الأداة Jmol

Jmol - أداة تُستعمل لعرض نماذج مبنويّة ثُلاثية الأبعاد للجُزيئات.

Jmol- هو برنامج يعتمد على لغة JAVA يهدف لعرض نماذج مبنويّة ثُلاثية الأبعاد للجُزيئات مثل: بروتينات، أحماض نوويّة، بلورات، مُرَكّبات كيميائيّة أو كل جُزيئة لها ملف مبنى (קובץ מבני). بإمكان البرنامج فتح عدَّة أنواع من ملفات المبنى، أكثرها الأنواع انتشارًا هو بنك معلومات البروتينات (בנק נתוני החלבונים-Protein Data Bank-PDB).

بواسطة الأداة Jmol يُمكن عرض الجُزيئات بطُرق عرض مُتعدِّدة، بحيث توضِّح كل طريقة عرض منها جانِبًا آخرًا (היבט) في المبنى. هكذا مثلًا يُمكن عرض نموذج للهيكل البنيتيدي (השלד הפפטידי)، نموذج للمباني الثانويّة، نموذج للذرَّات والروابط بينها، نموذج لحجم روابط فاندر فالس وغيرها. يُمكِّن البرنامج أيضًا من عرض الذرَّات والروابط الكيميائيّة بينها بطُرق مُختلفة كتغيير اللون، تغيير الحجم وغيرها. يُمكن بواسطة الأداة اختيار جُزء مُعيّن من الجُزيئة مثل حامض أميني من نوع مُعيّن (مثَلًا الأحماض الهيدروفوبيّة، الأحماض الأمينيّة سالبة الشحنة وغيرها)؛ موضع مُعيّن (الحامض الأميني بالموضع 30 أو تلك الموجودة في المواضع 52-41 وهكذا)؛ ذرّات من نوع مُعيّن (مثل ذرّات كربون، أكسجين وغيرها)؛ جُزيئات الماء؛ جُزيئات لَجين (جزيء يلتحم بجزيء آخر ליגנד-ligand) وغيرها. ويُمكننا تنفيذ عمل معيّن فقط على الجُزء الذي اخترناه مثل: إخفائه، تغيير لونه، تصميم طريقة عرضه، تحديد حجمه وغيرها. بالإمكان تحريك الجُزيئة، تدويرها، تقريبها وإبعادها بشكل يُمكِّن من النظر إلى جميع أجزائها والتعرُّف بعُمق على الجُزء الذي نبحثه فيها.

سيتمّ عرض تعليمات تثبيت (התקנה) البرنامج في الحاسوب البيتي في نهاية الجولة الإرشاديّة

رابط للصفحة الرئيسيّة لموقع Jmol: http://jmol.sourceforge.net

رابط لصفحة التواصل لبرنامج Jmol في WiKi: http://wiki.jmol.org/index.php/Main_Page

أهلًا بكم في الجولة الإرشادية لبيئة العمل Jmol، Jmol هي بيئة عمل محوسبة تعرض نماذج مباني للجُزيئات. سنتركَّز في هذا الإرشاد في نماذج مبنى البروتينات، لكن بإمكان برنامج Jmol عرض مبنى أحماض أمينيّة، مُركبات عُضويّة أو كل جُزيئة لديها ملف مبنى.

تثبيت**(התקנה) البرنامج Jmol على الحاسوب البيتي**

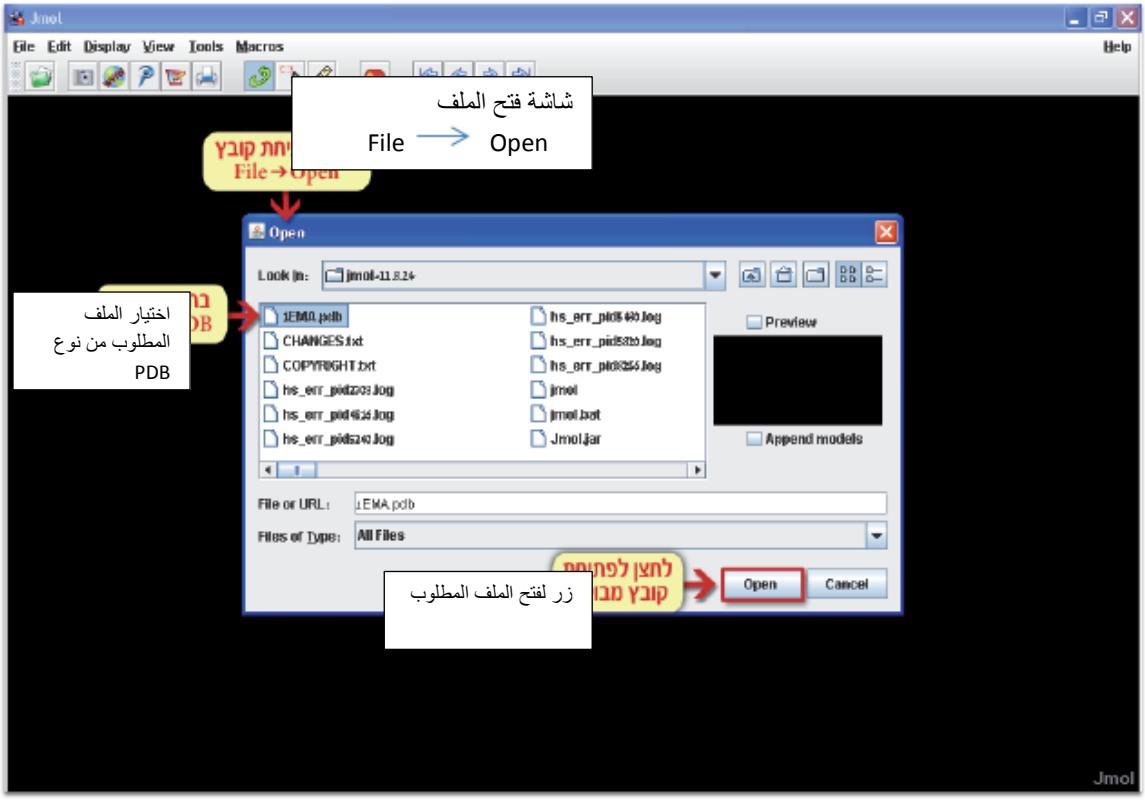
إذا كُنتم في الصف فعلى الأرجح أنه تمّ تثبيت برنامج Jmolعلى حاسوبكم، بإمكانكم العثور عليه في مكتبة Jmol الموجودة على سطح المكتب (שולחן העבודה). إذا كان الأمر كذلك إضغطوا على الملف Jmol.bat ذا إشارة العجلة المُسنَّنة، وستفتح أمامكم بيئة العمل، إذا كُنتم تعملون في البيت عليكم أولًا اتباع تعليمات تثبيت البرنامج Jmol على الحاسوب البيتي.

مسطرة الأدوات (סרגל כלים)

هذه هي مسطرة أدوات Jmol. انتبهوا أنه بالإمكان أنْ نُمرِّر الفأرة فوق مسطرة الأدوات، عندها سيظهر تحت كل زر وصف قصير له.

تحميل ملف مبنى(הטענה קובץ)

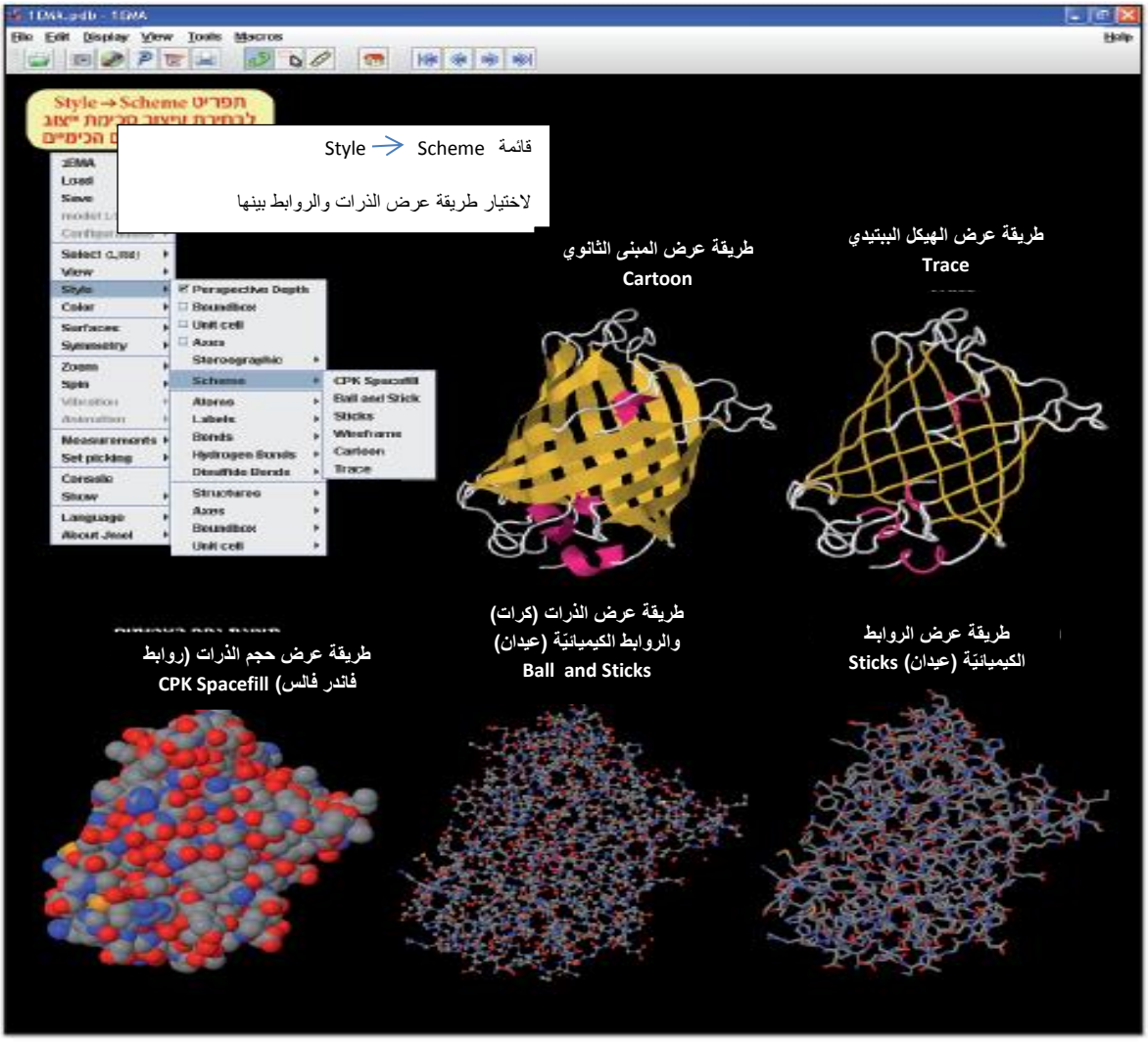
يستقبل Jmol كإدخال (קלט) ملفات مبنى جُزيئات. ملفات مبنى البروتينات هي من نوع PDB ولذلك تنتهي هذه الملفات بالأحرف (PDB). يُمكن أنْ نجد ملفات من هذا النوع في مخزن المعلومات RCSB-PDB. سنتمعّن خلال الجولة الإرشاديّة بملف مبنى بروتين Green Fluorescence Protein أو باختصار: GFP.



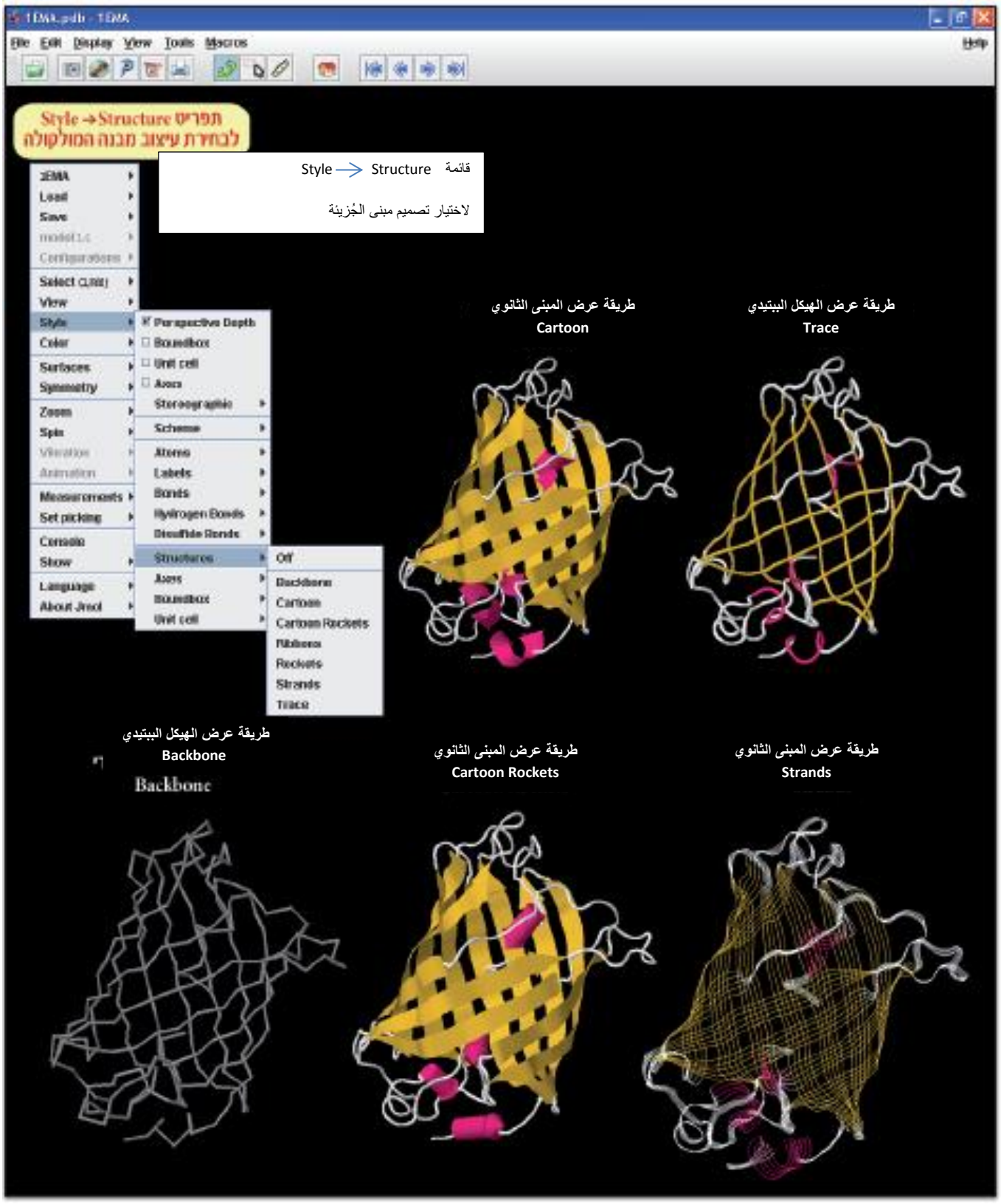
طُرق عرض مُختلفة لمبنى البروتين

يتحدَّد شكل البروتين بحسب مبناه الفراغي. بإمكاننا أنْ نتعلَّم الكثير عن وظائف البروتين من خلال التمعُّن في المبنى الفراغي له. يُمكن عرض مبنى البروتين بطُرق عرض مُختلفة بحيث تقوم كل طريقة عرض بتجسيد صفة مُعيّنة في مبنى البروتين والتشديد عليها. الخيار التلقائي (ברירת המחדל) لبرنامج Jmol هو عرض مبنى البروتين على شكل عيدان وكرات: "Balls and Sticks". تُعرض كل ذرة على شكل كرة وكل رابط كيميائي كعود (خط). الكرة الحمراء هي أكسجين، الكرة الزرقاء هي نيتروجين والكرة الرماديّة هي كربون. طريقة التلوين هذه هي طريقة مُتفق عليها وتُسمّى CPK بحسب مُبتكريها.

من خلال القائمة (תפריט) Scheme←Style يُمكن أنْ نختار طُرق عرض أخرى للبروتين: Sticks تعرض الذرات والروابط كعيدان. أيضًا في هذه الطريقة للعرض كما في طريقة العرض السابقة يتمّ عرض كل الذرات في المبنى. طريقة عرض Cartoon تقوم بعرض المبنى الثانوي للبروتين. لولب ألفا بالورديّ، مُسطَّح صفائح بيتا بالأصفر، تلوين المبنى بهذه الطريقة تُسمّى Secondary Structure، حيث نُلاحظ أنَّ كل نوع من المباني الثانوية مُلوّن بلون مُختلف. يجب أنْ ننتبه أنَّه لا يُمكننا بهذه الطريقة للعرض أنْ نُميّز الأحماض الأمينيّة المنفردة وبالتأكيد لن نُميّز الذرات المُنفردة أيضًا. طريقة العرض Trace تعرض البروتين كخيط طويل، وطريقة العرض CPK Spacefill تعرض البروتين كأنَّه مُكوّن من كرات صغيرة. تعرض كل كُرة حجم الذرة ويتحدَّد حجم الذرات بحسب روابط فاندر فالس. الألوان في هذه الطريقة أيضًا بحسب موديل CPK.



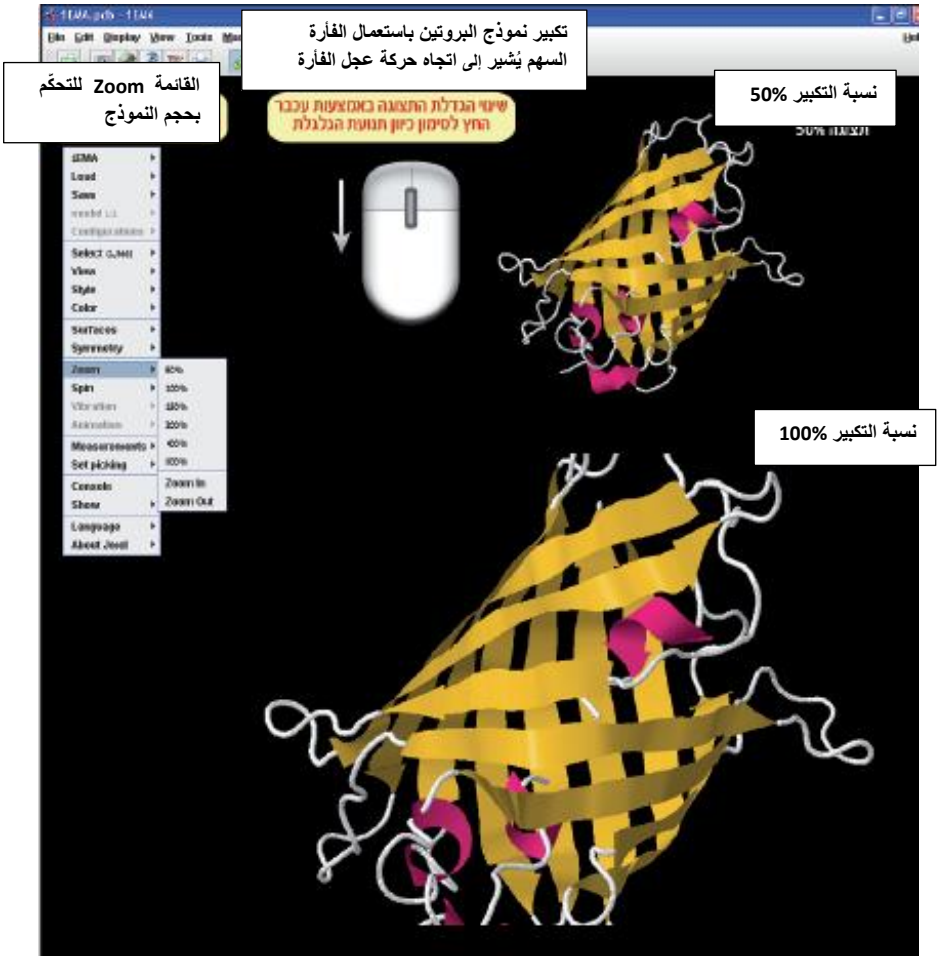
يُمكن أنْ نختار طُرق عرض إضافيّة لمبنى البروتين بواسطة القائمة Scheme←Style. مثلًا طريقة Backbone تعرض مبنى السلسلة الببتيديّة للبروتين بدون المجموعات الجانبية للأحماض الأمينيّة. طريقة العرض Backbone Rockets تعرض لوالب ألفا على شكل صاروخ (טיל).

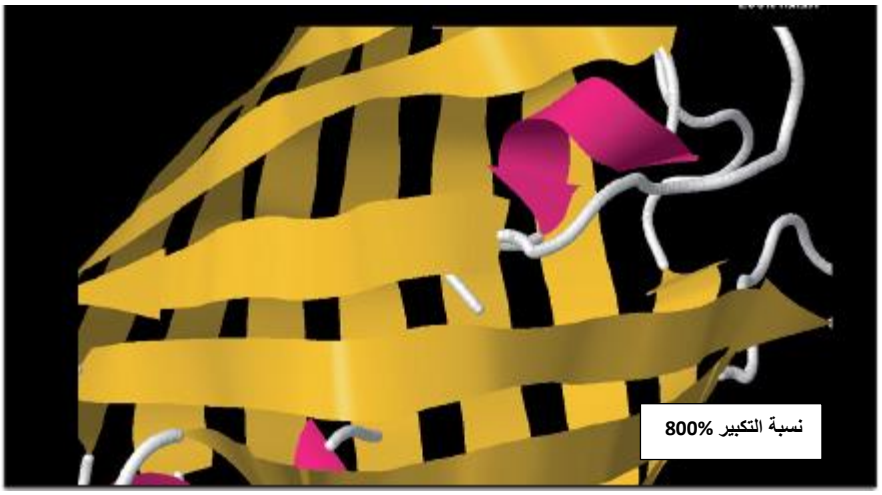


كما رأينا حتى الآن، لنفس البروتين يوجد عدَّة طُرق عرض، وكل واحدة منها تُجسِّد صفة أخرى في المبنى.

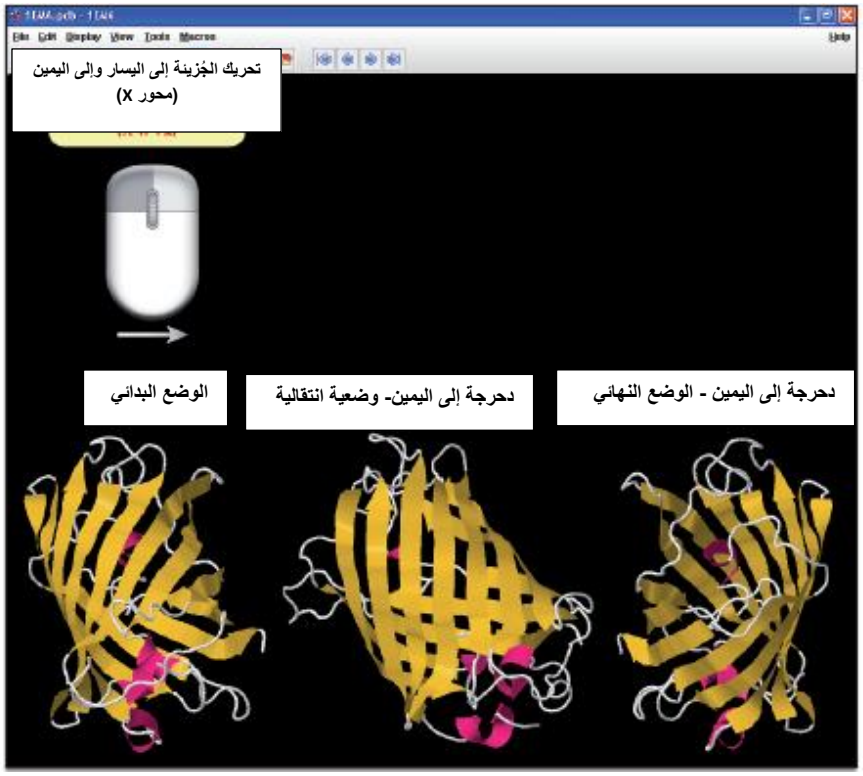
تحريك البروتين

نرغب في كثير من الأحيان بتحريك البروتين من أجل النظر إليه من زوايا مُختلفة أو لمُشاهدة مناطق مُعيّنة فيه، لأجل التحكُّم بدرجة تكبير البروتين أو تصغيره. لهذا الهدف نقوم في بيئة العمل بالضغط على الجهة اليُسرى للفأرة، وندحرج العجل الأوسط للفأرة إلى الأعلى وإلى الأسفل، تقوم هذه العمليّة بتقريب وإبعاد البروتين. بالإمكان عمل ذلك أيضًا بمُساعدة القائمة من خلال الضغط على الجهة اليُمنى للفأرة حيث تُفتح قائمة الإمكانيّات الإضافيّة. نختار من القائمة Zoom ← 800%. تمَّ تكبير البروتين 800%، في هذه الحالة نرى الذرات جيّدًا. نُعيد البروتين إلى عرض بنسبة 100%.

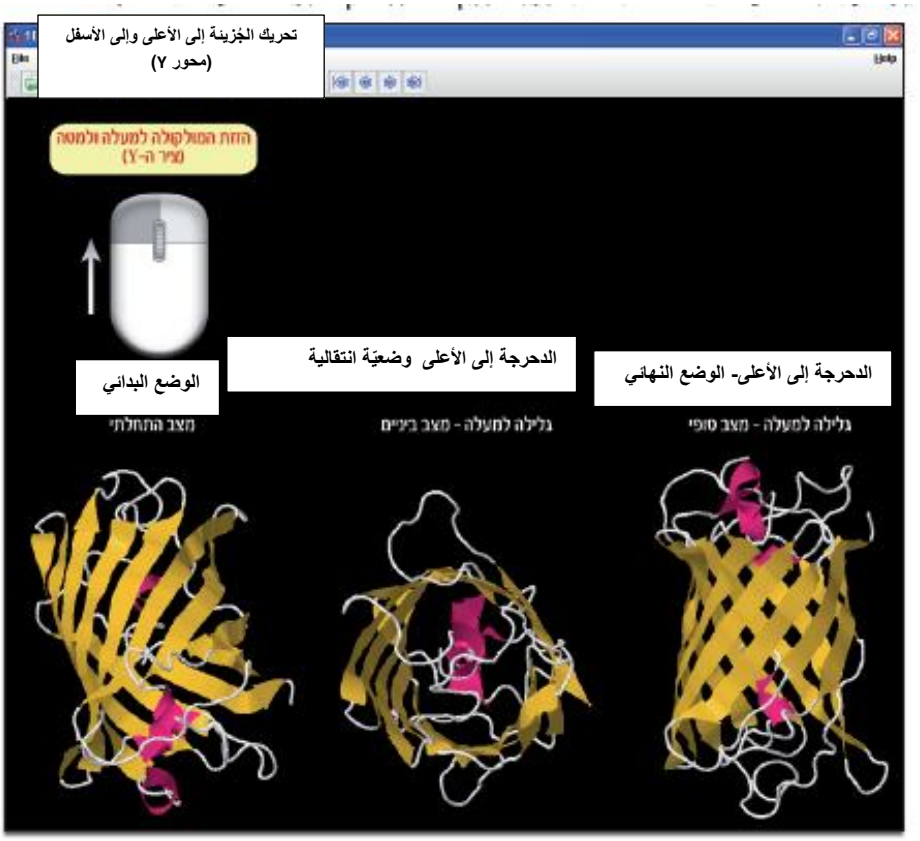




أثناء الضغط على الجهة اليُسرى للفأرة نُحرِّك الفأرة يمينًا ويسارًا- يدور البروتين إلى اليمين وإلى اليسار.



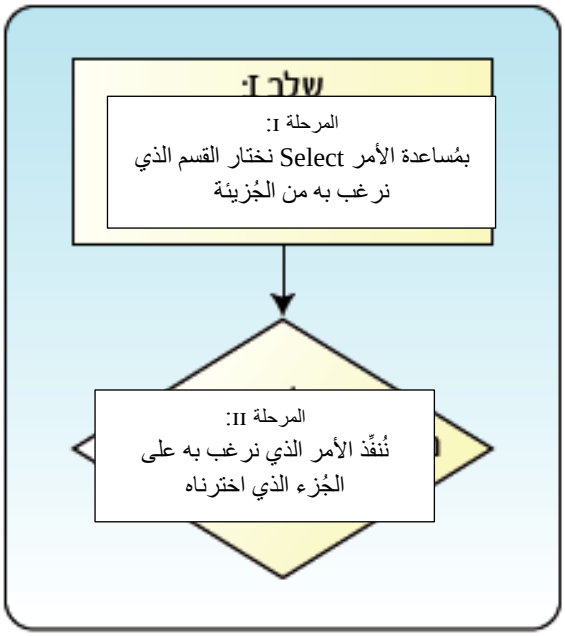
الآن نُحرِّك الفأرة إلى الأعلى وإلى الأسفل أثناء الضغط على الجهة اليُسرى منها- يدور البروتين إلى الأعلى وإلى الأسفل



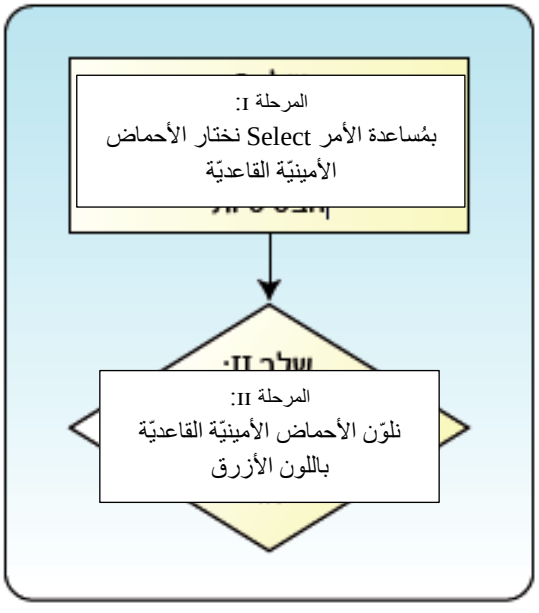
بالإمكان تدوير البروتين بشكل ثابت بواسطة الأمر Spin ← On. الأمر Spin ← Off يوقف عمليّة التدوير.

الأمر Select

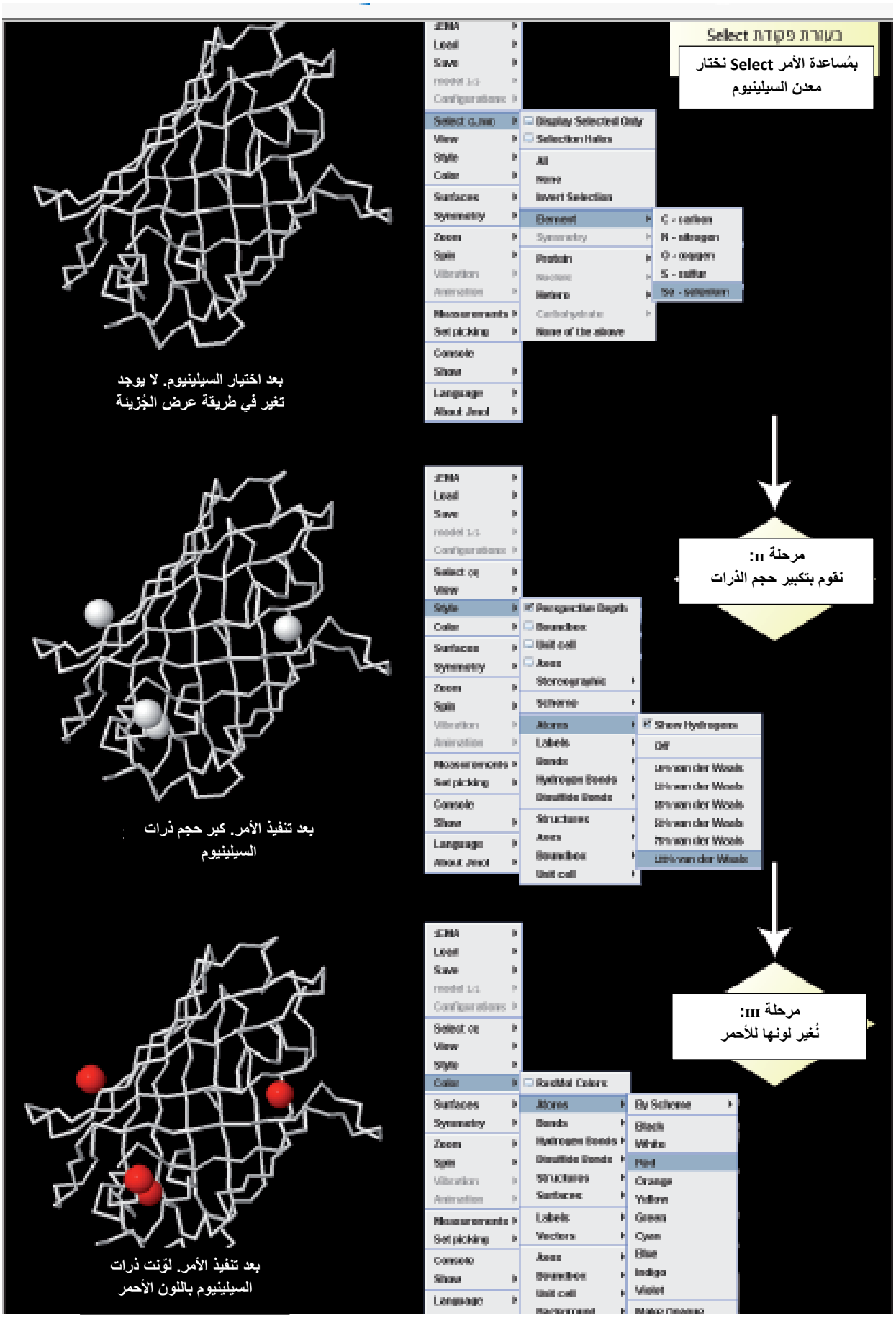
يعتمد مبدأ عمل الأداة Jmol على مرحلتين – في البداية نختار قِسْمًا من الجُزيئة، ثمَّ نقوم بتنفيذ عمليّة مُعيّنة على هذا القسم.
يُمكِّن الأمر Select من تنفيذ عمل فقط على جُزء من مبنى البروتين. هذا مبدأ عمل أساسي في Jmol: في المرحلة الأولى نختار جُزء من المبنى الذي نرغب بتنفيذ العمليّة عليه بواسطة الأمر Select، وفي المرحلة الثانية يتمّ تنفيذ الأمر.



مثلًا نختار الأحماض الأمينيّة القاعديّة ونلوِّنها باللون الأزرق. هذه العمليّة مكوَّنة من مرحلتين: في المرحلة الأولى نختار الأحماض الأمينيّة القاعديّة فقط بواسطة القائمة Basic Residues ← Protein ← Select.
انتبهوا: في هذه المرحلة لم يتغيّر المبنى بعد. في المرحلة التاليّة نلوِّن هذه الأحماض بالأزرق Blue← Atoms ←Color.

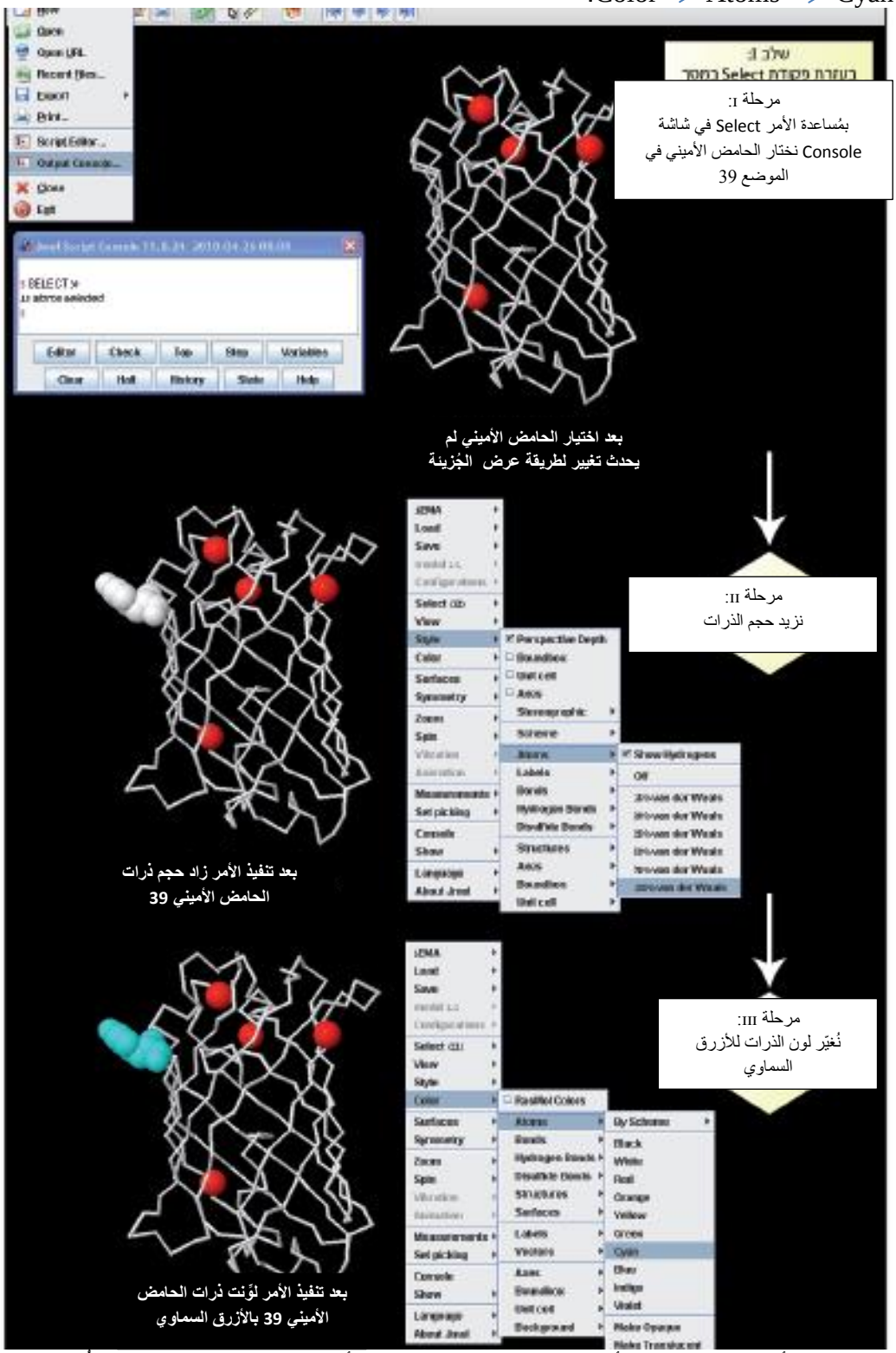


لبروتين GFP يوجد عامل مُرافق هو معدن سيلينيوم (קו-פקטור). هيا نقوم بالإشارة إليه في مبنى البروتين. أولًا نختار أيون المعدن: Se-selenium ← Element ← Select. الآن نُشير إليه في الجُزيئة بواسطة تغيير حجم روابط فاندر فالس:
100% van der Waals ← Atoms ← Style . الآن تمّت الإشارة إلى ذرات السيلينيوم. نغيّر لون الذرات إلى الأحمر:
Red ← Atoms ← Color.


בעזרת פקודת Select
بمُساعدة الأمر Select نختار
معدن السيلينيوم
بعد اختيار السيلينيوم. لا يوجد
تغير في طريقة عرض الجُزيئة
مرحلة II:
نقوم بتكبير حجم الذرات
بعد تنفيذ الأمر. كبر حجم ذرات
السيلينيوم
مرحلة III:
نُغير لونها للأحمر
بعد تنفيذ الأمر. لوّنت ذرات
السيلينيوم باللون الأحمر

لوحة المُراقبة

بإمكاننا اختيار عرض حامض أميني واحد فقط. لهذا الهدف نستعمل لوحة المُراقبة. يمُكن الوصول إلى لوحة المُراقبة عن طريق Output Console في القائمة File، أو عن طريق Console من القائمة بعد الضغط على الجهة اليُمنى للفأرة. مثلًا، لاختيار الحامض الأميني تايروسين 39، نضغط في لوحة المُراقبة Select 39. نزيد حجم روابط فاندر فالس: Style → Atoms → 100% van der Waals. نُلوِّن الحامض الأميني بالأزرق السماوي: Color → Atoms → Cyan.



لبيئة عمل الأداة Jmol وظائف أخرى كثيرة لم يتمّ ذكرها هنا، أنتم مدعوون لاختبارها والتمرُّن على استعمالها، نتمنّى أنْ تستمتعوا، بالنجاح!