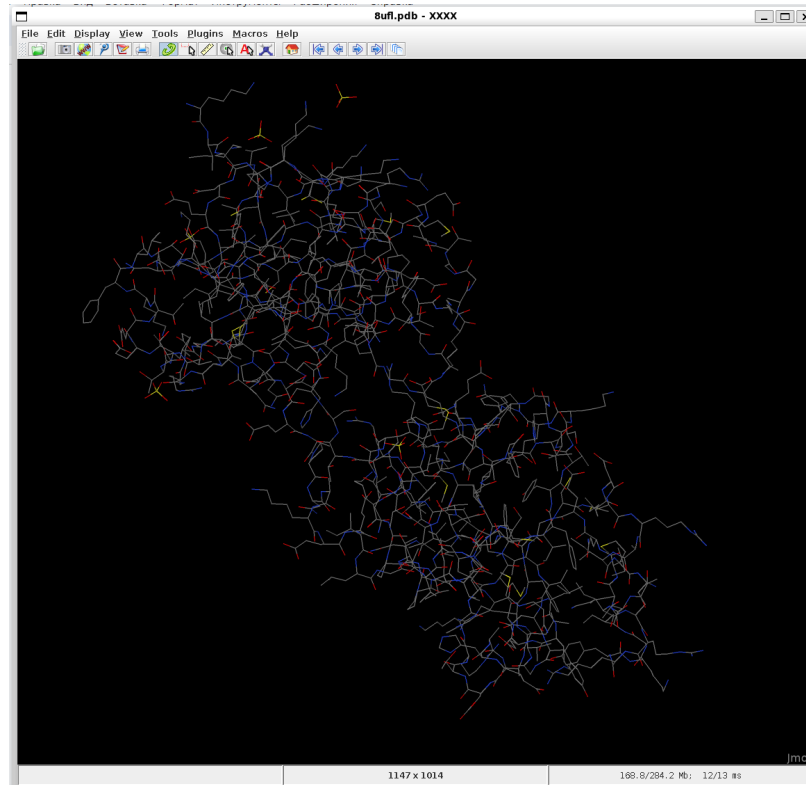


1. ПО - **Jmol**

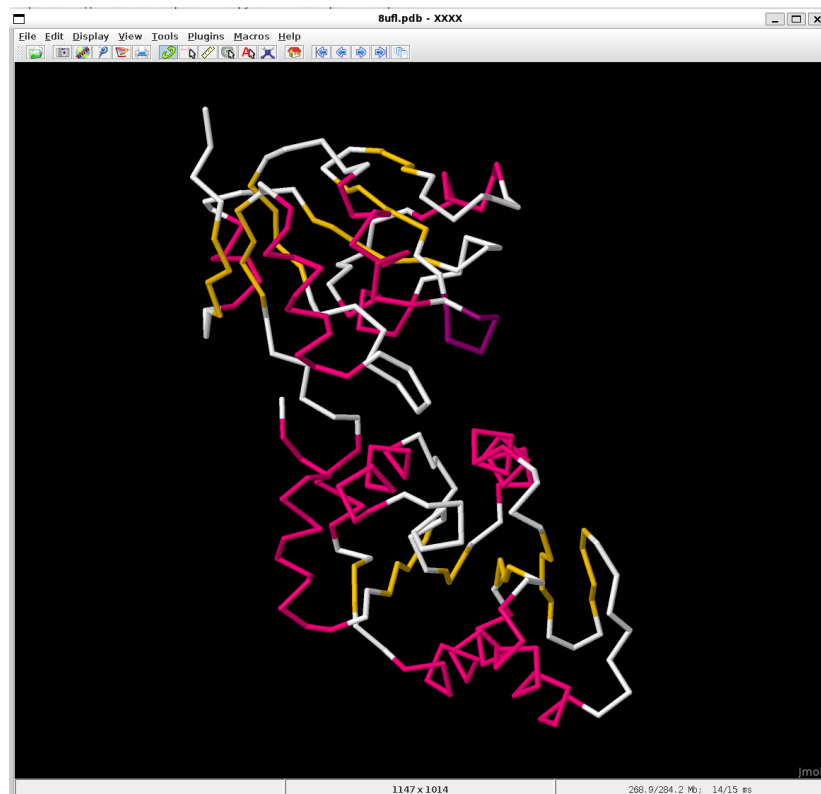
Возьмем структуру белка **8UFL**, которую мы рассматривали на лекции - <https://www.rcsb.org/structure/8UFL>

2. Изображения белка:

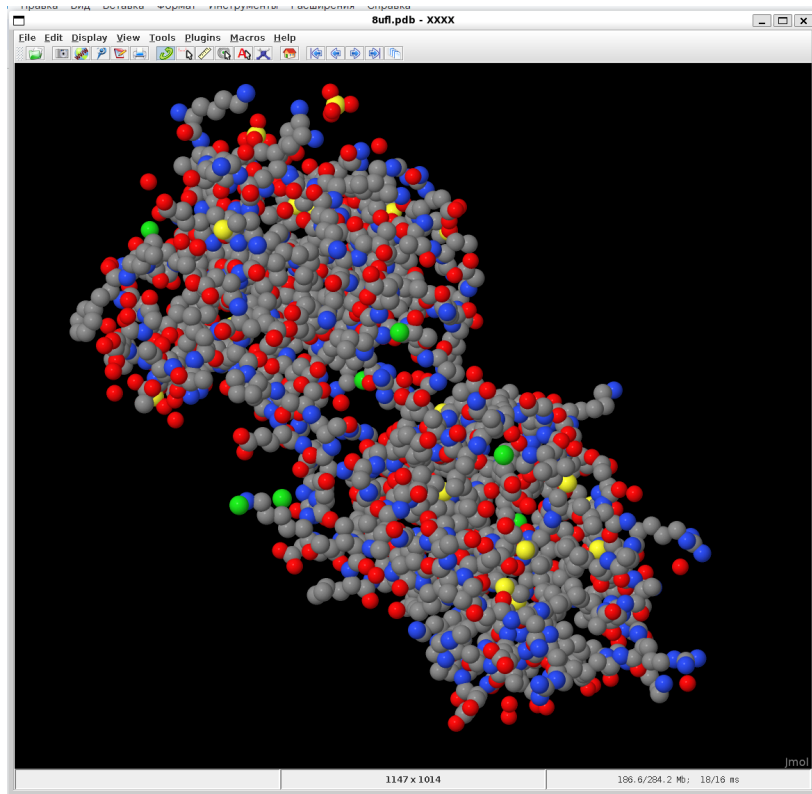
a. wireframe



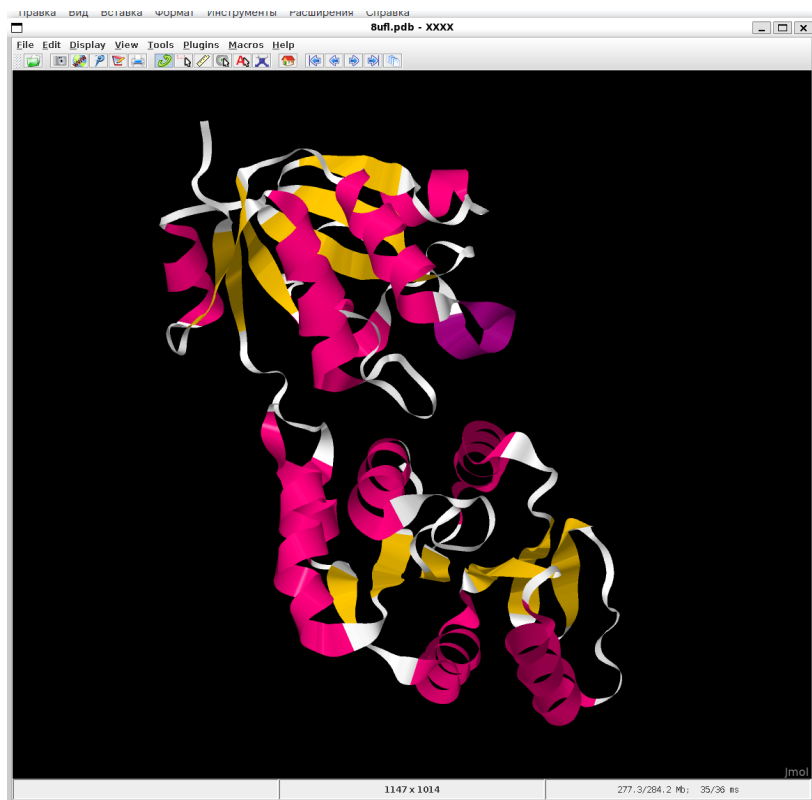
b. backbone



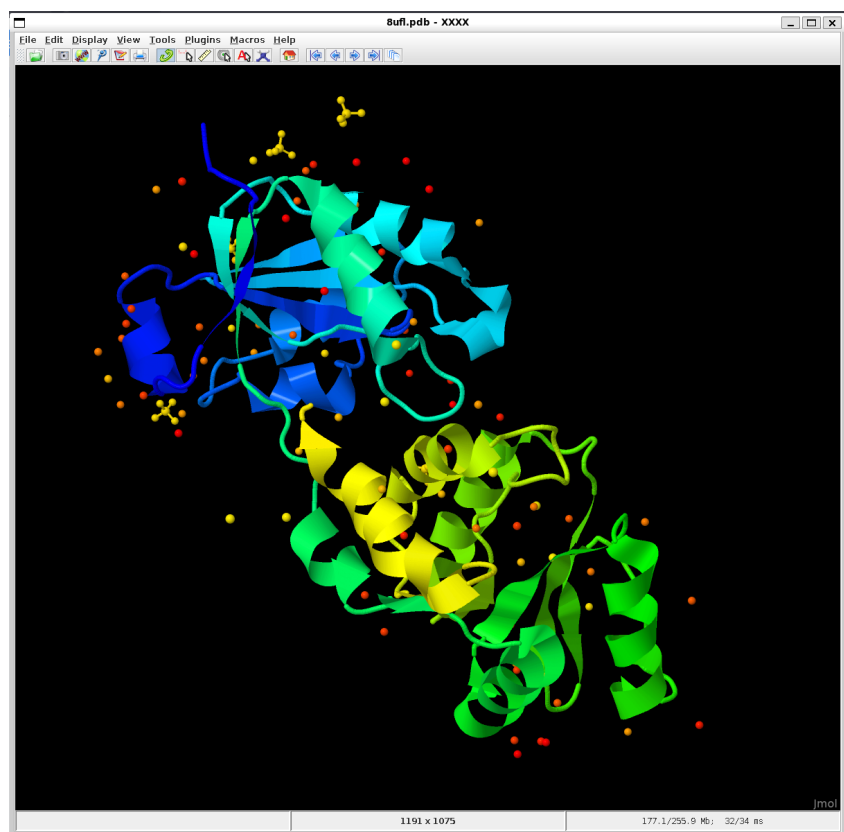
с. cpk/spacefill (размер атомов 50%)



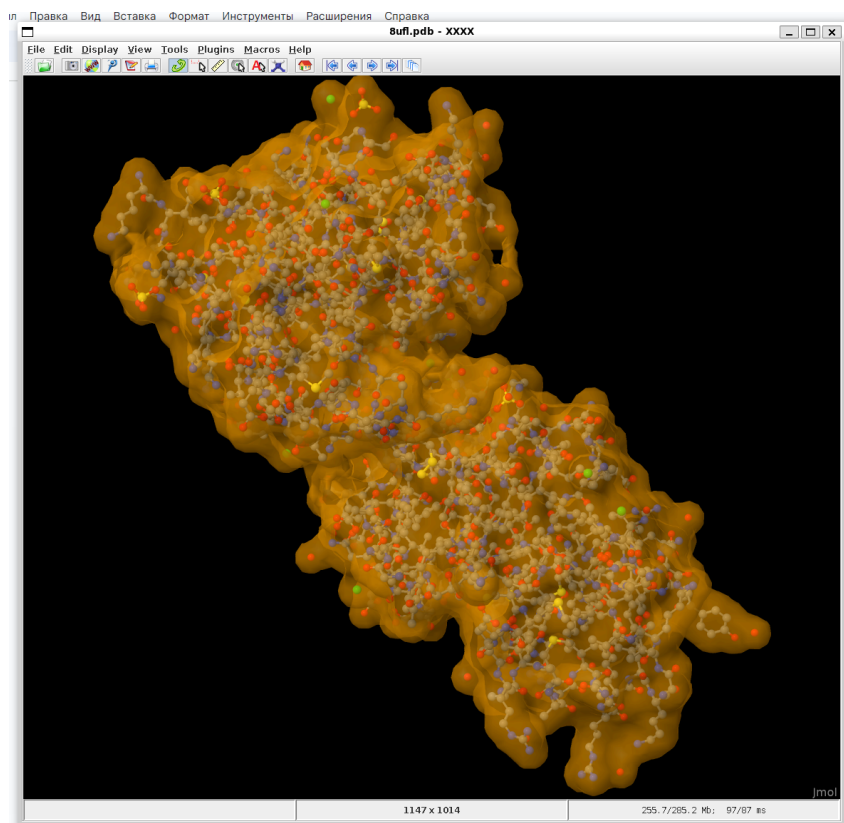
d. ribbons



различные цвета по доменам белка (белок перевернут)



e. molecular surface



3. Описание способа получения визуализации - программа **Jmol** запущена из под **WSL** скриптом **./jmol.sh**, файл **.pdb** загружен через меню **File -> Open**. Далее все настройки визуализации через **ПКМ** по белку.

Более того, изначально была идея запустить **Jmol напрямую из java**, так как библиотека доступна в виде зависимости, выглядело бы примерно так:

```
public class Main {  
    public static void main(String[] args) {  
        JmolViewer viewer = JmolViewer.allocateViewer(null);  
  
        String pdbFile = "path/to/your/protein.pdb";  
        viewer.openFile(pdbFile);  
  
        JmolAdapter jmolAdapter = viewer.getModelAdapter();  
        javax.swing.JFrame frame = org.jmol.viewer.Viewer.createDisplay(viewer, null, jmolAd  
        frame.setSize( width: 800, height: 600);  
        frame.setVisible(true);  
    }  
}
```

Однако **Jmol - все же программа, а не фреймворк**, поэтому запуск таким образом не тривиален.

4. Красивое изображение белка публикационного качества по моему мнению -

