

VRE for regional Interdisciplinary communities in Southeast Europe and the Eastern Mediterranean

PSOMI

Protein small organic molecules interaction

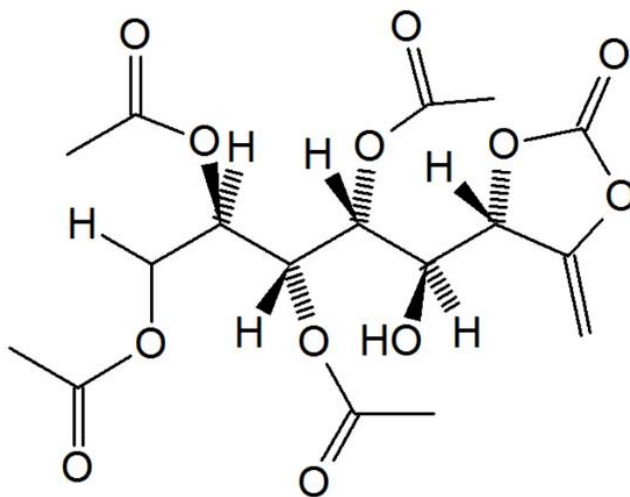
Dr Žarko Zečević
Elektrotehnički fakultet
Univerzitet Crne Gore
zarkoz@ac.me



- ❑ Zadaci:
 - ❑ Krerianje datasetova-a originalnih molekula u PDB ili nekom drugom standardnom hemijskom formatu
 - ❑ Utvrđivanje procedure (workloflow-a) za ispitivanje interakcije između malih molekula i proteina
- ❑ Gromacs ili Namd
- ❑ Simuliranje dinamike na HPC opremi
- ❑ Finki klaster sa 24 jezgra
- ❑ Kreiranje cloud servisa za krajnje korisnike

- Polazi se od strukturne formule enol karbonata:

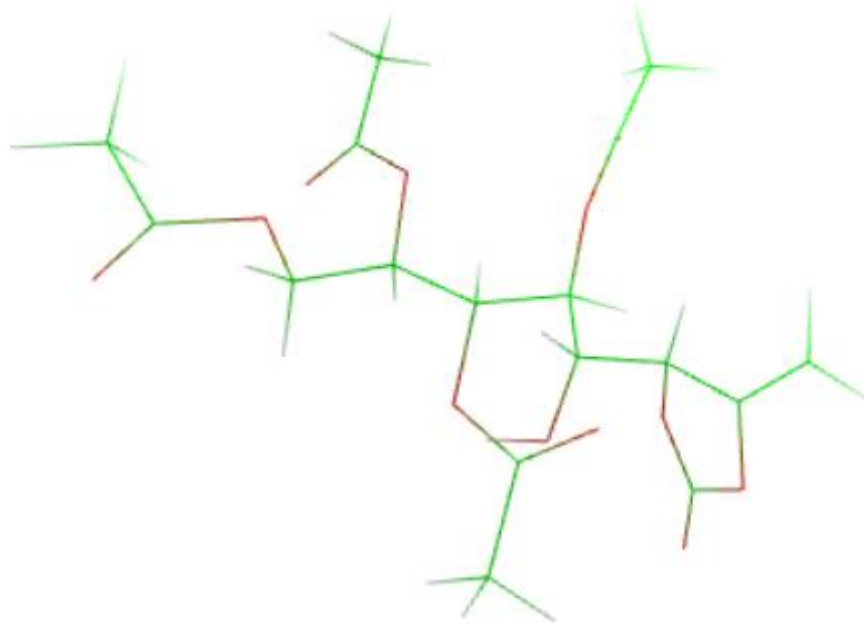
((2R,3R,4R,5S)-5-hydroxy-5-((S)-5-methylene-2-oxo-1,3-dioxolan-4-yl)pentane-1,2,3,4-tetraacetate)



- ChemScetch – program za crtanje molekula
- OpenBabel – Open Source program za konverziju molekula i jednog standardnog formata u drugi

MOLEKUL U PDB FORMATU

- ❑ Vizuelizacija u VegaZZ-u
- ❑ Potrebno je provjeriti da li su sve veze očuvane

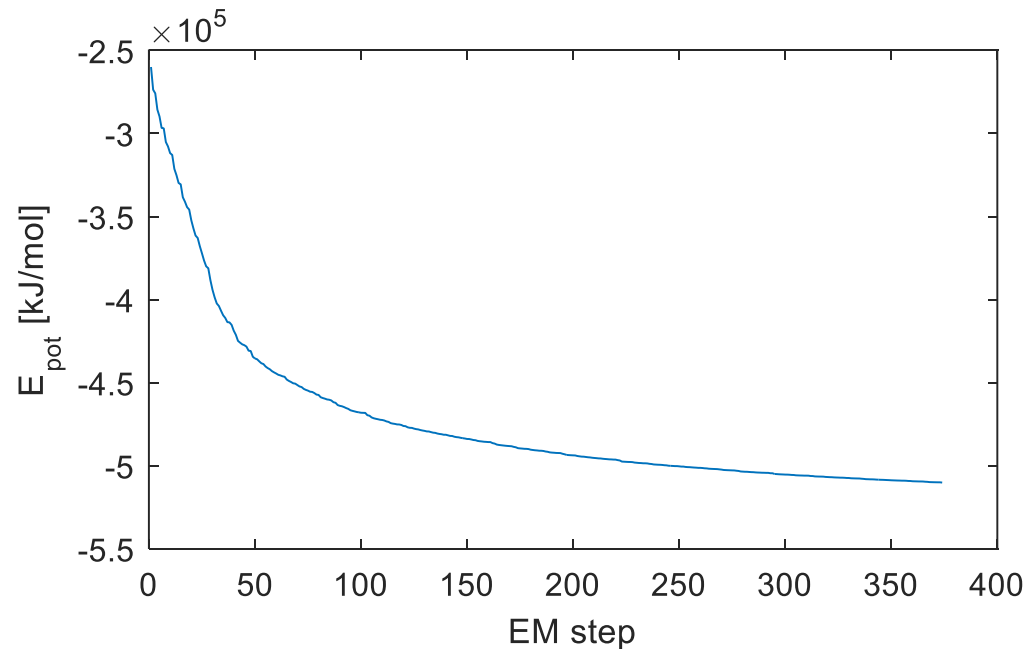


1. Priprema kompleksa protein-ligand

- ❑ Najprije je potrebno kreirati kompleks protein-ligand, čiju interakciju želimo da ispitamo
- ❑ ProdRG – online program za generisanje GRMOS96 topologije
- ❑ Protein lysozyme (T4 lysozyme L99A/M102Q) dostupan u besplatnoj online bazi <http://www.rcsb.org/pdb/explore.do>
- ❑ Solvatacija: nakon pripreme kompleksa potrebno ga je solvatisati u vodi ili nekom drugim rastovru

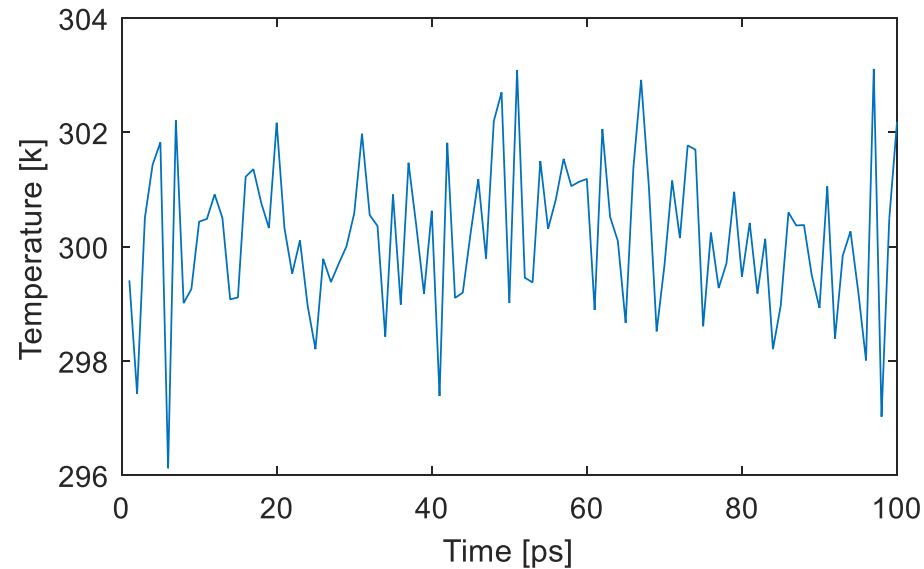
2. Minimizacija energije

- ❑ Prije početka dinamike, potrebno je izvršiti minimizaciju potencijalne energije
- ❑ Steepest descend, conjugate gradient, genetički algoritmi



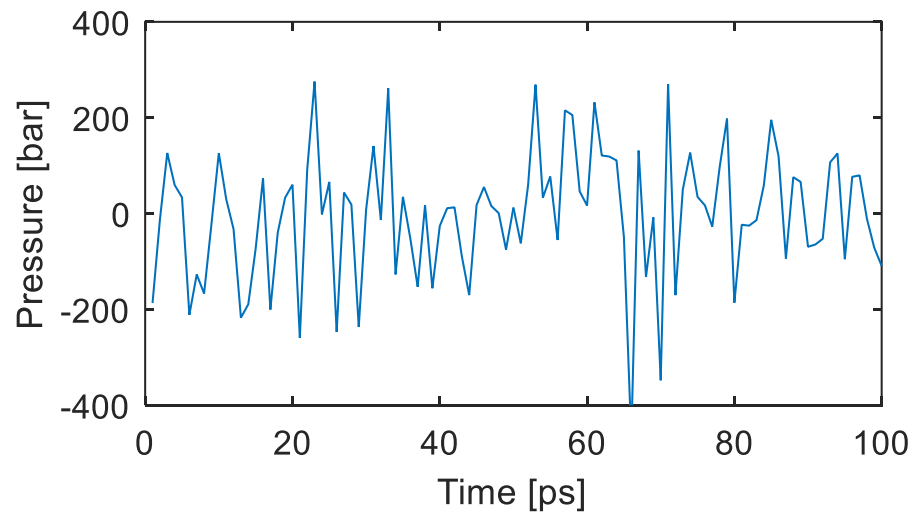
3. Ekvilibracija

- ❑ EM garantuje da će početna struktura ima zadovoljavajuću geometriju.
- ❑ Potrebno je izvršiti ekvilibraciju energije
- ❑ Prva faza: NVT

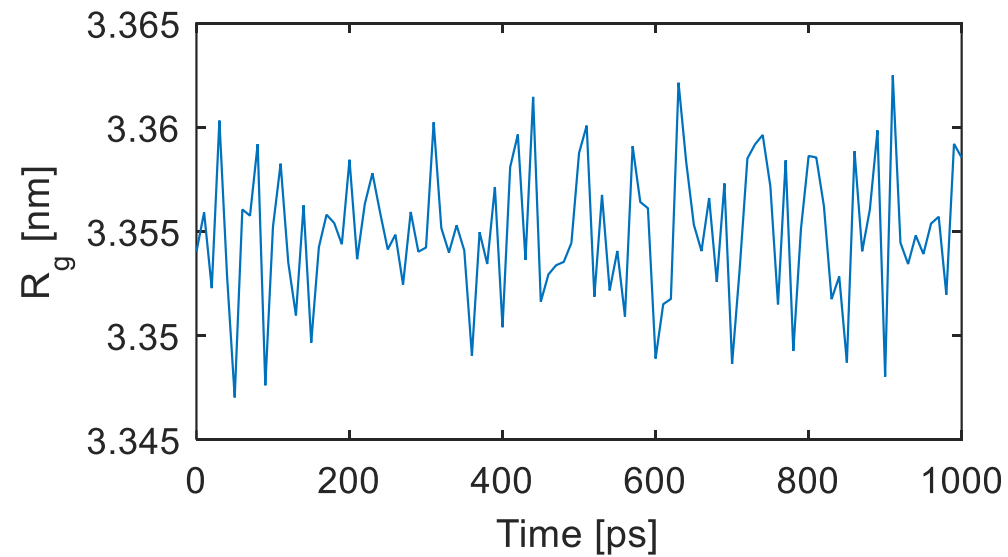


3. Ekvilibracija

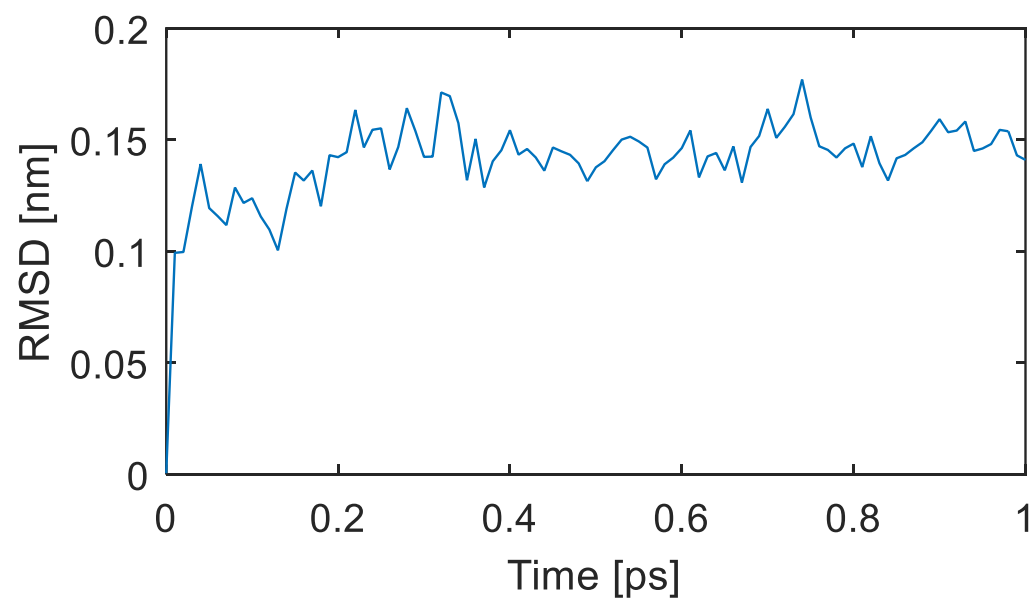
- Druga faza: NPT



- Mjera kompaktnosti proteina



- Još jedan mjera stabilnosti



Vizuelizacija u VMD-u



HVALA NA PAŽNJI