

1. Download from: <http://jmol.sourceforge.net/>
2. No installation is necessary. Executable file is 'jmol.jar'. Java must be installed (<http://www.java.com/en/>).
3. Jmol manuals:
 - <http://chemapps.stolaf.edu/jmol/docs/> (with some interactive examples)
 - <http://chemapps.stolaf.edu/jmol/>
 - <http://wiki.jmol.org/>
4. Exercises:

I. Betrachten und diskutieren Sie die Struktur des Enzyms "Bovine pancreatic ribonuclease" unter Verwendung von Jmol !

(a) Welche Sekundärstruktur-Elemente treten auf und wie sind diese angeordnet?

- Open structure 1DY5.pdb
- Delete lines after: zap; load "file:///D:/My Documents/.../1DY5.pdb"
- **Select all** (select molecule)
- **Cartoon** (shows secondary structure motifs)
- **Color structure** (colors them differently)
- **Cartoon off**
- **Rocket**
- **Rocket off**
- **Ribbon**

(b) Prüfen Sie für drei C_{α} -Atome aus einem helikalen Bereich und für drei C_{α} -Atome aus einer β -Faltblatt-Bereich, wie dicht die Winkel ϕ und ψ an den für das jeweilige Sekundärstrukturelement typischen Werten liegen!

(c) Um wieviel Å steigt eine ausgewählte α -Helix je Umdrehung an (bitte angeben welche Distanzen Sie vermessen haben und wie die Steigung berechnet wurde)?

- **Select helix** or **Select sheet**
- **Display selected only**
- **Color cpk**
- **Ribbon off**
- **Trace**
- **Display hydrogens off**
- **Color trace translucent 0.9**
- **Hbond calculate**
- **Select selected and backbone**
- **averageHelixPhi = {helix}.phi**
- **show variables**

(d) Welche Bereiche/Aspekte der Struktur werden durch Di-Sulfid-Brücken stabilisiert?

- **Trace off; Ribbon on; Color structure**
- **Select (sulfur)**
- **Select within (5, selected)**