





BCDS-Seminar 4/4

Heute

-  Kleine organische Moleküle (Marco)
-  PyMOL (Sascha)
-  **VMD** (Marco)
-  Anmeldung für Hausarbeiten (+1,5 CP)

Kleine organische Moleküle



- 3 connected databases: substance (SID), compound (CID), bioassays (AID)
- Small molecule chem. information
- Biol. properties/activities, exp. data
- $> 10^8$ chem. structures, $> 10^3$ bioassay exp.
- Structure similarity search
- Structure-activity relationship analyses
- Structure clustering
- Part of ENTREZ metasearch

Kleine organische Moleküle

Aufgaben

- 1) Klärt die biologische Aktivität von Histamin auf, indem ihr danach zuerst in der CID-Datenbank sucht.
- 2) Zeichnet die Struktur von Histamin in der Chemical Structure Search und sucht nach 90% ähnlichen Strukturen.
- 3) Führt ein Chemical Structure Clustering mit Histamin durch.

Kleine organische Moleküle

ChEMBL  databases

- Drug discovery
- Bioactive molecules with drug-like properties
- Integrated into PubChem
- Search for compounds, targets, drugs
- Specific illness-related data curation
- Druggability search

Kleine organische Moleküle

Aufgaben

1) Ladet die Proteinstruktur von HDAC in die DrugEBility. Gibt es Substanzen, die das Protein inhibieren?

Kleine organische Moleküle



- Text- und Struktursuche
- > 400 verschiedene Datenquellen
- Validierte Synonyme
- Identifier conversion
- Properties prediction

Kleine organische Moleküle

Aufgaben:

1) Sucht nach Resveratrol. Was ist der Siedepunkt, welche spektroskopische Daten sind vorhanden, wer verkauft Resveratrol?

WMD

Theoretical and Computational Biophysics Group

NIH Resource for Macromolecular Modeling and Bioinformatics

University of Illinois at Urbana-Champaign

R. Brunner, E. Caddigan, J. Cohen, A. Dalke, P. Grayson,

J. Gullingsrud, D. Hardy, W. Humphrey, B. Isralewitz, S. Izrailev,

A. Kohlmeyer, D. Norris, J. Saam, J. Stone, J. Ulrich



Features

- Visualisierung großer biomolekularer Systeme
- Analyse von molekulardynamischen Simulationen
- Szenenexport zu externen Rendering-Programmen
- Interpretation von Tcl und Python
- Kommunikation mit anderen Programmen via Tcl/Tk

VMD



licorice



tube



cartoon

Tutorials:

<http://www.ks.uiuc.edu/Training/Tutorials/#vmd>