

## ВИЗУАЛИЗАЦИЯ МАКРОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СТРУКТУР

**Рахимова Дилфуза Хасанбаевна**

Ферганский государственный университет, преподаватель  
кафедры зоологии и общей биологии

**Собирова Гулрух Хасан кизи**

Ферганский государственный  
университет, преподаватель кафедры зоологии и общей биологии

**Аннотация.** Структурная биология быстро накапливает огромное количество подробной информации о функциях белков, сайтах связывания, РНК, больших сборках и молекулярных движениях. Эти данные вызывают все больший интерес у более широкого сообщества ученых-биологов, а не только у экспертов в области структур. Визуализация является основным средством доступа к этим данным и их использования, однако визуализация также является камнем преткновения, который не позволяет многим ученым-биологам извлечь выгоду из трехмерных структурных данных. В этом обзоре мы сосредоточимся на ключевых биологических вопросах, в которых визуализация трехмерных структур может дать представление и описать доступные методы и инструменты.

**Abstract.** Structural biology is rapidly accumulating a wealth of detailed information about protein function, binding sites, RNA, large assemblies and molecular motions. These data are increasingly of interest to a broader community of life scientists, not just structural experts. Visualization is a primary means for accessing and using these data, yet visualization is also a stumbling block that prevents many life scientists from benefiting from three-dimensional structural data. In this review, we focus on key biological questions where visualizing three-dimensional structures can provide insight and describe available methods and tools.

**Ключевые слова.** Биология, белков, РНК, методы, инструменты.

**Введение.** Десятилетия назад, когда структурная биология была еще в зачаточном состоянии, структуры были редки, и структурные биологи часто посвящали годы своей жизни изучению только одной структуры в атомных деталях.

**Объект исследования.** Первыми инструментами визуализации макромолекулярных структур были инструменты для специалистов.

**Результаты исследований.** Сегодняшняя ситуация совершенно иная: скорость решения структур значительно возросла: более 60 000 белковых структур высокого разрешения теперь доступны в объединенном Всемирном банке данных о белках (wwPDB) [1]. Эти данные предоставляют массу подробной информации, которая может дать существенное представление о функции макромолекул. Чтобы использовать эту информацию наиболее эффективно, были разработаны инструменты визуализации, которые все чаще становятся повседневными инструментами биологов. Например, многие биохимики регулярно рассматривают структуры белков, чтобы получить представление о функции белков. Химики рассматривают сайты связывания лигандов как часть разработки лекарств. Молекулярные биологи изучают структуры и комплексы РНК с белками, чтобы получить представление об обработке сигналов и сообщений РНК. Некоторые аспекты визуализации структуры остаются в основном прерогативой специалиста, например, молекулярное движение и крупномасштабные молекулярные сборки. Однако даже в этих по сути более сложных областях ресурсы начинают позволять биологам визуализировать и использовать эту информацию.

Однако, хотя структурная информация сейчас просматривается и используется большой и разнообразной группой ученых, большинство из них не готовы тратить месяцы на изучение сложных пользовательских интерфейсов или языков сценариев. Даже сегодня сложные пользовательские интерфейсы в инструментах визуализации часто являются камнем преткновения, не позволяющим многим ученым извлечь выгоду из структурных данных. Даже эксперты-структурщики ожидают простоты использования от инструментов молекулярной графики, а также улучшенной скорости, функций и возможностей.

В прошлом инструменты молекулярной графики всегда были автономными и предназначались для одновременного просмотра одной молекулярной системы. Сегодняшние инструменты все более адаптированы к Интернету, часто тесно интегрированы со структурными базами данных, а также с базами данных, содержащими последовательности и другие функции. Например, домены, однонуклеотидные полиморфизмы (SNP), взаимодействия.

Сегодня мы избалованы выбором, когда дело доходит до инструментов молекулярной графики для просмотра белков и других макромолекулярных структур. Действительно, разнообразие доступных инструментов может быть ошеломляющим. Многие инструменты

молекулярной графики были разработаны для удовлетворения различных требований, как документировано в недавних обзорах и в нескольких веб-ресурсах, поддерживающих списки таких инструментов. Большинство этих инструментов имеют большой набор общих функций, включая стандартные представления и схемы раскраски. [2]

**Заключение.** Всестороннее сравнение всех этих инструментов выходит за рамки данного обзора, вместо этого мы сосредотачиваемся на ключевых биологических вопросах, в которых визуализация структур может дать понимание, и выделяем практические методы и инструменты с выдающимися характеристиками, которые особенно подходят для решения этих вопросов.

### ЛИТЕРАТУРЫ

1. Берман Х., Хенрик К. и Накамура Х. Представляем всемирный банк данных по белкам. *Нат. Структура. Биол.* **10**, 980 (2003).
2. Годдард, Т.Д. и Феррин, Т.Э. Программное обеспечение для визуализации молекулярных сборок. *Курс. Мнение. Структура. Биол.* **17**, 587–595 (2007).
3. Собирова, Гулрух Хасан Кизи, & Рахимова, Дилфуза Хасанбаевна (2024). ФЛАВОНОИДЫ И ИХ АНТИДИАБЕТИЧЕСКИЕ ЭФФЕКТЫ. *Oriental renaissance: Innovative, educational, natural and social sciences*, 4 (4), 196-198.
4. Собирова,, Г. Х. (2023). ФЕНОЛЬНЫЕ АНТИОКСИДАНТЫ В ЛЕКАРСТВЕННЫХ ТРАВАХ. *Oriental renaissance: Innovative, educational, natural and social sciences*, 3 (11), 463-466.
5. Собирова,, Г. Х. (2023). ТИПЫ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ДОБАВОК И ИХ РОЛЬ В СОВРЕМЕННОМ МИРЕ. *Oriental renaissance: Innovative, educational, natural and social sciences*, 3 (11), 467-469.
6. Собирова Г. Effect of a triazole derivative on mitochondrial liver dysfunction in alloxan diabetes. *Science and innovation international scientific journal volume 2 issue 5 may 2023 uif-2022: 8.2 | issn: 2181-3337*