

Построение поверхности, раскраска участка поверхности

Для комплекса димера пуринового репрессора с ДНК (PDB идентификатор 1JH9) в PyMol были созданы изображения, демонстрирующие поверхность контакта мономера белка с симметричным мономером (рис. 1), контакт белка с ДНК (рис. 2) и контакт ДНК с белком (рис. 3).

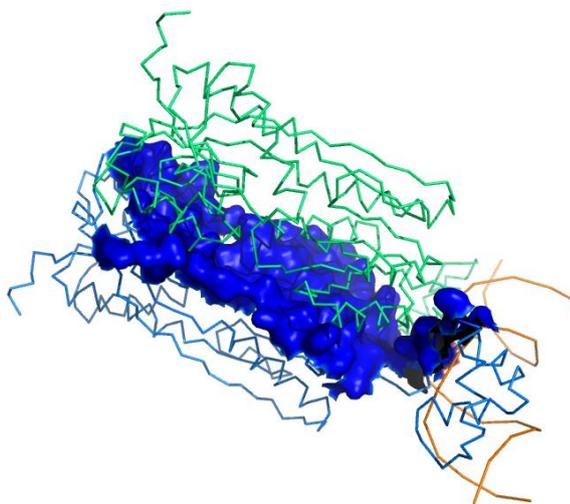


Рисунок 1. Поверхность контакта мономера белка с симметричным мономером на фоне остовой (ribbon) модели мономера.

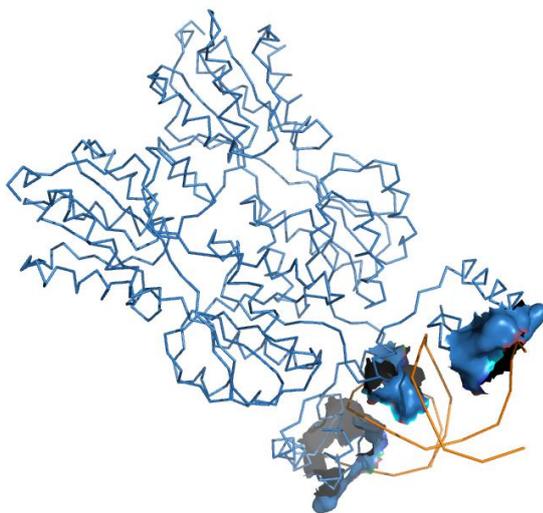


Рисунок 2. Поверхности контакта димера белков с двойной спиралью ДНК на фоне остовой модели части белка, вовлечённой в контакт.

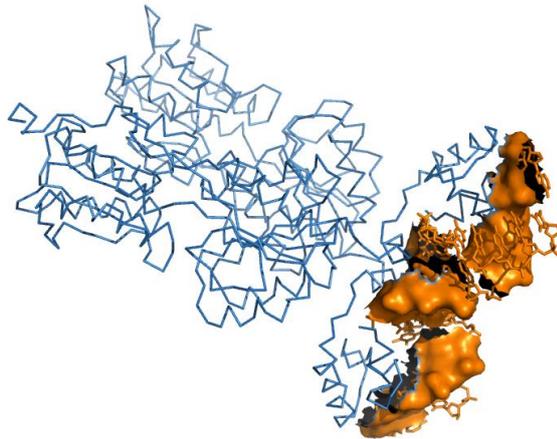


Рисунок 3. Поверхности контакта ДНК с димером белков на фоне проволочной (sticks) модели двойной спирали.

С помощью сервиса [CluD](#) в структуре 1jh9 был произведён поиск гидрофобных кластеров. Пороговое значение 5.0 Å, размер кластера не менее 10 атомов. Пользуясь информацией о координатах атомов гидрофобных кластеров для данной структуры было построено изображение, аналогичное рис. 1, но с выделением атомов, образующих гидрофобные кластеры (рис. 4).

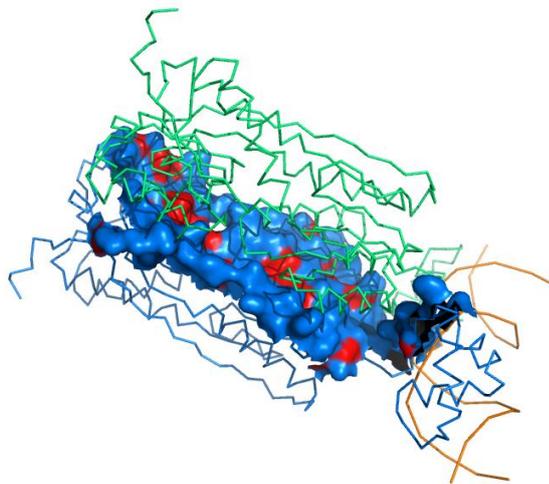


Рисунок 4. Поверхность контакта мономера белка с симметричным мономером на фоне остовной (ribbon) модели мономера. Атомы, образующие гидрофобные кластеры, выделены красным.