לחצן לפתיחת 🔪	Open Cancel
קובץ מבוקש	open
	Jmoi

תצוגות שונות למבנה חלבון

המבנה המרחבי של החלבון קובע את צורתו. ניתן ללמוד רבות על תפקודו של חלבון רק מהתבוננות במבנה המרחבי שלו. אפשר להציג את מבנה החלבון בדרכי תצוגה רבות, וכל תצוגה ממחישה ומדגישה תכונה אחרת במבנה החלבון. ברירת המחדל של Jmol היא להציג את מבנה החלבון בצורה של מוטות וכדורים: Balls and Sticks". כל אטום מוצג ככדור, וכל קשר כימי מוצג כקו. כדור אדום הוא חמצן, כדור כחול הוא חנקן וכדור אפור הוא פחמן. צביעה כזו היא מוסכמת ונקראת CPK על שם ממציאיה.

דרך התפריט Style → Scheme ניתן לבחור דרכי הצגה נוספות לחלבון: Style → Scheme כמוטות. גם בתצוגה זו, כמו בקודמתה, מפורטים כל האטומים במבנה. תצוגת ה-Cartoon מציגה את החלבון כמוטות. גם בתצוגה זו, כמו בקודמתה, מפורטים כל האטומים במבנה. תצוגת ה-Cartoon מציגה את החלבון על פי המבנה השניוני שלו. סליל אלפא צבוע בוורוד, משטח בטא צבוע בצהוב. צביעת המבנה בצורה כזו נקראת scondary Structure , משטח בטא צבוע בוורוד, משטח בטא צבוע בצהוב. צביעת המבנה כזו נקראת מרמנית שלו. סליל אלפא צבוע בוורוד, משטח בטא צבוע בצהוב. צביעת המבנה בצורה כזו נקראת structure שניוני שלו. סליל אלפא צבוע בוורוד, משטח בטא בעוג נשים לב שבתצוגה זו אין אנו יכולים נקראת structure Trace, כי כל אלמנט שניוני צבוע בצבע שונה. נשים לב שבתצוגה זו אין אנו יכולים להבחין בחומצות אמינו בודדות וודאי לא נבחין באטומים בודדים. תצוגת ה-Trace מציגה את החלבון כחוט להבחין בחומצות ה-CPK Spacefill מציגה היא על פי מודל CPK. ארוך, ותצוגת ה-SPK נקר שנים. כל כדור מייצג נפח של אטום. נפח האטומים נקבע לפי נפח קשרי הוואן-דר-ואלס. גם בתצוגה הזו הצביעה היא על פי מודל Style.



Backbone-תצוגות נוספות למבנה החלבון אפשר לבחור דרך תפריט Style → Structures. לדוגמה, תצוגת ה-Cartoon מציגה את מבנה השרשרת הפפטידית של החלבון ללא השיירים של חומצות האמינו. תצוגת ה-Rockets מציגה את סלילי האלפא כטילים.



כפי שראינו עד כה, לאותו החלבון יש כמה דרכי תצוגה, וכל אחת מהן מדגישה תכונה שונה במבנה.

הזזת החלבון

לעתים קרובות נרצה להזיז את החלבון כדי להסתכל עליו מזוויות שונות או כדי לצפות באזורים מסוימים או כדי לשלוט במידת ההגדלה. לשם כך נלחץ על סביבת העבודה עם הלחצן השמאלי של העכבר, כעת נגולל את כפתור העכבר האמצעי למעלה ולמטה. פעולה זו תקרב ותרחיק את החלבון. ניתן לעשות זאת גם בעזרת התפריט: לחיצה על לחצן ימני בעכבר פותחת תפריט לאפשרויות נוספות. נבחר 800% → Zoom. תצוגת החלבון הוגדלה ל-800%, וכעת אנו מיטיבים לראות את האטומים. נחזיר את החלבון לתצוגת 100%.





כעת נזיז את העכבר למעלה ולמטה כשהכפתור לחוץ – החלבון יסתובב מעלה ומטה.



כשהלחצן השמאלי של העכבר לחוץ נזיז את העכבר ימינה ושמאלה – החלבון יסתובב ימינה ושמאלה.

הכלי Jmol

Select תפקודת

עקרון העבודה ב-Jmol מבוסס על שני שלבים – תחילה נבחר חלק במולקולה, ועל חלק זה נבצע פעולה מסוימת.

פעולת ה-Select מאפשרת לנו לבצע פעילות רק על חלק ממבנה החלבון. זהו עיקרון בסיסי בעבודה ב-Jmol: בשלב הראשון אנחנו בוחרים את החלק במבנה שעליו אנחנו מבצעים את הפעולה באמצעות הפקודה Select, ובשלב השני אנחנו מבצעים את הפעולה הלכה למעשה.



לדוגמה, נבחר רק את חומצות האמינו הבסיסיות ונצבע אותן בצבע כחול. פעולה זו בנויה משני של ים: בשלב Select → Protein → Basic Residues הראשון אנו בוחרים את חומצות האמינו הבסיסיות בלבד דרך התפריט Seloct → Atoms → Blue. שימו לב: בשלב זה המבנה עדיין לא השתנה. בשלב הבא נצבע אותן בכחול



לחלבון GFP יש קו-פקטור מתכת שנקרא סלניום. בואו נסמן אותו במבנה. ראשית נבחר את יון המתכת: GFP יש קו-פקטור מתכת שנקרא סלניום. בואו נסמן אותו על גבי המולקולה על ידי שינוי נפח קשרי הוואן-דר-Select \rightarrow Element \rightarrow Se-selenium אותו על גבי המולקולה על ידי שינוי נפח קשרי הוואן-דר-style \rightarrow Atoms \rightarrow 100% van der Waals אולס: Style \rightarrow Atoms \rightarrow Atoms \rightarrow Red לאדום: Color \rightarrow Atoms \rightarrow Red



לוח הבקרה

ניתן לבחור ולהציג גם חומצה אמינית יחידה. לצורך כך נשתמש בלוח הבקרה. הגישה ללוח הבקרה היא דרך (לבחור ולהציג גם חומצה אמינית יחידה. לצורך כך נשתמש בלוח הבקרה. הגישה ללוח הבקרה היא דרך Output Console בתפריט לאחר לחיצה על מקש ימני בעכבר. לדוגמה, Select 39 מתפריט לאחר החומצה האמינית טירוזין 39, נקיש בלוח הבקרה Select 39. נגדיל את נפח קשרי הוואן-דר-ואלס: Color \rightarrow Atoms \rightarrow Cyan der Waals.



לסביבת העבודה Jmol יש עוד פונקציות רבות שלא פירטנו. אתם מוזמנים להתנסות ולתרגל את השימוש בה, ואנו מקווים שגם תיהנו. בהצלחה!