

Домашнее задание 5

1. Найдите в PDB структуру какого-нибудь белка из списка:

- Пепсин
- Трипсин
- Миоглобин
- Лизоцим
- Родопсин
- Инсулин
- Ещё какого-нибудь известного вам

В отчёте приведите: детали поиска (какое слово куда писали и что потом выбирали), сколько всего белков с подобным названием нашлось, код (4 символа) выбранной структуры, её краткое описание (желательно с переводом на русский), дату депонирования в PDB, из какого организма белок, ещё что-то, привлёкшее ваше внимание на странице структуры.

Указания. Выясните, как пишется название белка по-английски (хороший способ: найти статью об этом белке в русской Википедии и затем перейти по ссылке на соответствующую английскую статью). Зайдите на сайт PDB <http://www.rcsb.org/>. Внесите название в окошко поиска справа вверху или пройдите по ссылке Advanced search, далее действуйте по смыслу. На странице конкретного комплекса: краткое описание находится сразу под кодом, остальная информация чуть ниже.

2. На странице структуры найдите гиперссылку “3D View: Structure” и пройдите по ней (если такой гиперссылки вдруг нет, смените браузер :). Найдите окошко “Select a different viewer” и выберите JSmol. Создайте два изображения структуры на сером фоне:

- полноатомное с раскраской по химическим элементам;
- остовное с раскраской по цепям

и приложите к отчёту графические файлы с изображениями.

Указания. Щёлкните правой кнопкой мыши по окошку JSmol и выберите Console. Чтобы создать полноатомное изображение, нужно выполнить в консоли следующие команды:

```
cpk only  
color cpk  
background grey
```

Чтобы перейти от полноатомного изображения к остовному с раскраской по цепям, нужно выполнить следующие команды:

```
cpk off  
backbone 0.3 (вместо 0.3 может стоять 0.2 или 0.5, подберите толщину линий по своему вкусу)  
color chain
```

Чтобы сохранить изображение в графический файл, нужно (подобрав подходящий ракурс и величину изображения) щёлкнуть правой кнопкой мыши по окошку JSmol и в открывшемся меню выбрать File → Export.

3. (* — дополнительно) Изучите руководство по Jmol <https://kodomo.fbb.msu.ru/wiki/Main/Jmol> и создайте, пользуясь возможностями Jmol или JSmol (интерфейс у них максимально сближен), какие-нибудь ещё изображения структуры, иллюстрирующие её особенности. *Если будете делать это упражнение, обязательно снабдите картинку понятным описанием того, что именно на них изображено!*