

TEME ZA II SEMINARSKI RAD IZ PREDMETA PRIMENJENA ORGANSKA HEMIJA

3D VIZUALIZACIJE MOLEKULA PROTEINA KORIŠĆENJEM PROGRAMA ACCELRY'S VISUALIZER

UPUTSTVO NA PRIMERU FAJLA 4DKL:

1. NA VEB-SAJTU PDB-a (PROTEIN DATA BANK), **PRONAĆI I PREUZETI PDB FAJL KOJI JE TEMA SEMINARSKOG RADA.** (PDB FAJLOVI U TEXT FORMATU MOGU SE OTVORITI U BILO KOM EDITORU TEKSTA, JER SADRŽE TEKST I NUMERIČKE PODATKE - KOORDINATE. MEĐUTIM, NJIHOVA KONVERZIJA U 3D MODELE MOGUĆA JE SAMO U SPECIJALIZOVANIM PROGRAMIMA KAO ŠTO SU ACCELRY'S VISUALIZER, CHIMERA I DR).

SLIKE 1-4: IZGLED ODGOVARAJUĆE STRANE VEB-STARNICE PDB-a (PROTEIN DATA BANK) ZA FAJL **4DKL**.

1.

The screenshot shows the PDB website interface for entry 4DKL. The main title is "Crystal structure of the mu-opioid receptor bound to a morphinan antagonist". The DOI is 10.2210/pdb4dkl/pdb. The primary citation is from Nature (2012) 485: 321-326. The abstract describes the structure of the mu-opioid receptor (μ-OR) in complex with an irreversible morphinan antagonist. The structure is a two-fold symmetrical dimer formed by transmembrane segments 5 and 6. The website also provides links to download files, view the 3D structure, and access the primary citation.

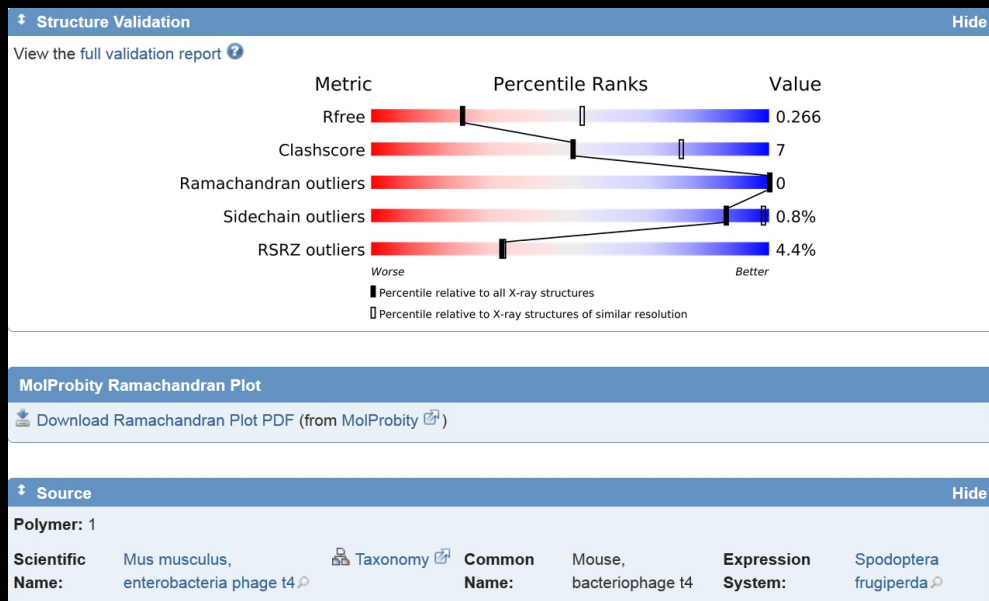
2.

The screenshot shows the molecular description and experimental details for entry 4DKL. The molecular description includes the classification as a signaling protein/antagonist, a structure weight of 55762.12, and a length of 464. The molecule is a mu-type opioid receptor, lysozyme chimera. The polymer is 1, type is protein, and chains are A. The EC number is 3.2.1.17. The fragment is SEE REMARK 999. The mutation is D1020N, C1054T, C1097A. The organism is Mus musculus. The UniProtKB ID is P00720. The experimental details include the method X-RAY DIFFRACTION, resolution of 2.80 Å, R-value of 0.235, and space group C 1 2 1. The molecule of the month is Myoglobin.

NASTAVAK







UPUTSTVO NA PRIMERU FAJLA 4DKL:

3.



4.

Ligand Chemical Component Hide

Identifier	Formula	Name	View Interactions
1PE Search Download	 C ₁₀ H ₂₂ O ₆	PENTAETHYLENE GLYCOL	Ligand Explorer Jmol
BF0 Search Download	 C ₂₅ H ₃₂ N ₂ O ₆	methyl 4-((5beta,6alpha)-17-(cyclopropylmethyl)-3,14-dihydroxy-4,5-epoxymorphinan-6-yl)amino)-4-oxobutanoate	Ligand Explorer Jmol
CL Search Download	 Cl ⁻	CHLORIDE ION	Ligand Explorer Jmol
CLR Search Download	 C ₂₇ H ₄₆ O	CHOLESTEROL	Ligand Explorer Jmol
MPG Search Download	 C ₂₁ H ₄₀ O ₄	1-MONOOLEOYL-RAC-GLYCEROL	Ligand Explorer Jmol
SO4 Search Download	 O ₄ S	SULFATE ION	Ligand Explorer Jmol

External Domain Annotations Hide

- Pfam Classification: 2 Domains - data from Pfam [?](#)
- GO Terms: 14 Terms - data from GO [?](#)

Structural Biology Knowledgebase Data Hide

Information from the Structural Biology Knowledgebase [?](#)

- Models from the Protein Model Portal: 5 models [?](#)
- Related Biological Annotations: >19 annotations [?](#)
- Related Clones from PSI:Biological Materials Repository: 0 clones [?](#)
- Related Targets & Protocols from TargetTrack: 0 targets [?](#)

2. ZA ISTI FAJL, VIRTUELNO ODŠTAMPATI (UKOLIKO JE MOGUĆE), VEB-STRANICU "Structure Summary", U OBLIKU PDF FAJLA I SAČUVATI TAJ DOKUMENT U PRILOGU.

NASTAVAK

UPUTSTVO NA PRIMERU FAJLA 4DKL:

3. SA VEB-STRANICE "Structure Summary" PREUZETI I UNETI PODATKE KAKO JE PRIKAZANO DOLE (MOGU DA POSTOJE RAZLIKE ZAVISNO OD KONKRETNOG FAJLA):

NASLOV: Crystal structure of the mu-opioid receptor bound to a morphinan antagonist

IDENTIFIKACIJA DOKUMENTA (U PDB): DOI:10.2210/pdb4dkl/pdb

PRIMARNA REFERENCA (Primary Citation):

1. NASLOV RADA "Crystal structure of the μ -opioid receptor bound to a morphinan antagonist".

2. AUTORI: Manglik, A., Kruse, A.C., Kobilka, T.S., Thian, F.S., Mathiesen, J.M., Sunahara, R.K., Pardo, L., Weis, W.I., Kobilka, B.K., Granier, S.

3. ČASOPIS: (2012) Nature 485: 321-326

3. PUBMED REFERENCA: PubMed: 22437502

4. IDENTIFIKACIJA DOKUMENTA (ČASOPIS I ČLANAK): DOI: 10.1074/jbc.M108453200

5. PUBMED ABSTRAKT (PubMed Abstract): "Opium is one of the world's oldest drugs, and ..."

6. KEYWORDS: Animals, Binding Sites, Crystallography, X-Ray, Ligands, Mice, Models, Molecular, Morphinans, Protein Conformation, Protein Multimerization, Receptors, Opioid, mu, Solvents

NASTAVAK 

UPUTSTVO NA PRIMERU FAJLA 4DKL:

OPIS MOLEKULA (Molecular Description):

- 1. KLASIFIKACIJA:** Signaling Protein/antagonist
- 2. MOLEKULSKA MASA (Structure Weight): 55762.12**
- 3. TIP MOLEKULA (MOLECULE):** Mu-type opioid receptor, lysozyme chimera
- 4. POLIMER:** 1 **TIP:** protein **DUŽINA:** 464
- 5. NIZOVI (CHAINS):** A
- 6. EC #: 3.2.1.17**
- 6. MUTACIJA: D1020N, C1054T, C1097A**

POREKLO (SOURCE):

Polymer: 1

NAUČNO IME (Scientific Name): Mus musculus, enterobacteria phage t4	OBIČNO IME (Common Name:) Miš, bakteriofaga t4	"EXPRESSION SYSTEM": Spodoptera frugiperda
--	---	--

LIGANDI (Ligand Chemical Component):

FORMULA I IME:

- $C_{10} H_{22} O_6$; PENTAETHYLENE GLYCOL
- $C_{25} H_{32} N_2 O_6$; methyl 4-{[(5beta,6alpha)-17-(cyclopropylmethyl)- 3,14-dihydroxy-4,5-epoxymorphinan-6-yl]amino}-4-oxobutanoate
- Cl⁻; HLORIDNI ION
- $C_{27} H_{46} O$; CHOLESTEROL
- $C_{21} H_{40} O_4$; 1-MONOOLEOYL-rac-GLYCEROL
- SO₄²⁻; SULFATNI JON

NASTAVAK →

UPUTSTVO NA PRIMERU FAJLA 4DKL:

-FAJL **4DKL** OBRADITI PRIMENOM PROGRAMA ACCELRY'S VISUALIZER 4.1.

-KORISTITI PRILOŽENO UPUTSTVO ZA KORIŠĆENJE ACCELRY'S VISUALIZER 4.1 ("UPUTSTVO ZA DS VISUALIZER 4.1", PDF FAJL).

-UPUTSTVO PRIKAZUJE OBRADU 3D FAJLA NA PRIMERU FAJLA: **4DKL**.pdb.

-U NASTAVKU OVOG DOKUMENTA SLEDI UPUTSTVO ZA IZRADU GRAFIČKOG DELA SEMINARSKOG RADA. OBRADU FAJLA (PRIMER **4DKL**) IZVRŠITI PROGRAMOM ACCELRY'S VISUALIZER 4.1, .

-NA HARDVERSKI SLABIJIM RAČUNARIMA, MOŽE DOĆI DO VELIKOG USPORENJA RADA A EVENTUALNO I BLOKADE

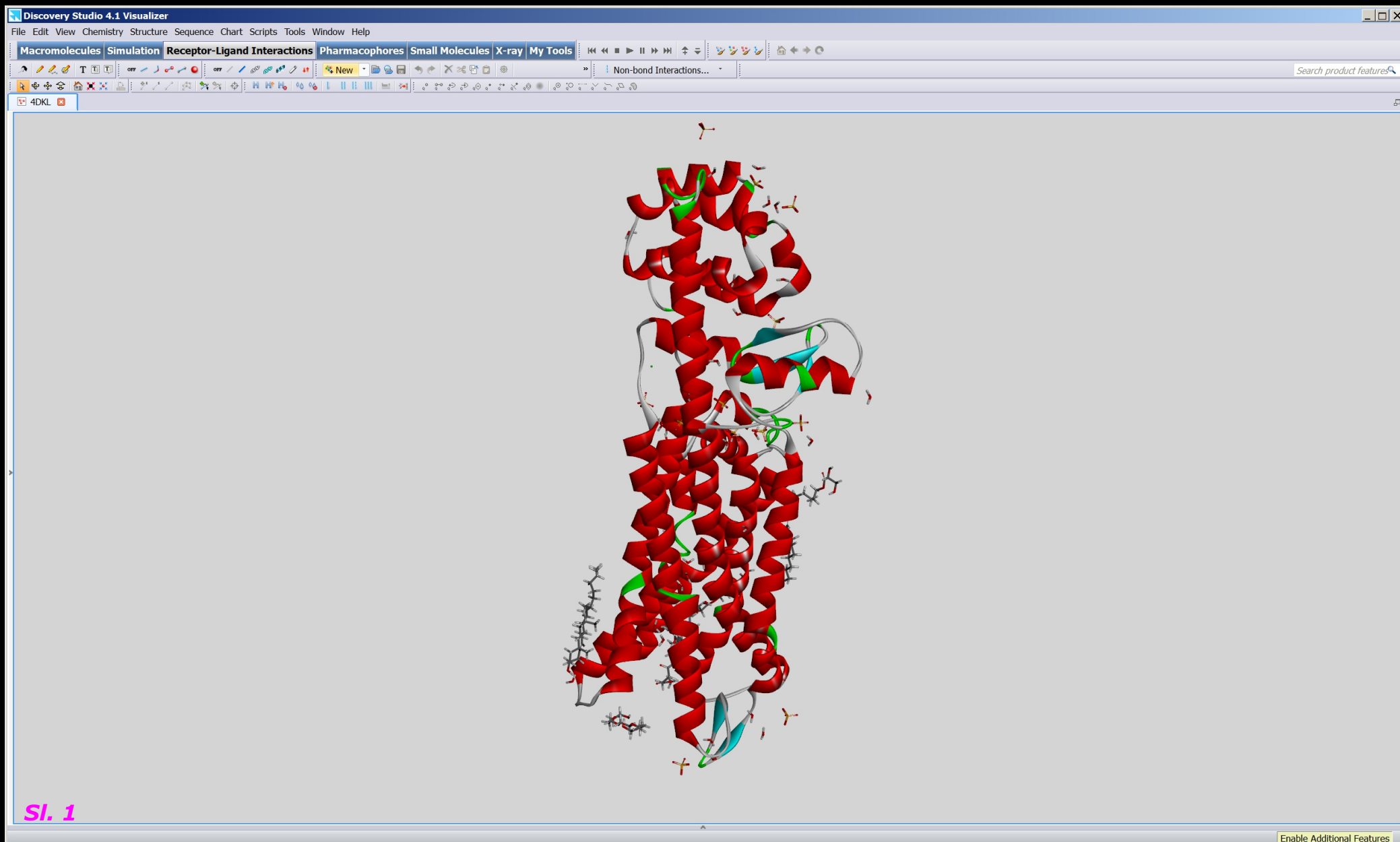
-TOKOM IZRADU SEMINARA, MOGUĆE SU KONSULTACIJE SA PREDMETNIM NASTAVNIKOM

NASTAVAK



UPUTSTVO NA PRIMERU FAJLA 4DKL:

1. Originalni pdb fajl (**4DKL**) učitati u Accelrys Visualizer, sačuvati ga kao **_01_4DKL.dsv** fajl, Sl. 1.



Sl. 1

Enable Additional Features

NASTAVAK

UPUTSTVO NA PRIMERU FAJLA 4DKL:

2. Prikaz fajla zatim modifikovati, kao što je prikazano u dokumentu "UPUTSTVO ZA DS VISUALIZER 4.1", na str. 9/35 -16/35, ukupno 9 fajlova. Fajlove imenovati kao 02_**4DKL**.dsv do 10_**4DKL**.dsv. (U seminarskom radu **koristiti ime konkretnog fajla** dakle 02_****.dsc itd).
3. Za svaki fajl se mogu izabrati i različita podešavanja od onih navedenih u dokumentu "UPUTSTVO ZA DS VISUALIZER 4.1" ili se može kreirati veći broj fajlova sa različitim podešavanjima. Svrha ovog dela rada je upoznavanje sa različitim načinima prikazivanja biomakromolekula a takođe i "malih molekula".
4. Dalje, prvo prikazati molekul kao na str. 15/35 dokumenta "UPUTSTVO ZA DS VISUALIZER 4.1" a zatim za molekul proteina generisati 3D površinu koja približno definiše njegovu zapreminu. Koristiti navedena podešavanja (str. 17/35), a dobijenu strukturu (str. 18/35) sačuvati kao fajl 11_**4DKL**.dsv odn. 11_****.dsv. (I u ovom delu se mogu koristiti različita podešavanja koja se odnose na transparentiju, boju površine i dr. Takođe se može kreirati i više fajlova sa različitim podešavanjima).
5. Zatim ukloniti dobijenu površinu a posle toga i prikaz molekula proteina (str. 19-22/35) pri čemu na ekranu ostaje prikaz molekula liganada, jona i vode). Sačuvati fajl kao 12_**4DKL**.dsv odn. 12_****.dsv
6. Aktivirati opciju "View/Hierarchy" (str. 23/35) a zatim selektovati prvi ligand (Ukoliko postoji). U prikazanom primeru **4DKL** ima ih 5). Za prvi ligand kreirati 3D površinu proizvoljne boje (str. 25/35), zatim opciju "fit to screen" (str. 26/35) kako bi ceo molekul bio vidljiv (bez proteina). Sačuvati fajl kao 13_**4DKL**.dsv odn. 13_****.dsv
7. Isključiti prikaz molekula vode (str. 27-28/35) a uključiti prikaz molekula proteina (preko opcije zaokružene ljubičastim pravougaonicima, str. 29/35) i sačuvati fajl kao 14_**4DKL**.dsv odn. 14_****.dsv .
8. Dalje, sukcesivno selektovati i prikazati 3D površine za svaki ligand (str. 29 -31/35) i sačuvati fajl kao 15_**4DKL**.dsv odn. 15_****.dsv.
9. Selektovati molekul proteina i prikazati njegovu 3D površinu (str. 32 -33/35). Proizvoljno rotirati (i/ili pomerati i zumirati molekul kao celinu), deselektovati molekul i sačuvati fajl kao 15_**4DKL**.dsv odn. 15_****.dsv.
10. Ukloniti prikaz molekula proteina kao što je ranije objašnjeno, tako da se dobije struktura kao na str. 35/35 i taj fajl sačuvati kao 16_**4DKL**.dsv odn. 16_****.dsv.
11. Priložiti sve fajlove (tekstualne, PDF i dsv) kao seminarski rad.