

Киназы антибиотикорезистентности - Project #419

Второй металл и протоны в AmiN

20.05.2021 16:12 - Alexander Zlobin

Status:	New	Start date:	03.05.2021
Priority:	Normal	Due date:	01.11.2021
Assignee:	Alexander Zlobin	% Done:	83%
Category:			
Target version:			
Description			
<p>По механизму работы AmiN киназы остались вопросы. Так, не понятно, почему не связывается второй металл (или связывается плохо) - в окружении нет ничего мешающего. В hAmiN он отлично связывается, а в этом месте киназы очень похожи. Гипотеза: в AmiN происходит протонирование АТФ. Мы хотим выяснить, как на самом деле выглядит активный центр в предреакционном состоянии с учетом всех протонов. Наши критерии в порядке значимости:</p> <ol style="list-style-type: none">1) Соответствие конформации из кристалла в механике во времени2) Возможность протекания реакции3) Плохое связывание второго металла			
Subtasks:			
Production # 396: Динамики с ANP-PNP			New
Production # 397: Подготовка систем			Resolved
Production # 395: Параметризация AMP-PNP			Resolved
Production # 420: Динамики с АТФ			New
Exploration # 406: Отбор систем-кандидатов (предреакционное состояние)			In Progress