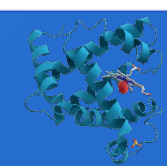


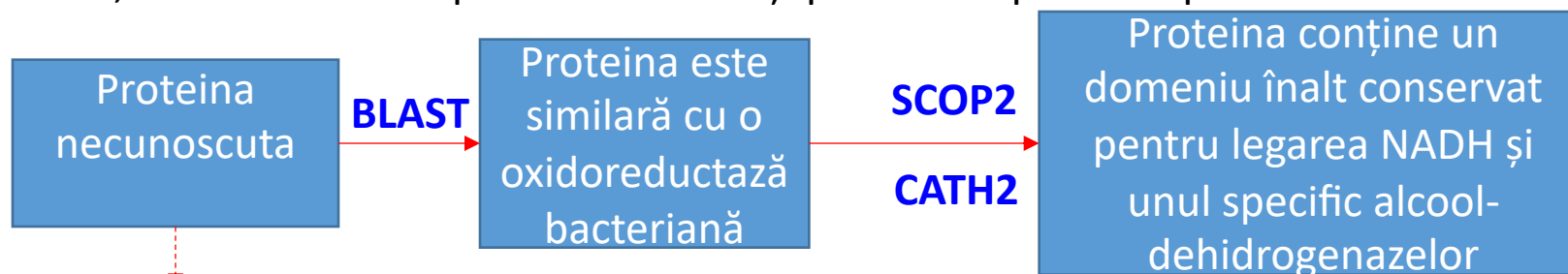
24.04.2024

Curs 9 – Baza de date wwPDB și fișiere cu structuri proteice

Relevanța informațiilor structurale



Atât analiza secvenței de aminoacizi cât și apartenența unei proteine la o familie dată pot oferi informații importante referitoare la funcție și rol. Aceste informații sunt obținute pe baza de **analize comparative** cu proteine similare a căror funcție este cunoscută și **precizează informații precum amplasarea celulară, reacția (funcția) generală catalizată**. Rezultatele trebuie mai apoi **confirmate experimental**, fiind foarte utile pentru a selecta și prioritiza tipul de experiment ce trebuie realizat.



Ar putea fi:

- Proteină membranară
- Proteină structurală
- Proteină enzimă

Proteina este:

- O enzimă
- Apare la bacterii
- Face parte din EC. 1 - oxidoreductaze

Proteina este:

- O alcool dehidrogenază ce leagă NADH
- E.C. 1.1.1.1

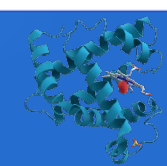
142807 proteine
93.9 milioane de
compuși cunoscuți cu
care aceste proteine
are putea
interacționa

38377
oxidoreductaze
cunoscute
93.9 milioane de
compuși cunoscuți cu
care aceste proteine
are putea
interacționa

EC 1.1.1.1 – 8756 enzime
11847 alcooli cunoscuți

Se va evalua experimental doar activitatea
alcool-dehidrogenazică

Relevanța informațiilor structurale



Structura tridimensională (amplasarea spațială exactă a tuturor atomilor) a unei proteine este singura informație ce permite stabilirea cu precizie și fără echivoc a funcției unei molecule proteice. Importanța practică a informațiilor structurale și dezvoltarea metodelor de stabilire a structurii tridimensionale a proteinelor a făcut necesară organizarea informațiilor sub forma unei baze de date:

wwPDB – worldwide Protein DataBank

- Prima versiune a unei baze de date cu structuri proteice (numită PDB) a apărut în **1971** în SUA și **conținea structurile a 7 proteine;**
- Începând cu anii 1990, **publicarea oricărui articol științific cu structura tridimensională a unei proteine devine dependentă de existența structurii în cauză în PDB;**
- În 1998 PDB devine **Research Collaboratory for Structural Bioinformatics Protein DataBank – RCSB PDB;**
- În **2003** apare **wwPDB** prin unirea unor baze de date similare din Japonia (PDBj) și Europa (PDBe)
- În prezent wwPDB conține **138270** structuri macromoleculare

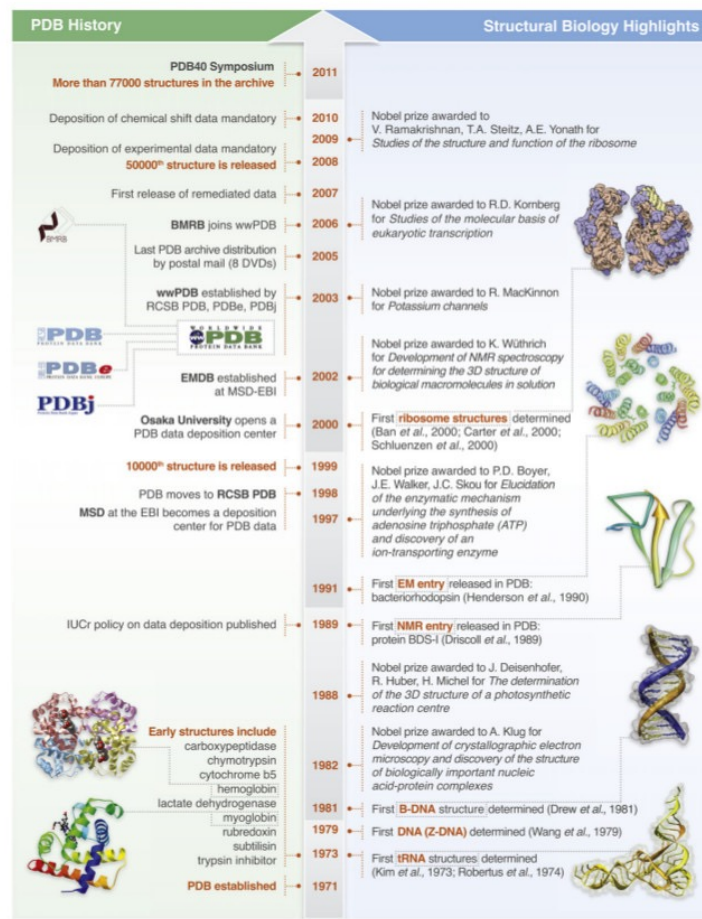
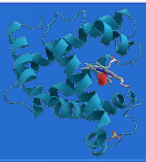


Figure 1. Timeline of Key PDB Events and Structural Biology Highlights, 1971-2011
(Left) Key events in the evolution of the PDB.
(Right) Selected key structures in the field of structural biology (Ban et al., 2000; Carter et al., 2000; Schluenzen et al., 2000; Henderson et al., 1990; Driscoll et al., 1989; Drew et al., 1981; Wang et al., 1979; Kim et al., 1973; Robertus et al., 1974).

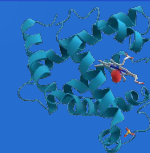


wwPDB este o bază de date cu structuri tridimensionale (amplasarea în spațiu a fiecărui atom, în coordonate OXYZ) ale macromoleculor biologice determinate experimental prin cristalografie cu raze X, spectroscopie NMR sau microscopie electronică.

În wwPDB fiecărei structuri a unei macromolecule îi este alocată o combinație unică de 4 caractere numită **PDBid** (1 cifră și 3 litere, cifra întotdeauna prima). Poate aceeași macromoleculă să aibă mai multe PDBid? De ce?

Fiecare intrare/moleculă/PDBid din wwPDB conține:

- a)– **coordonatele în sistem cartezian** a tuturor atomilor din structura macromoleculei respective;
- b)- **secvența de aminoacizi/nucleotide**;
- c)- **tipurile de structuri secundare** și distribuția lor pe catena polipeptidică;
- d)- **structura chimică a cofactorilor, grupărilor prostetice, inhibitorilor** sau a oricăror altor **liganzi** de dimensiuni mici ce interacționează cu macromolecula;
- e)- **numele tuturor componentelor** ce alcătuiesc macromolecula respectivă (catene peptidice diferite, liganzi, molecule de acizi nucleici);
- f)- legăturile de H sau alte tipuri de interacțiuni ce au loc între elementele structurale ale macromoleculei;
- g)- **modul de asamblare în molecula biologic activă** a diverselor componente ale macromoleculei (asamblarea subunităților în cazul proteinelor multimerice, legarea cofactorilor enzimatici) și **conformația situsului activ**;
- h)- **sursa** din care provine macromolecula respectivă – gen, specie, tulpină;
- i)- **detalii experimentale specifice** legate de modul de obținere a structurii tridimensionale; modul specific de structurare a acestor informații depinde de tipul de experiment – X-Ray, NMR, etc.:



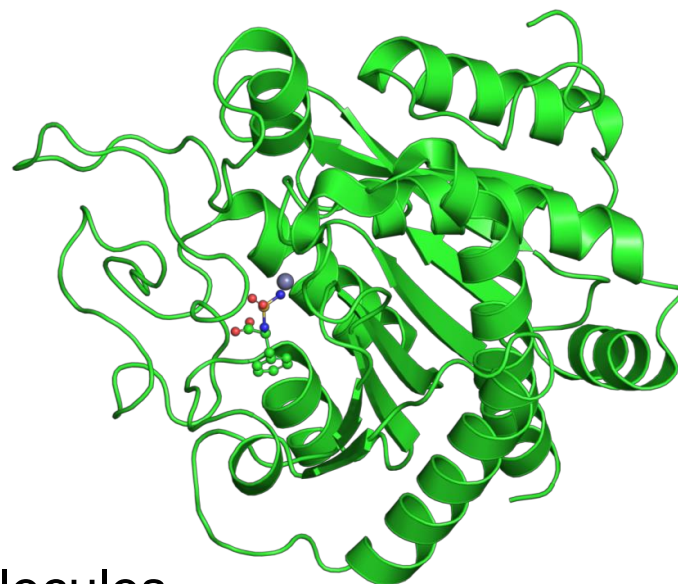
Not all 140 000 structures are unique molecules

eg There are ~43,000 structures of human proteins
But only ~10, 000 **different** human proteins

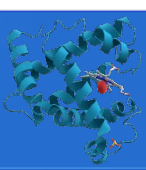
Why?

- Solved by different methods
- With different compounds bound
- By different people
- In different conditions

Carboxypeptidase A:
42 structures - 39 different small molecules



De unde provin structurile din wwPDB?



Fiind determinate experimental, toate structurile macromoleculelor biologice din wwPDB sunt depozitate manual de către grupuri de cercetare ce lucrează în domeniul cristalografiei cu Raze X, NMR și mai nou criomicroscopie. Coordonatele tridimensionale și informațiile asociate pot fi depozitate în wwPDB prin intermediul oricăruia dintre cei 4 membri ai wwPDB:

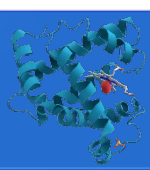
1. **RCSB PDB** – deposit.pdb.org/adit - USA
2. **PDBj** – pdbdep.protein.osaka-u.ac.jp/adit – Japonia, Osaka Univ.
3. **PDBe** - autodep.ebi.ac/ - Europa, European Bioinformatics Institute
4. **BMRB** – batfish.bmrwisc.edu/brmb-adit - USA

Odată depuse, toate informațiile sunt transmise spre RCSB PDB și BMRB unde sunt verificate, analizate și validate manual. **Validarea structurilor se referă la evaluarea unor parametri specifici și compararea/corectarea lor pentru a îndeplini o serie de standarde acceptate.**

Principalii parametri folosiți pentru validarea structurilor in wwPDB sunt:

1. **dimensiunile și unghiurile legăturilor covalente** – în conformitate cu valorile cunoscute din chimia anorganică/organică;
2. **orientarea centrilor chirali** – aminoacizii proteinogeni trebuie să fie L, glucidele D;
3. **numerotarea și nomenclatura atomilor din structura peptidelor** – numerotarea atomilor este corectată dacă este necesar pentru a îndeplini standardele IUPAC (IUPAC –IUB Joint Commission on Biochemical Nomenclature, 1983);
4. **numerotarea și nomenclatura atomilor din structura liganzilor, cofactorilor** - conform unui dicționar propriu disponibil la adresa www.wwpdb.ccd.html;
5. **distanțele față de moleculele de apă** – distanțele dintre atomii polari (O și N) și **moleculele de apă de solvatare** sunt evaluate și dacă este cazul, moleculele de apă sunt re poziționate;
6. **Geometria catenei polipeptidice** – valorile unghiurilor de torsiune și deviațiile de la configurația cis/trans.

Fișierul pdb

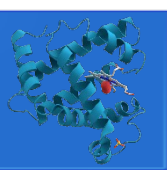


În wwPDB fiecărui PDBid îi este asociat un fișier cu extensia pdb. **Un fișier pdb reprezintă un fișier text în care informațiile structurale (coordonate spațiale și informațiile asociate) sunt notate urmând un standard specific numit standard PDB.**

Conform standardului PDB, fiecare rând de text din fișierul pdb începe cu denumirea unei înregistrări urmată apoi de conținutul înregistrării. Principalele **tipuri de înregistrări dintr-un fișier PDB sunt:**

- HEADER** – PDBid-ul corespunzător și data intrării în wwPDB;
- TITLE** – un titlu sugestiv pentru macromolecula conținută;
- COMPND** – denumirea moleculei, numărul de catene;
- SOURCE** – informații taxonomice privind organismul din care provine molecula;
- KEYWDS** – câteva cuvinte cheie pentru a caracteriza pe scurt structura;
- EXPDTA** – metoda folosită pentru stabilirea structurii tridimensionale;
- AUTHOR** -
- JRNL** – referință bibliografică, cel mai frecvent articol;
- REMARK** – orice alte informații adiționale, inclusiv cele ce prezintă detalii tehnice/experimentale legate de modalitatea de obținere a structurii;
- SEQRES** – secvența de aminoacizi a proteine;
- HET** – molecule non-proteice din structura tridimensională;
- HETNAM** – numele moleculei non-proteice;
- HELIX** - amplasarea pe secvență a structurilor secundare;
- SITE** – locul de legare a moleculelor non proteice;
- ATOM** – coordonatele carteziane ale fiecărui atom din structura macromoleculei.

Fișierul pdb



```
HEADER OXYGEN TRANSPORT 10-JUN-83 1HHO
TITLE STRUCTURE OF HUMAN OXYHAEMOGLOBIN AT 2.1 ANGSTROMS RESOLUTION
COMPND MOL_ID: 1;
COMPND 2 MOLECULE: HEMOGLOBIN A (OXY) (ALPHA CHAIN);
COMPND 3 CHAIN: A;
COMPND 4 ENGINEERED: YES;
SOURCE MOL_ID: 1;
SOURCE 2 ORGANISM_SCIENTIFIC: HOMO SAPIENS;
SOURCE 3 ORGANISM_COMMON: HUMAN;
SOURCE 4 ORGANISM_TAXID: 9606;
SOURCE 5 MOL_ID: 2;
SOURCE 6 ORGANISM_SCIENTIFIC: HOMO SAPIENS;
SOURCE 7 ORGANISM_COMMON: HUMAN;
SOURCE 8 ORGANISM_TAXID: 9606
KEYWDS OXYGEN TRANSPORT
EXPDTA X-RAY DIFFRACTION
AUTHOR B.SHAANAN
JRNL TITL STRUCTURE OF HUMAN OXYHAEMOGLOBIN AT 2.1 A RESOLUTION.
JRNL REF J.MOL.BIOL. V. 171 31 1983
JRNL REFN ISSN 0022-2836
JRNL PMID 6644819
JRNL DOI 10.1016/S0022-2836(83)80313-1
REMARK 1
REMARK 1 REFERENCE 1
REMARK 1 AUTH B.SHAANAN
REMARK 1 TITL THE IRON-OXYGEN BOND IN HUMAN OXYHAEMOGLOBIN
REMARK 1 REF NATURE V. 296 683 1982
REMARK 1 REFN ISSN 0028-0836
REMARK 2
REMARK 2 RESOLUTION. 2.10 ANGSTROMS
REMARK 3
REMARK 3 REFINEMENT.
REMARK 3 PROGRAM : NULL
REMARK 3 AUTHORS : NULL
REMARK 3
REMARK 3 DATA USED IN REFINEMENT.
REMARK 3 RESOLUTION RANGE HIGH (ANGSTROMS) : 2.10
```

Rezoluția structurii 3D indică calitatea și încrederea pe care o am în coordonatele carteziane astfel:

> 4 Å – structurile secundare sunt precizate corect, dar coordonatele carteziane ale fiecărui atom sunt lipsite de semnificație;

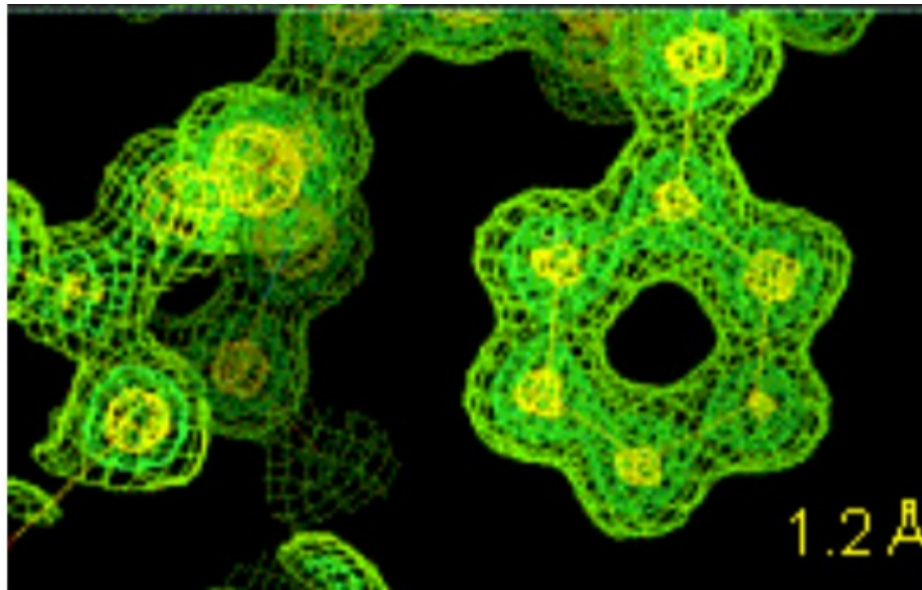
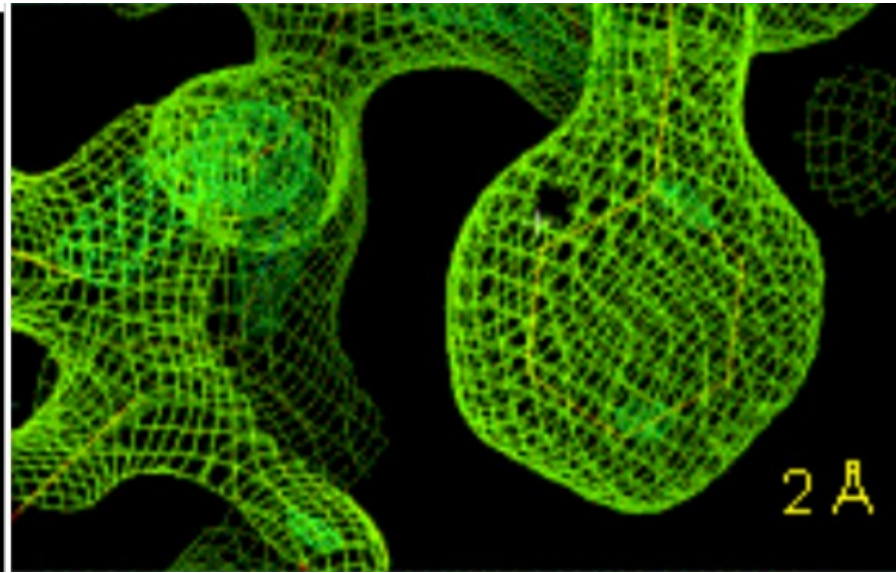
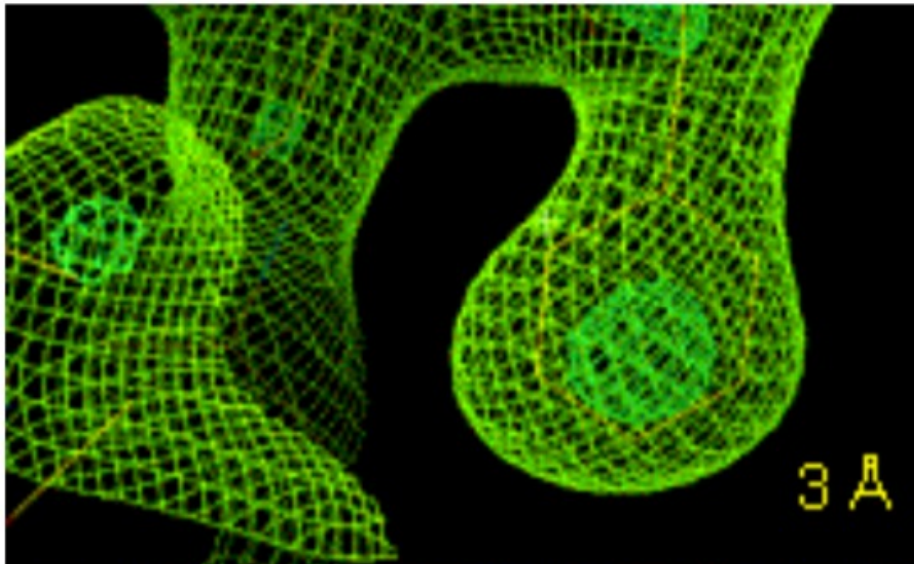
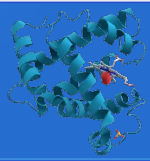
3,0 – 4,0 Å - plierea per ansamblu **ar putea fi** corectă, dar catenele laterale ale aminoacizilor sunt sau pot fi amplasate eronat;

2,5 – 3,0 Å - plierea per ansamblu **este** corectă, unele dintre catenele laterale ale aminoacizilor sunt sau pot fi amplasate eronat, buclele de la suprafața proteinei ar putea fi amplasate greșit;

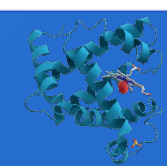
2,0 – 2,5 Å - plierea per ansamblu **este** corectă, majoritatea buclelor de la suprafața proteinei sunt corecte, moleculele de apă sunt amplasate corect;

1,5 – 2,0 Å - plierea per ansamblu **este** corectă, buclele de la suprafața proteinei sunt corecte, moleculele de apă sunt amplasate corect; toate catenele laterale ale aminoacizilor sunt amplasate corect;

Fișierul pdb - rezoluția în structurile proteice



Fișierul pdb



HELIX	12	BD	THR	B	50	GLY	B	56	1	7					
HELIX	13	BE	ASN	B	57	ALA	B	76	1	20					
HELIX	14	BF	PHE	B	85	CYS	B	93	1	9					
HELIX	15	BG	ASP	B	99	HIS	B	117	1	19					
HELIX	16	BH	THR	B	123	HIS	B	143	1	21					
LINK		NE2	HIS	A	87	FE	HEM	A	143	1555	1555	1.94			
LINK		NE2	HIS	B	92	FE	HEM	B	147	1555	1555	2.07			
LINK		FE	HEM	B	147	O1	OXY	B	150	1555	1555	1.87			
LINK		FE	HEM	A	143	O1	OXY	A	150	1555	1555	1.66			
SITE	1	AC1	2	LYS	A	99	ARG	A	141						
SITE	1	AC2	15	PHE	A	43	HIS	A	45	HIS	A	58	LYS	A	61
SITE	2	AC2	15	ALA	A	65	LEU	A	83	HIS	A	87	LEU	A	91
SITE	3	AC2	15	VAL	A	93	ASN	A	97	PHE	A	98	LEU	A	101
SITE	4	AC2	15	VAL	A	132	OXY	A	150	HOH	A	189			
SITE	1	AC3	4	HIS	A	58	VAL	A	62	HIS	A	87	HEM	A	143
SITE	1	AC4	16	PRO	A	4	THR	B	38	PHE	B	41	PHE	B	42
SITE	2	AC4	16	HIS	B	63	LYS	B	66	VAL	B	67	PHE	B	71
SITE	3	AC4	16	LEU	B	88	HIS	B	92	VAL	B	98	ASN	B	102
SITE	4	AC4	16	LEU	B	106	LEU	B	141	OXY	B	150	HOH	B	158
SITE	1	AC5	4	LEU	B	28	HIS	B	63	VAL	B	67	HEM	B	147
ATOM	1	N	VAL	A	1	5.287	16.725	4.830	1.00	77.31	N				
ATOM	2	CA	VAL	A	1	5.776	17.899	5.595	1.00	70.91	C				
ATOM	3	C	VAL	A	1	7.198	18.266	5.104	1.00	81.71	C				
ATOM	4	O	VAL	A	1	7.301	19.067	4.161	1.00	77.16	O				
ATOM	5	CB	VAL	A	1	5.498	17.697	7.118	1.00	51.33	C				
ATOM	6	CG1	VAL	A	1	6.457	16.822	7.917	1.00	78.39	C				
ATOM	7	CG2	VAL	A	1	5.211	18.976	7.922	1.00	48.23	C				
ATOM	8	N	LEU	A	2	8.272	17.653	5.632	1.00	67.33	N				
ATOM	9	CA	LEU	A	2	9.698	18.050	5.442	1.00	27.11	C				
ATOM	10	C	LEU	A	2	10.047	19.267	6.283	1.00	33.71	C				
ATOM	11	O	LEU	A	2	9.566	20.404	6.099	1.00	55.97	O				
ATOM	12	CB	LEU	A	2	10.129	18.317	4.001	1.00	30.38	C				
ATOM	13	CG	LEU	A	2	10.208	17.036	3.175	1.00	29.73	C				
ATOM	14	CD1	LEU	A	2	10.270	17.355	1.684	1.00	58.48	C				
ATOM	15	CD2	LEU	A	2	11.398	16.220	3.605	1.00	47.81	C				
ATOM	16	N	SER	A	3	10.906	18.980	7.204	1.00	32.91	N				
ATOM	17	CA	SER	A	3	11.161	19.924	8.259	1.00	32.58	C				

Informații despre structura secundară

Coordonatele carteziene ale tuturor

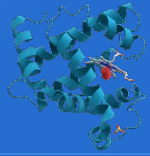
atomilor din structura proteinei

B-factor – gradul de incertitudine al coordonatelor fiecărui atom; dependent de temperatură și indică gradul de flexibilitate al poziției atomului; valori mai mici de 30 Å² indică lipsă de flexibilitate, valori mai mari de 60 Å² indică un atom a cărui poziție nu este bine definită; valori intermediare indică un atom cu poziție flexibilă;

Gradul de ocupare al atomului – indică existența unor conformații alternative ale atomului; 1.0 – o singură conformație; 0,5 – 2 conformații;

PyMol și alte programe de vizualizare moleculară citesc acest limbaj și îl transformă în imagini

Cum pot accesa datele din RSCB PDB?



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

1. Rubrică de căutare generală

Sau 2. Explorarea întregii baze de date

Welcome

- Deposit
- Search
- Visualize
- Analyze
- Download
- Learn

A Structural View of Biology

This resource is powered by the Protein Data Bank archive-information about the 3D shapes of proteins, nucleic acids, and complex assemblies that helps students and researchers understand all aspects of biomedicine and agriculture, from protein synthesis to health and disease.

As a member of the wwPDB, the RSCB PDB curates and annotates PDB data.

The RSCB PDB builds upon the data by creating tools and resources for research and education in molecular biology, structural biology, computational biology, and beyond.

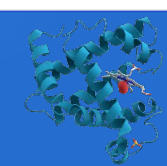
New Video: What is a Protein?

PDB-101 VIDEO WHAT IS A PROTEIN?

March Molecule of the Month

Vacuolar ATPase

Cum pot accesa datele din RSCB PDB?



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

2. Explorarea întregii baze de date după diverse criterii

- ATC
 - Bio. Process**
 - CATH
 - Cell Component
 - EC Numbers
 - Genome Location
 - MeSH
 - Membrane Prot.
 - Molecular Function
 - Protein Modification
 - Protein Symmetry
 - SCOP
 - Source Organism
- Transporter Classification

Anatomical Therapeutic Chemical Classification Browser ?

The **Anatomical Therapeutic Chemical (ATC)** Classification System is a Methodology.

ATC names are only listed when there are corresponding PDB entries.

Here you can **browse** an ATC name, **view** the number of associated

Search in Tree [Clear Search](#)

- A: ALIMENTARY TRACT AND METABOLISM** - [17005 Structures]
- B: BLOOD AND BLOOD FORMING ORGANS** - [5134 Structures]
- C: CARDIOVASCULAR SYSTEM** - [4874 Structures]
- D: DERMATOLOGICALS** - [766 Structures]
- G: GENITO URINARY SYSTEM AND SEX HORMONES** - [6 Structures]
- H: SYSTEMIC HORMONAL PREPARATIONS, EXCL. SEX HORMONES** - [6 Structures]
- J: ANTIINFECTIVES FOR SYSTEMIC USE** - [692 Structures]
- L: ANTINEOPLASTIC AND IMMUNOMODULATING AGENTS** - [6 Structures]
- M: MUSCULO-SKELETAL SYSTEM** - [1817 Structures]
- N: NERVOUS SYSTEM** - [644 Structures]
- P: ANTIPARASITIC PRODUCTS, INSECTICIDES AND REPELLENTS** - [6 Structures]
- R: RESPIRATORY SYSTEM** - [257 Structures]
- S: SENSORY ORGANS** - [4832 Structures]
- V: VARIOUS** - [5789 Structures]

Biological Process Browser ?

The **Gene Ontology™ (GO) Consortium** (PDF) is developing controlled vocabularies. The European Bioinformatics Institute has mapped PDB IDs and corresponding chemical entities.

Here you can browse the GO biological process hierarchy, view the number of associated

Search in Tree [Clear Search](#)

- behavior (GO ID:7610)** - [983 Entities]
- biological adhesion (GO ID:22610)** - [2289 Entities]
- biological regulation (GO ID:65007)** - [40181 Entities]
- carbohydrate utilization (GO ID:9758)** - [24 Entities]
- carbon utilization (GO ID:15976)** - [47 Entities]
- cell aggregation (GO ID:98743)** - [250 Entities]
- cell killing (GO ID:1906)** - [1593 Entities]
- cell proliferation (GO ID:8283)** - [1114 Entities]
- cellular component organization or biogenesis (GO ID:71840)** - [6 Entities]
- cellular process (GO ID:9987)** - [111736 Entities]
- detoxification (GO ID:98754)** - [2440 Entities]
- developmental process (GO ID:32502)** - [10184 Entities]
- growth (GO ID:40007)** - [1449 Entities]
- immune system process (GO ID:2376)** - [7996 Entities]
- localization (GO ID:51179)** - [19602 Entities]
- locomotion (GO ID:40011)** - [3289 Entities]
- metabolic process (GO ID:8152)** - [117485 Entities]
- multi-organism process (GO ID:51704)** - [14384 Entities]
- multicellular organismal process (GO ID:32501)** - [13376 Entities]
- nitrogen utilization (GO ID:19740)** - [9 Entities]
- pigmentation (GO ID:43473)** - [122 Entities]
- presynaptic process involved in chemical synaptic transmission (GO ID:40009)** - [6 Entities]
- reproduction (GO ID:3)** - [2927 Entities]
- reproductive process (GO ID:22414)** - [2885 Entities]
- response to stimulus (GO ID:50896)** - [38396 Entities]
- rhythmic process (GO ID:48511)** - [626 Entities]
- signaling (GO ID:23052)** - [13538 Entities]
- sulfur utilization (GO ID:6791)** - [18 Entities]

Enzyme Classification Browser ?

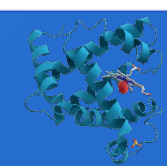
The PDB assigns EC (Enzyme Commission) numbers to structures. The enzyme is mapped to EC numbers. Enzyme Classification is based on the **Enzyme Commission (IUBMB)**. It describes each enzyme for which an EC number has been assigned.

Here you can **browse** an EC name, **view** the number of associated structures, **search** for the enzyme by either partial or full name.

Search in Tree [Clear Search](#)

- 1: Oxidoreductases** - [14239 Entities]
- 2: Transferases** - [24321 Entities]
- 3: Hydrolases** - [32090 Entities]
- 4: Lyases** - [5678 Entities]
- 5: Isomerases** - [3032 Entities]
 - 5.1: Racemases and epimerases** - [440 Entities]
 - 5.2: Cis-trans-isomerases** - [635 Entities]
 - 5.3: Intramolecular oxidoreductases** - [1054 Entities]
 - 5.4: Intramolecular transferases** - [534 Entities]
 - 5.5: Intramolecular lyases** - [73 Entities]
 - 5.99: Other isomerases** - [290 Entities]
- 6: Ligases** - [2307 Entities]
 - 6.1: Forming carbon-oxygen bonds** - [751 Entities]
 - 6.2: Forming carbon-sulfur bonds** - [195 Entities]
 - 6.3: Forming carbon-nitrogen bonds** - [1135 Entities]
 - 6.4: Forming carbon-carbon bonds** - [118 Entities]
 - 6.5: Forming phosphoric ester bonds** - [102 Entities]
 - 6.6: Forming nitrogen-metal bonds** - [4 Entities]

Ce informații găsec în RCSB PDB?



Pagina în RCSB PDB corespunzătoare PDB ID 1HHO

Structure Summary | 3D View | Annotations | Sequence | Sequence Similarity | Structure Similarity | Experiment

Biological Assembly 1

1HHO

STRUCTURE OF HUMAN OXYHAEMOGLOBIN AT 2.1 ANGSTROMS RESOLUTION

DOI: [10.2210/pdb1HHO/pdb](https://doi.org/10.2210/pdb1HHO/pdb)
Classification: [OXYGEN TRANSPORT](#)
Organism(s): [Homo sapiens](#)

Deposited: 1983-06-10 Released: 1983-10-27
Deposition Author(s): [Shaanan, B.](#)

Experimental Data Snapshot
Method: X-RAY DIFFRACTION
Resolution: 2.1 Å
R-Value Work: 0.223

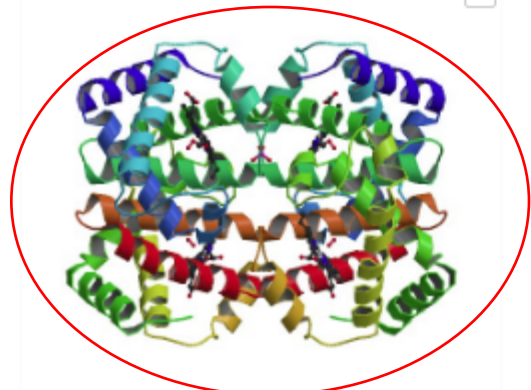
2. Date generale privind sursa, metoda si rezoluția structurii



1. Buton de descărcare a fișierului PDB corespunzător acestei intrări

- FASTA Sequence
- PDB Format
- PDB Format (gz)
- PDBx/mmCIF Format
- PDBx/mmCIF Format (gz)
- PDBML/XML Format (gz)
- Biological Assembly 1
- Structure Factors (CIF)
- Structure Factors (CIF - gz)
- 2fo-fc Map (DSN6)
- fo-fc Map (DSN6)

3. Date statistice privind corectitudinea/validarea acestei structuri



2. Imagine cu structura tridimensională

This is version 1.2 of the entry. See complete [history](#).

Literature

Structure of human oxyhaemoglobin at 2.1 Å resolution.

[Shaanan, B.](#)
(1983) J.Mol.Biol. 171: 31-59

4. Date bibliografice

PubMed: [6644819](https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/6644819/) [Search on PubMed](#)

PubMed Abstract:

The structure of human oxyhaemoglobin was determined by single crystal X-ray analysis at 2.1 Å resolution. Data were collected on an Arndt-Wonacott camera at -2 degrees C. The structure was refined to an R factor of 0.223 by the Jack-Levitt method, s ...

3D View: Structure | Electron Density | Ligand Interaction

Standalone Viewers
[Protein Workshop](#) | [Ligand Explorer](#)

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

Pseudo Symmetry: Dihedral - D2 (3D View)
Pseudo Stoichiometry: Homo 4-mer - A4

Biological assembly 1 assigned by authors.

Macromolecule Content

- Total Structure Weight: 32432.49
- Atom Count: 2287
- Residue Count: 287
- Unique protein chains: 2