

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.

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.
3. 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.