

PYMOL-EVALUERING

Åbn først den vedhæftede fil "pymol_template.pml" i Visual Studio Code. Denne indeholder et template-script, der henter to strukturer af den bakterielle leucine transporter, LeuT til objekterne LeuT1 og LeuT2. Brug scriptet til at besvare opgaven ved at fylde jeres egne kommandoer ind under hvert spørgsmål som angivet i scriptet. Scriptet opretter i alt 8 scener lagret i F1...F8 svarende til hvert spørgsmål. I hvert spørgsmål bygges der videre på scriptet ovenfor, så I skal ikke "reinitialize" på noget tidspunkt. Når I afleverer scriptet skal hver F-tast vise svaret på det pågældende spørgsmål.

Spørgsmål 1. Vis objektet LeuT1 som "cartoon" med farven "lime" og sæt en orientering, der viser hele strukturen.

Spørgsmål 2. Opret en selektion med de to Na⁺-ioner med residue-numre 751 og 752 og vis de to atomer som "sphere" med farven "violetpurple".

Spørgsmål 3. Fremhæv resterne 112 og 179 med "sticks" og sæt farven sådan at kun carbon er "lime" mens andre atomer har deres respektive atomfarver.

Spørgsmål 4. Angiv den korteste afstand mellem de to rester som et "measure"-objekt.

Spørgsmål 5. Opret en anden selektion med alle atomer indenfor 6 Å af de to Na⁺-ioner. Vis disse som sticks hvor alle atomer ud over carbon farves efter deres respektive atomfarver. Sørg for at intet er selekteret efter scriptet er kørt.

Spørgsmål 6. Vis også strukturen af LeuT2 som "cartoon" og foretag et strukturelt alignment af denne over på LeuT1.

Spørgsmål 7. Skjul LeuT1 og farv backbone efter B-faktor med en gradient fra blå til hvid til rød.

Spørgsmål 8. Vis LeuT2 med en overflade farvet efter "vacuum electrostatics".