1. Připravte v PyMOLu obrázek struktury s PDB-ID **1IZ7.** [**15 b. + 2 b. bonus**]

* Vložte obrázek

2. Měření v programu PyMOL, struktura s PDB-ID **1IZ7.** [**10 b**.]

1. vzdálenost =
2. úhel =
3. dihedrální úhel Ψ =

3. V databázi [PDBsum](http://www.ebi.ac.uk/pdbsum/) prostudujte Ramachandrův diagram pro strukturu s PDB-ID **1IZ7**. [**7 b.**]

- jaká je kvalita této struktury:

4. V databázi [PDBsum](http://www.ebi.ac.uk/pdbsum/) prostudujte interakce mezi **podjednotkami A a C** proteinu s PDB-ID **1EVJ.** [**7 b.**]

1. ANO/NE
2. typ interakce =
3. hodnota evoluční konzervovanosti =

5. Pomocí nástroje [CMA](http://ligin.weizmann.ac.il/cma/) proveďte analýzu kontaktů residua Lys12 ve struktuře s PDB-ID **1IZ7.** [**6 b.**]

* residua v kontaktu:

6. Prostudujte strukturu proteinu s PDB-ID **1IZ7** pomocí nástroje [HotSpot Wizard](http://loschmidt.chemi.muni.cz/hotspotwizard). [**8 b.**]

1. hot-spot pouze v kapse =
2. mutabilita residua K17 =
3. počet tunelů =

7. Připravte obrázek biologicky relevantního oligomeru struktury s PDB-ID **3VAD**. [**10 b.**]

* Vložte obrázek

8. Ověřte správnost kvartérní struktury přítomné ve struktuře s PDB-ID **3w3e.** [**7 b.**]

* ANO/NE

9. Na základě elektronové hustoty ověřte správnost umístění ligandu **BRN** ve struktuře s PDB-ID **1D63**. [**15 b.**]

1. ANO/NE
2. Vložte obrázek

10. Prostudujte dynamiku vybraných regionů v proteinu s PDB-ID **1IZ7**. [**10 b.**]

* regiony seřazené podle jejich dynamiky:

1.

2.

3.

4.

11. Predikujte druggabilitu kapes proteinu s PDB-ID **1IZ7** nástrojem [DoGSiteScorer](http://dogsite.zbh.uni-hamburg.de/index.html) [**5 b.**]

* objem kapsy s nejvyšší druggabilitu =