

## Seminar 9

### Molegro Molecular Viewer (MMV)

Imaginile obtinute la fiecare punct se pun intr-un fisier word (denumit: nume\_practic9.doc)  
Nu uitati sa indicati ce reprezinta fiecare imagine din fisierul word!

- 1) descarcati din baza de date **RCSB Protein Data Bank** (rcsb.org) unul din fisierele (proteina-ligand):  
1AH3, 2ACR, 2HFT, 1STP, 4BH2, 1FRT, 1UBB, 4EAR, 1FUJ, 2C4R, 4UDO, 1GZU, 2I69, 4XM6, 1HVR, 3NH4, 1LHN, 3PTB, 4Z3T, 1QHD, 3UB3, 5DVR, sau orice alta proteina care sa aiba atasat cel putin un ligand.
- 2) - vizualizati ligandul proteinei descarcate (ball and stick).
  - masurati si notati:
    - (i) distanta dintre 2 atomi;
    - (ii) unghiul dintre 2 legaturi adiacente
- 3) vizualizati:
  - (i) aminoacizii aflati la 17 Å de centrul proteinei
  - (ii) ligandul si aminoacizii aflati la 10 Å de centrul ligandului. Daca sunt mai multi liganzi indicati ce ligand ati ales.

*(obs: intai se seteaza centrul spatiului de lucru in centrul proteinei sau al ligandului)*
- 4) folosind **Sequence Viewer** vizualizati aminoacizii din pozitiile 15 si 178. Indicati numele si structura secundara din care fac parte.
- 5) vizualizati structura secundara a proteinei (backbones)
- 6) creati etichete (labels) pentru aminoacizii proteinei (nume si pozitie)
- 7) vizualizati suprafata proteinei din punct de vedere electrostatic (style: line, transparency: 75%)
- 8) folosind **Clipping planes** creati o vizualizare concomitenta a suprafetei proteinei (solid), a unei portiuni a lantului de aminoacizi si a ligandului.
- 9) realizati harta energetica a proteinei, evidentiind in 4 imagini diferite:
  - regiunile steric favorabile,
  - regiunile acceptoare de hidrogen,
  - regiunile donoare de hidrogen,
  - potentialul electrostatic.