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

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:

1) Соответствие конформации из кристалла в механике во времени

2) Возможность протекания реакции

3) 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 ATP	**New**
Exploration # 406: Отбор систем-кандидатов (предреакционное состояние)	**In Progress**