

Imię Nazwisko
nr indeksu
wydział

Cel ćwiczenia:...

Wstęp

-krótki opis układu (co to za białko, ile ma aminokwasów, ile ma domen, jaką pełni funkcje itp.) i struktury (z ilu łańcuchów się składa, gdzie ma miejsce wiążące i z czym, jak oddziałuje) oraz przydatnych informacji

Dokowanie I

-do czego służy nam to dokowanie
-parametry dokowania (opis nie rysunek)
-analiza wyników dokowania I (w tej kolejności: ocena parametrów, analiza konformacyjna, analiza energetyczna, analiza oddziaływań)
-wybrane mody do dynamiki molekularnej (podać na jakiej podstawie zostały wybrane)

Modyfikacja ligandu

-uzasadnienie modyfikacji (zamieścić tylko obrazek, bez tabelki)

Dokowanie II

-parametry dokowania
-analiza wyników dokowania II (w tej kolejności: analiza konformacyjna, analiza energetyczna, analiza oddziaływań)
-wybrane mody do dynamiki molekularnej (podać na jakiej podstawie zostały wybrane)

Porównanie dokowania I i II

-porównanie energetyczne
-porównanie oddziaływań

Wnioski (z porównania)

Podsumowanie (z całego ćwiczenia)

UWAGA: RAPORT MA MIEĆ FORMĘ KRÓTKIEJ PRACY NAUKOWEJ - A NIE OPISU ĆWICZENIA.