

MOLE:

1. Najděte tunely v 1tqn, zobrazte si vlastnosti prvního tunelu
2. Najde pór v 2bg9 (použijte Pore mode) a prohlédněte si jeho náboj a hydrofobicitu.

PatternQuery:

1. Projděte se příklad vazebných míst testosteronu (TES). Zjistěte, kolik je vazebných míst. Jaké 3 aminokyseliny jsou nejčastěji v okolí testosteronu?

AtomicChargeCalculator 2:

1. Vypočítejte pomocí ACC2, default mód, do následující tabulky náboje na atomech O a H (fenolová skupina):

Tabulka s náboji:

Název molekuly	pKa	Náboj na atomu	
		O	H
3-ethoxyphenol	9,65		
2,4,6-trinitrofenol	0,42		
2,3-dinitrofenol	4,68		
3-hydroxybenzaldehyd	8,98		

Poznámka: 3D struktury k výše uvedeným molekulám si stáhněte z PubChemu.

2. Najděte si v PDBe strukturu jedu mamby zelené, určenou pomocí NMR. Z nalezených vyberte tu, která má abecedně první PDB ID. Vypočítejte pomocí ACC2, default mód, náboje. Přidejte obrázek molekuly a zjistěte, které aminokyseliny na helixu mají nejnižší náboj.

AlphaCharges:

1. Najděte si v AlphaFoldDB identifikátor inzulinu (lidského). Pro něj vypočítejte náboje pro různé pH (2, 5, 7.2) pomocí AlphaCharges. Popište, jak se nábojová distribuce mění s pH.