

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.

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.