**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?

**AtomicChargeCaluclator 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.

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.

**AlphaCharges:**

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