Analysis of the interaction between Ancrod and benzamidine

Using the three-dimensional model, obtained by sequence homology, of the serine protein Ancrod (present in snake venom A. contortrix), we will study the interaction between this protein and benzamidine, its competitive inhibitor:



BENZAMIDINA

1. MACROMOLECOLE: Connect to Pubmed, and download the FASTA sequence of the protein with GI code: 461512 (Snake venom serine protease from A. contortrix).

Launch the PyMol program, and from the "Plugins" menu, select "PyMod 1.0". A new window will appear (a second window will ask you to create a new directory, click on OK):

000		X PyMod 1.0b	
	ł		
			I2
Sequence:			Position:

From the "File" menu of this window, import the previously saved sequence (File-> sequence-> add from file)

Left click the sequence name (which turns green), then select "PSI-Blast" from the "Tools" menu. In the window that appears, click on Submit, and wait for the results.

Among the possible templates to use for modeling, select the pdb 4E7N code, checking the red box next to the relevant code, and press submit:

	SUBMIT				
gi 75766241 gi 38328039 gi 49258367 gi 49258366 gi 49258366 gi 58718816	Γραβίρα] και της τητά είναι της Νάικον Ρείσκαι Κατάντας το Κατάνας έτου Γανίου αλ σεραφικόσια ότοικα διμάτοσο στοιτούτ Βαβιαβίρα] Πραβίρα] Πραγία παι Α. Ογτάιά Στουτίανο οί Αλαντζαμ. Α οβγοσοβιάταί στοικά νατοπολικτικό που πράτετασο παράτετα Βιράβίρα] Γραγία (Διάται Α. Ογτάιά Στουτίανο όι Αλαντζαμ. Α οβγοσοβιάταί στοικά να τοπολογγιατία το πράτετασο π Βιράβίρα] Γραγία (Διάται Α. Ογτάιά Στουτίανο όι Αλαντζαμ. Α οβγοσοβιάταί στοικά να το πράτετασο παράτετασο που Βιράβίρα] Γραγία (Διάται Α. Ογτάιά Στουτίανο όι Αλαντζαμ. Α οβγοσοβιάταί στοικά να το πράτετασο που πράτετασο παράτετασο ποι πράτετασο ποι πράτετασο ποι πράτετασο ποι πράτετασο ποι πράτετασο ποι πράτετα Βιράβίρα] Γραγία (Διάται Α. Ογτάιά Στουτίανο σύμας Αλαγία) Αλαντά το πράτετασο ποι διατία στο πράτετασο ποι πράτετα				
	Description				
BLAST Output for gilds1221gpiProge72.2 Privase Salect the Sequences to Impur					
000	X << BLAST Output >>				

In the window with the PyMod sequences, a red square with the sign "+" will appear. Click on the square. The protein sequence with code 4E7N will appear. Select it (left button on the name, it turns green), then pressing the right button select "Extract sequence". Then select it again and right click on "Get PDB File" Select both sequences, and click on ClustalW from the Tools menu. In the window that appears, click on Submit. Note that the two sequences have been aligned.

Now select only the sequence to be modeled, and click on Modeler from the Tools menu. In the window that appears, select the template by checking the red square. Under "Include HetAtoms, select" NO ". Finally, click on Submit. After a few minutes, the Ancrod model will appear on the main PyMOL window.

○ ○ ○ X << Modeller Options >>							
Here you can modify the options for Modeller							
	📕 4E7N_Chain:A	From: 1 To: 238					
	1	(Default=1)					
	Yes						
	None						
	Mid						
	nign						
	SUBMIT						

Save your model: "File -> Save Molecule" from PyMOL menu.