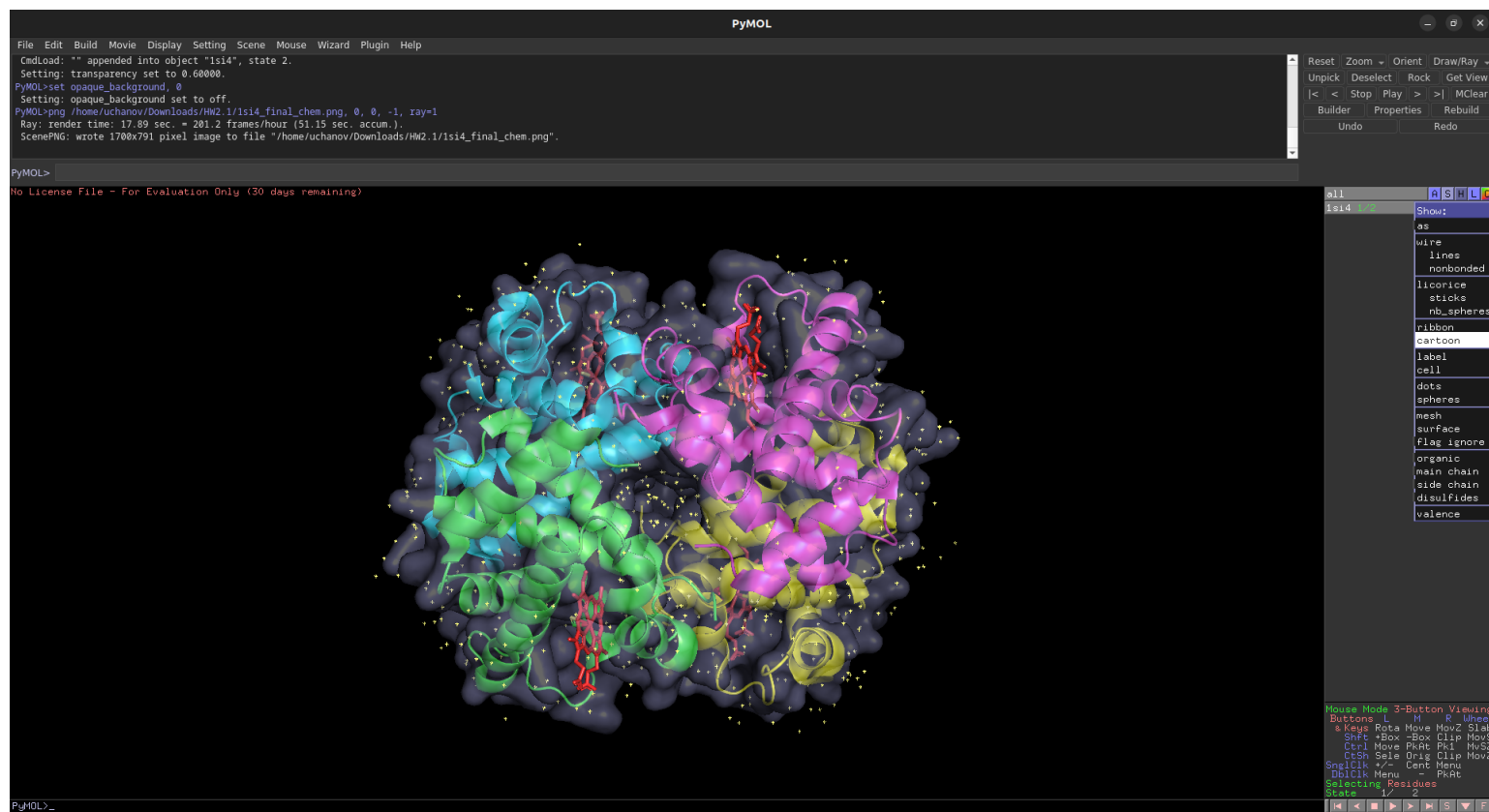


Биоинформатика. Домашнее задание 4.

Коломникова Дарья

Программное обеспечение PyMOL - программа для визуализации структуры белков, позволяющая интегрировать разные типы отображения и окраски структур.

Основной интерфейс находится справа, где располагается список всех открытых молекул (в данном случае - **1si4** - [гемоглобин человека](#))



Каждая открытая молекула содержит пункты **Action** (открыть/закрыть/удалить и т.д.), **Show**, **Hide**, **Label**, **Color**.

Изначально, при загрузке файла, там уже содержатся все возможные варианты отображения (lines, ribbon, cartoon, surface и другие). В зависимости от желаемого результата мы с помощью пунктов Show и Hide просто скрываем все “ненужные” нам составляющие и показываем нужные. На данном примере показаны “cartoon” и “surface”.

Параметры расцветки регулируются меню Color и предоставляет разные варианты автоматического маппинга цветов по доменам, по вторичным структурам, по химическим элементам. Здесь структура белка в виде “cartoon” раскрашена по доменам (гемоглобин имеет 4 домена), а “surface” полупрозрачная голубого цвета. Таким образом мы видим силуэт поверхности белка и его вторичные структуры внутри.

Также есть возможность выделения и расцветки отдельных атомов. К примеру, на этом рисунке помимо самого белка присутствуют также небелковые составляющие - гемы, которых в гемоглобине также 4. На изображении они окрашены в красный. Для этого нужно выделить все 4 гема: для этого выделения появится соответствующий пункт в правом меню, у которого можно отдельно настроить параметры отображения и цвета.