

Baltymas: Brain-derived neurotrophic factor BDNF (1BND)

Klasė: Small proteins,
dominuoja metalo ligandai, disulfidintiai tilteliai.
Susilankstymas: Cysteine-knot cytokinesis.
susilankstymas gausus disulfido
Šeima: Neurotrophin
Organizmas: Homo sapiens.
Lygiagrečių beta klosčių skaičius: 0
Antilygiagrečių beta klosčių skaičius: 7

Baltymas: Leptin (1AX8)

Klasė: All alfa proteins
Susilankstymas: 4-helical cytokines
Šeima: Long-chain cytokines
Organizmas: Homo sapiens
Lygiagrečių beta klosčių skaičius: 0
Antilygiagrečių beta klosčių skaičius: 0

Baltymas: Nuclease A inhibitor – NuiA(2o3b)

Klasė: all Alpha and beta proteins (a+b)
Susilankstymas: Nuclease A inhibitor (NuiA)
Šeima: Nuclease A inhibitor (NuiA)
Organizmas: Anabaena sp.
Lygiagrečių beta klosčių skaičius: 0
Antilygiagrečių beta klosčių skaičius: 4

Baltymas: L-2-Haloacid dehalogenase – HAD (1zrn)

Klasė: Alpha and beta proteins (a/b)
Susilankstymas: Had-like
Šeima: HAD-related
Organizmas: Pseudomonas sp.
Lygiagrečių beta klosčių skaičius: 1
Antilygiagrečių beta klosčių skaičius: 0

Baltymų antrinės struktūros analizei naudota programa jmol.

6. Pavaizduokite tik alfa spirales.

```
select helix;hide not selected;  
cartoon on;color structure
```

Pavaizduoja Alfa spirales.

7. Pavaizduokite tik beta lakštus.

```
select sheet  
hide not selected  
cartoon on
```

Pavaizduoja beta lakštus.

8. Išskirkite vieną alfa spiralę, pavaizduokite jos vandenilines jungtis.()

```
print {helix}          Išrašo visas alfa spirales  
print {sheet}          Išrašo visus beta lakštus.
```

Iš jų išrenkame po vieną pvz:

```
a={ "alfa":{({2503:2678})}};
```

alfa spirale nuo 2503 iki 2678

```
select ({167:201 240:278});
```

beta lakštai nuo 167 iki 201 ir 240:278 .

```
display selected; center selected;Calculate hbonds;
```

Išcentruoja pasirinktą alfa spiralę. Apskaičiuoja vandenilinių ryšių kiekį.

Komandų išvada:

Pavaizduoja reikiamą struktūrą bei vandenilines jungtis, naudojantis atomų numeriais.

9. Išryškinkite vandenilines jungtis

```
hbonds 0.1;  
color Hbonds green;
```

10. Pavaizduokite spiralės grandinės karkasą ir vandenilines jungtis.

```
select backbone;
```

11. Suraskite, kiek struktūroje yra lygiagrečių, kiek antilygiagrečių beta lakštų.

```
select sheets; display selected;cartoon only;center selected;
```

Pavaizduoja antilygiagrečias, lygiagrečias beta klostes iš struktūrų .

Iš skirtingų krypčių atpažįstame antilygiagrečias iš vienodų- lygiagrečias klostes.

12. *Pavaizduokite lygiagretaus ir antilygiagretaus beta lakštų vand. jungtis.*

```
select ({141:159 190:210});display selected;  
calculate hbonds;center selected;
```

Pavaizduoju vieno antilygiagretaus beta lakštų vandenilines jungtis (1BND).

```
select ({22:49 892:935}); display selected;  
calculate hbonds;
```

Pavaizduoju vieno lygiagretaus beta lakštų vandenilines jungtis, str (1ZRN).

14. *Pavaizduokite struktūras “wireframe” ir Calfa grandinę.*

```
spacefill 0  
wireframe on
```

Pavaizduoju “wireframe” modeliu

```
wireframe 0  
spacefill on
```

Pavaizduoju kaip Calfa grandinę.

15. *Nuspalvinkite struktūras pagal: grandines, atomų tipą, temperatūrą.*

```
select :A; color yellow
```

Nuspalvinu A grandinę geltonai

```
select :B; color red
```

Nuspalvinu B grandinę raudonai

```
select all; color cpk;
```

Nuspalvinu pagal atomų tipą

```
select all; color Temperature;
```

Nuspalvinu pagal temperatūrą

16. *Nuspalvinkite struktūros paviršių pagal paviršiaus krūvį.*

```
isosurface onec9s colorscheme bwr property charge
```

Nuspalvinu paviršių pagal atominį krūvį.

```
Color formalcharge
```

Nuspalvinu atomus pagal krūvį, molekulė be krūvio balta.

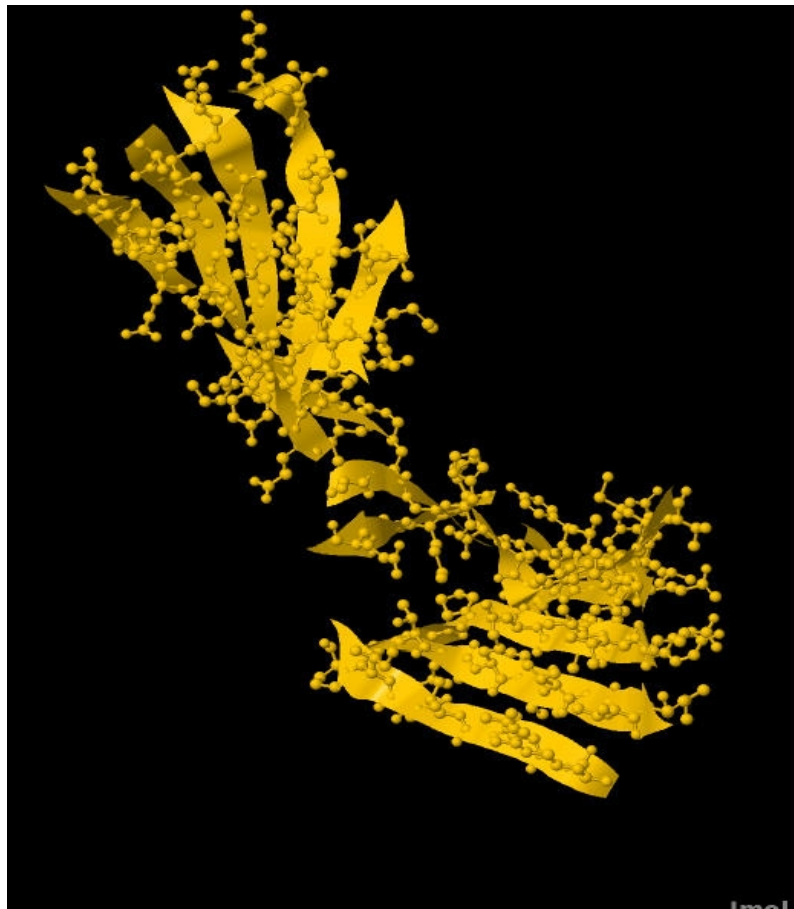
Skriptų rezultatų, baltymų nuotraukos

6. Alfa(1AX8)

7. Beta (1ZRN)



Jmol

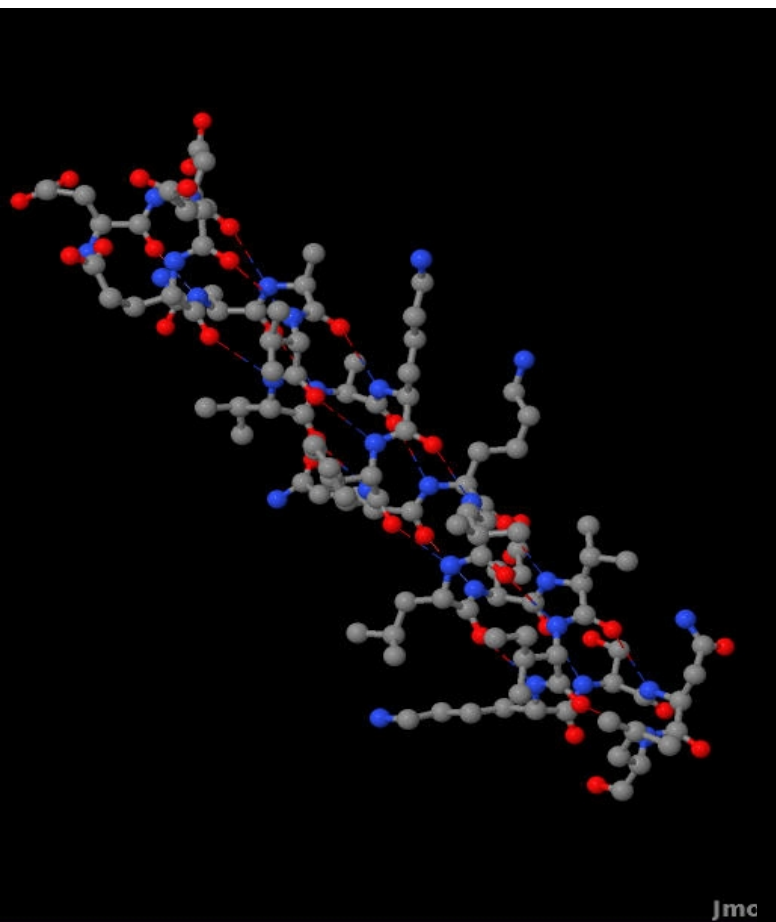


Jmol

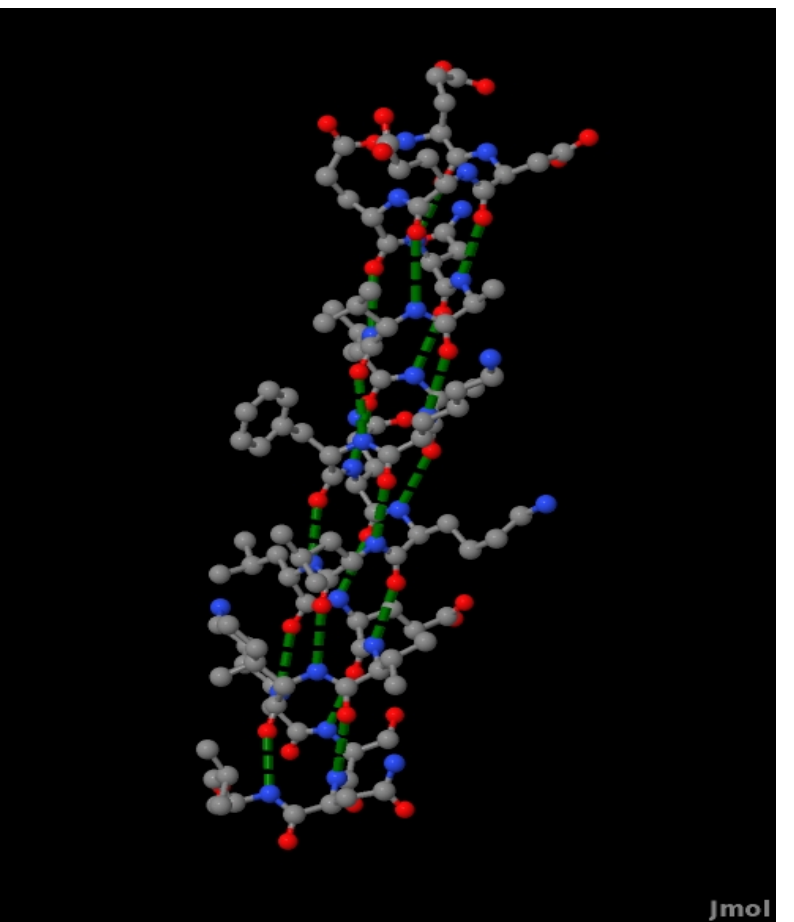
8. Alfa-H

203B

9. Alfa-H color

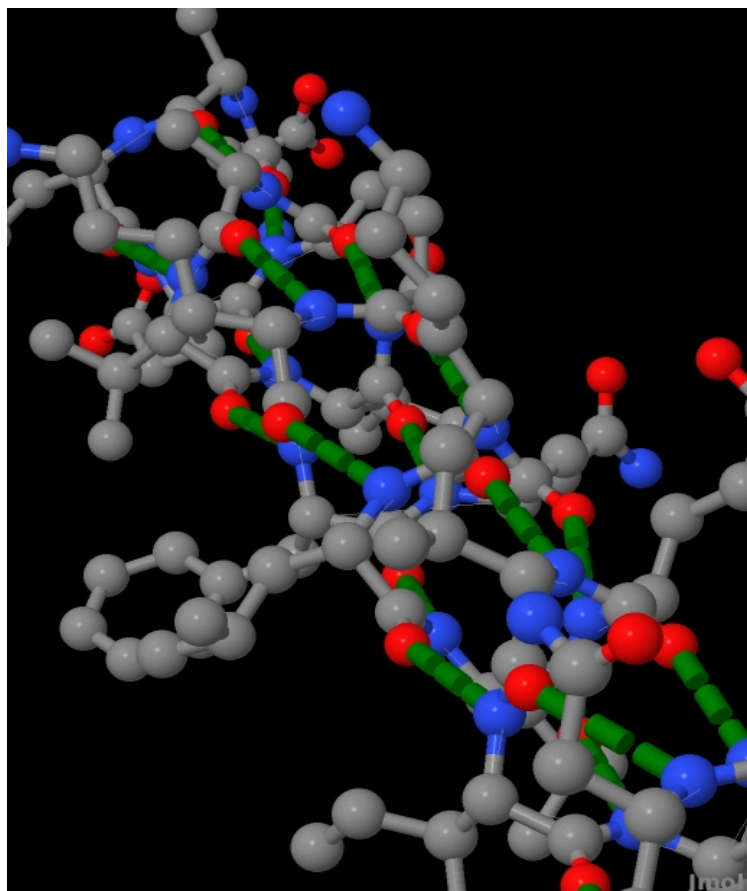


Jmc

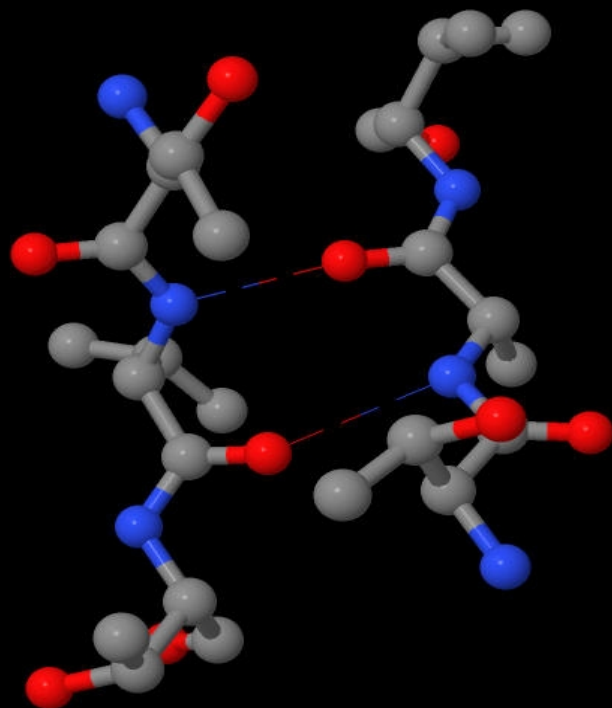


Jmol

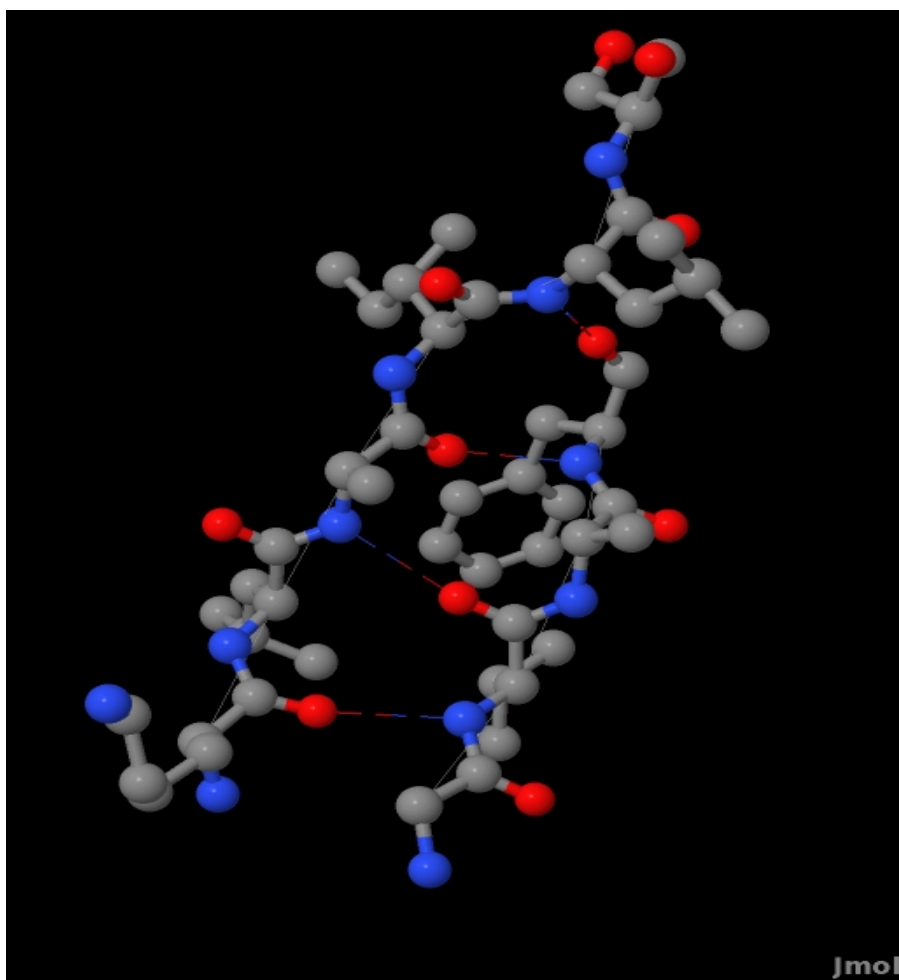
10. Alfa backbone



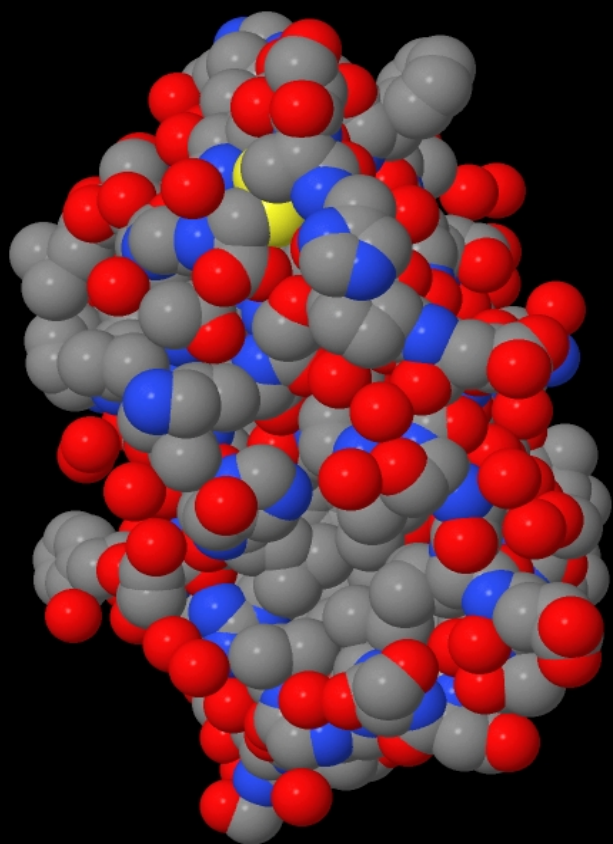
12. anti-H (1BND)



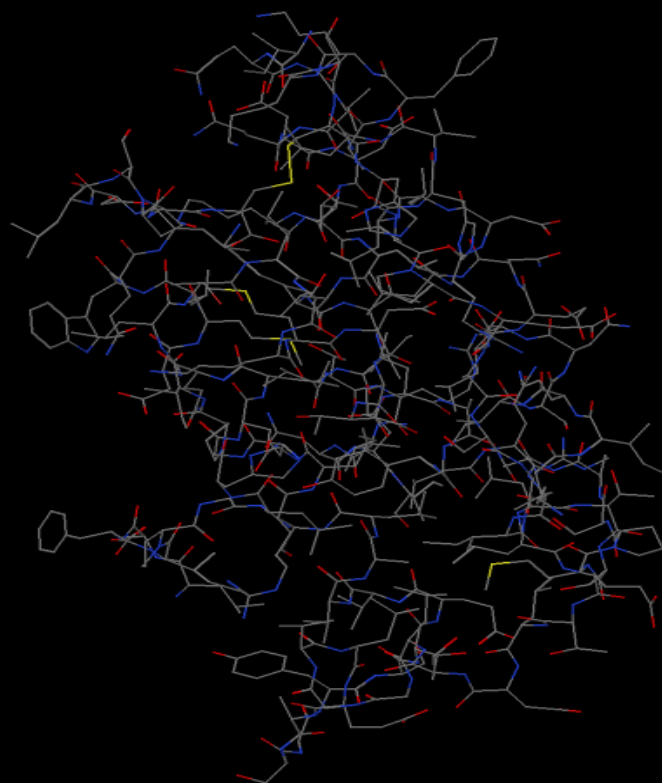
12 Lyg-H (1ZRN)



14. Spacefill Wireframe (1AX8)

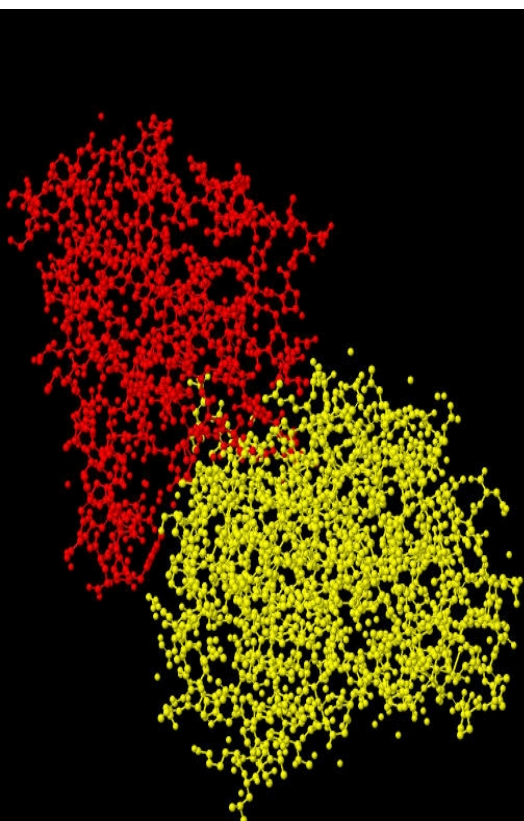


Jmol

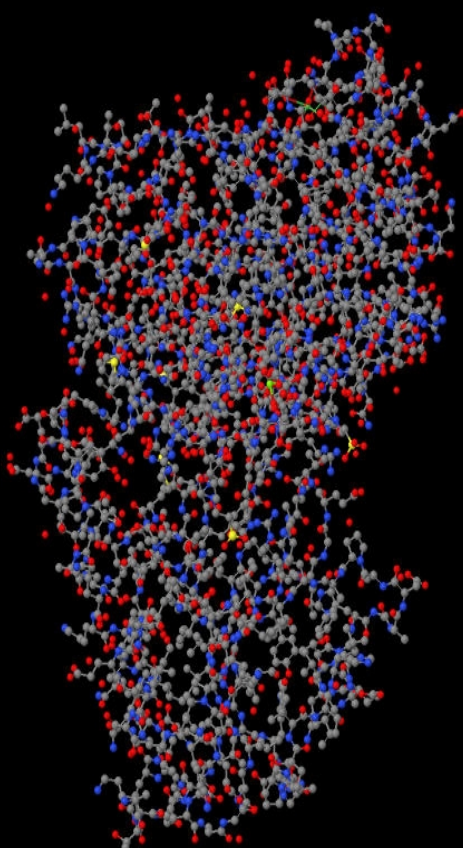


Jmol

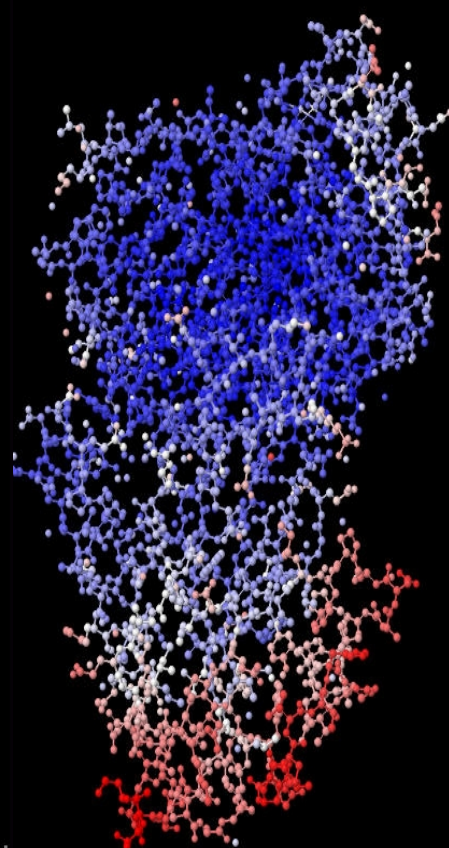
15. Color by Chains, CPK, temperature. (2O3B)



Jmol



Jmol



Jmol

16. Color by charge, surface charge (1BND).

