**ACC2 a aCharges:**

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.

1. 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.
2. Vypočítejte pomocí AlphaCharges náboje pro porin\_1 (použijte první strukturu, kterou pod tímto názvem naleznete v AlphaFoldDB). Nakopírujte si obrázek do tohoto dokumentu a zkuste popsat, které části struktury jsou hydrofobní a které hydrofilní.