

3D zobrazování molekul

C9531 - Seminář k přednášce Strukturní biochemie

Viktor Bartošík, 484477@mail.muni.cz

Přírodovědecká fakulta Masarykovy univerzity

26. září 2023

Úvodní slovo

Požadavky k udělení zápočtu

- nutno napsat **4 průběžné testy** (každý minimálně na 60 %)
- neúspěšný test lze opakovat v zápočtovém týdnu
- úspěšné složení testů je potřebné pro udělení zápočtu, vstupenka na ústní zkoušku k C9530

seminární skupina pá 12:00-13:50 přesunuta na st 17:00-18:50,
učebna B11/333

Úvodní slovo

Datum	Náplň cvičení
22. 9.	3D zobrazování molekul, stereozobrazování
29. 9.	Určování torzních úhlů - peptidy, Ramachandranův diagram
6. 10.	Určování torzních úhlů - nukleotidy, struktura sacharidů
13. 10.	Průběžný test 1: torzní úhly peptidů a nukleotidů
20. 10.	Sekvenace
27. 10.	Optické metody
3. 11.	Průběžný test 2: sekvenace, optické metody
10. 11.	Rentgenová krystalografie
17. 11.	Státní svátek
24. 11.	Rentgenová krystalografie
1. 12.	Průběžný test 3: Rentgenová krystalografie
8. 12.	Nukleární magnetická rezonance
15. 12.	Nukleární magnetická rezonance
22. 12.	Průběžný test 4: Nukleární magnetická rezonance

Stereozobrazování

- zobrazení pohledu levého a pravého oka vedle sebe
- otočené o cca 5° kolem vertikální osy
- zaostřuje se mimo rovinu, ze dvou obrázků vzniknou čtyři
- prostřední dva se složí v pseudo-3D obraz

Varianty stereozobrazování

wall-eyed:

- oči zaostřují za rovinou obrázku
- vyžaduje přesnou vzdálenost mezi obrázky
- častější při zobrazení na papíře
- levé oko se dívá na levý obrázek, pravé na pravý
- **pomůcka: zaostřit na vzdálený bod (cca 3 metry)**

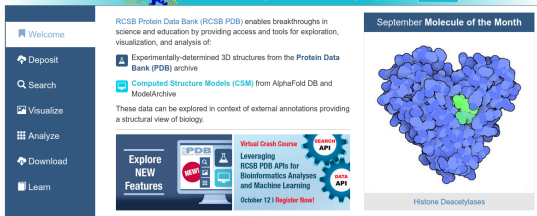
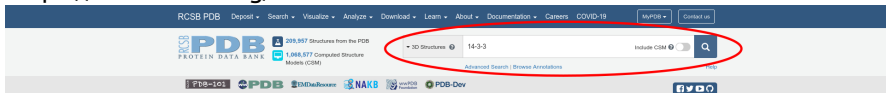
Varianty stereozobrazování

cross-eyed:

- oči zaostřují před rovinou obrázku
- vzdálenost mezi obrázky není tak důležitá
- častější při zobrazení na monitorech
- levé oko se dívá na pravý obrázek, pravé na levý
- **pomůcka: zaostřit na bližší předmět, např. tužku**

PDB databáze: stereo zobrazení (cross-eyed)

<https://www.rcsb.org/>



Latest Entries

As of Jan. Sep. 29 2023



BAXE

Small molecule stabilizer for ERalpha and
4A_2.3 (10774.116)

Features & Highlights



Register Now for October Virtual Crash Courses on RCSB PDB APIs
Learn about Leveraging RCSB PDB APIs for Bioinformatics Analyses and Machine Learning. Part 1 will introduce the Data and Search APIs. Part 2 will offer hands-on exercises.



Coming Soon: PDB Entries with Novel Ligands Distributed Only in PDBx/mmCIF and PDBML File Formats

PDB will run out of 3-character CCD IDs before the end of 2023. Afterwards, PDB entries with novel ligands will not be

News

Publications -



Poster Prize Awarded at ACA 2023
Congratulations to Alexander Paredes for *Biophysical characterization of the Pseudomonas aeruginosa BqsA/BqsS two-component system*
= 09/19/2023



September 19: DNS name changes for PDB archive downloads from RCSB PDB
Programmatic users (ftp, rsync or https) should update scripts
= 09/15/2023

PDB databáze: stereo zobrazení (cross-eyed)

RCSB PDB Deposit Search Visualize Analyze Download Learn About Documentation Careers COVID-19 MyPOB Contact us

Return Structures grouped by No Grouping Include Computed Structure Models (CSM) Count Clear Search

Search Summary This query matches 1,718 Structures.

Refinements Tabular Report

Structure Determination Methodology
 experimental (1,718)

Scientific Name of Source Organism
 Homo sapiens (1,325)
 Mus musculus (279)
 synthetic construct (61)
 Dictyostelium discoideum (47)
 Hepatitis C virus isolate HC-J4 (44)
 Rattus norvegicus (39)
 Influenza A virus (12)
 Nicotiana glauca (12)
 Pseudomonas horreorum (11)
 Pseudomonas aeruginosa (11)
More...

Taxonomy
 Eukaryota (1,649)
 Riboviria (129)
 other sequences (61)
 Bacteria (30)
 Microsporidia (6)
 Viridivirales (3)
 unclassified sequences (2)
 Archaea (1)
 Duplodictyonia (1)

Experimental Method
 X-RAY DIFFRACTION (1,618)
 SOLUTION NMR (52)
 ELECTRON MICROSCOPY (48)

Polymer Entity Type
 Protein (1,718)
 DNA (60)
 RNA (6)

Refinement Resolution (Å)
 0.5 - 1.0 (1)
 1.0 - 1.3 (213)

1 to 25 of 1,718 Structures Page 1 of 69 25 Sort by Score

2NDM crystal structure of *Cryptosporidium parvum* 14-3-3 protein in complex with peptide
Dong, A., Lew, J., Wasney, G., Ren, H., Lin, L., Hassanat, A., Qiu, W., Zhao, Y., Doyle, D., Voth, J.J., Koziara, J., Edwards, A.M., Arrowsmith, C.H., Weigek, J., Arrowsmith, C.H., Edwards, A.M., Bochkarev, A., Hul, R., Broks, S., Structural Genomics Consortium (SGC)
(2011) PLoS One 6: e14827-e14827
Released 2006-11-07
Method X-RAY DIFFRACTION 2.52 Å
Organisms *Cryptosporidium parvum*
Macromolecule 14-3-3 domain containing protein (protein)
CONSENSUS PEPTIDE FOR 14-3-3 PROTEINS (protein)

3EFZ Crystal Structure of a 14-3-3 protein from cryptosporidium parvum (cgd1_2980)
Warrimont, A.K., Dong, A., Qiu, W., Lew, J., Wasney, G.A., Vedadi, M., Koziara, J., Zhao, Y., Ren, H., Alam, Z., Lin, Y.H., Sundstrom, M., Weigek, J., Arrowsmith, C.H., Edwards, A.M., Bochkarev, A., Hul, R., Broks, S., Structural Genomics Consortium (SGC)
(2011) PLoS One 6: e14827-e14827
Released 2008-09-23
Method X-RAY DIFFRACTION 2.08 Å
Organisms *Cryptosporidium parvum* Iowa II
Macromolecule 14-3-3 protein (protein)
Unique Ligands EDO

1O9C Structural view of a fungal toxin acting on a 14-3-3 regulatory complex
Wurtele, M., Jelic-Ottmann, C., Wittlinger, A., Oecking, J.
(2003) EMBO J 22: 987
Released 2003-03-06
Method X-RAY DIFFRACTION 2.6 Å
Organisms *Nicotiana glauca*
Macromolecule 14-3-3-LIKE PROTEIN C (protein)
Unique Ligands CL, FLC

<https://www.rcsb.org/structure/2NDM>

PDB databáze: stereo zobrazení (cross-eyed)

RCSB PDB Deposit Search Visualize Analyze Download Learn About Documentation Careers COVID-19 MyPDB Contact us

RCSB PDB PROTEIN DATA BANK 209,957 Structures from the PDB 1,068,577 Computed Structure Models (CSM)

3D Structures Enter search term(s), Entry ID(s), or sequence Include CSM Help

Advanced Search Browse Annotations

PDB-101 PDB TMDBRevelate NAKB PDB-Dev

f t v

Structure Summary 3D View Annotations Experiment Sequence Genome Versions

Biological Assembly 1

2NPM

crystal structure of *Cryptosporidium parvum* 14-3-3 protein in complex with peptide

PDB DOI: <https://doi.org/10.2210/pdb/2NPM/pdb>

Classification: PROTEIN BINDING
Organism(s): *Cryptosporidium parvum*
Expression System: *Escherichia coli*
Mutation(s): No

Deposited: 2006-10-27 **Released:** 2006-11-07
Deposition Author(s): Dong, A., Lew, J., Wasney, G., Ren, H., Lin, L., Hassanali, A., Qiu, W., Zhao, Y., Doyle, D., Vedadi, M., Koeieradzki, I., Edwards, A.M., Arowsmith, C.H., Weigelt, J., Sundstrom, M., Bochkarev, A., Hui, R., Broks, S., Structural Genomics Consortium (SGC)

3D View Structure 3D View | Electron Density Visualization Report

Global Symmetry: Cyclic - C2 (3D View)
Global Stoichiometry: Hetero 4-mer - A2B2

Pseudo Symmetry: Asymmetric - C1
Pseudo Stoichiometry: Hetero 4-mer - A2B1C1

Find Similar Assemblies

Biological assembly 1 assigned by authors and generated by PISA (software)

Macromolecule Content

- Total Structure Weight: 61.02 kDa
- Atom Count: 3,756
- Modelled Residue Count: 484
- Unmodelled Residue Count: 532

Experimental Data Snapshot

Method: X-RAY DIFFRACTION
Resolution: 2.52 Å
R-Value Free: 0.275
R-Value Work: 0.221
R-Value Observed: 0.222

wwPDB Validation

Metric	Percentile Ranks	Value
B-factor		6.292
Chlorides		5
Ramachandran outliers		6
Sidechain outliers		7.33
RSRZ outliers		4.15

This is version 1.5 of the entry. See complete history.

Literature Download Primary Citation

Characterization of 14-3-3 proteins from *Cryptosporidium parvum*.
Broks, S.J., Wernimont, A.K., Dong, A., Wasney, G.A., Lin, Y.H., Lew, J., Vedadi, M., Lee, W.H., Hui, R. (2011) *PLoS One* 6: e14827-e14827

PDB databáze: stereo zobrazení (cross-eyed)

RCSB PDB Deposit Search Visualize Analyze Download Learn About Documentation Careers COVID-19 MyPDB Contact us

Sequence of 2NPM | crystal... Chain 1: 14-3-3 dom... A

GLLPDCHT...
YKSFVKAET...
EAFEMATE...

Settings / Controls Info

- Animate Off
- Camera Perspective
- Axes On
- Stereo Off**
- Field of View 45
- Background
- Occlusion On
- Shadow Off
- Outline Off
- Fog On
- Clipping 58
- Layout 1 of 1

Structure

2NPM | crystal structure of Cryptos...

Type Assembly

Asm Id 1: Author And Software...

Dynamic Bonds Off

Nothing Focused

Measurements

Structure Motif Search

Components 2NPM

Presets + Add

Polymer Carbon

Non-standard Ball & Stick

Water Ball & Stick

Unit Cell P 41 21 2

Density

Quality Assessment

Assembly Symmetry

Export Models

Export Animation

Export Geometry

Select a different viewer Mol* (WebGL)

PDB databáze: stereo zobrazení (cross-eyed)

RCSB PDB

Deposit Search Visualize Analyze Download Learn About Documentation Careers

COVID-19

MyPDB

Contact us

Help

Sequence of 2NPM | cryst... Chain 1: 14-3-3 dom... A

```
GLLPDPTDQDLKLTNRGKGLGSRNAGEKRYNMLAGLQARVYDGNKFTREDFYEAQK...ELTVSRNLGPIAIFKRWGSRGSRNII...LQVQKPKHNRNADGASRCKPK  
YRDFVARSFVYKMLLIRLNRLLKIPATYDQKVPYFTRGKDYRNTDSEPTDQKQSDSAGLAKATKDATVVAEGLKPTDRIKGLAIDFVYVPEI...LREPRKATDMK  
EAFDNRATLQGLRDEKDYKSTLIRKGLRDKLAFKA
```

Structure

2NPM | crystal structure of Cryotos...

Type Assembly

Asm Id 1: Author And Software...

Dynamic Bonds X Off

Nothing Focused

Measurements

Structure Motif Search

Components 2NPM

Preset + Add

Polymer Cartoon

Non-standard Ball & Stick

Water Ball & Stick

Unit Cell P 41 21 2

Density

Quality Assessment

Assembly Symmetry

Export Models

Export Animation

Export Geometry

Select a different viewer Mol* (WebGL)

**MASARYKOVA
UNIVERZITA**