Фосфоглицерат мутаза - Production #450
Стартовые системы

14.09.2021 09:56 - Alexander Zlobin

Status:	In Progress	**Start date:**	14.09.2021
Priority:	Normal	**Due date:**	30.10.2021
Assignee:	Anastasia Rachkova	**% Done:**	50%
Category:			
Target version:			

Description

Подготовить стартовую систему комплекса PGM с двумя вариантами субстратов. Под стартовой системой подразумевается залитая водой GRO (вода вычищена) с топологией.

Как делать параметры для малых молекул (альтернативы):
1) https://www.bio2byte.be/acpype/ - выбрать GAFF2
2) https://github.com/openforcefield/openff-toolkit - выбрать Parsley или Sage, если есть. Разобраться, это не однокнопочное решение!
3) https://github.com/openforcefield/bespoke-fit

Нам как лабе будет очень полезно, если ты потратишь время и освоишь подготовку параметров для малых молекул вариантами 2 и 3. С 2 тебе может помочь Юлия Беляева, она уже так делала. 3 для нас совсем новый.

Тебе может понадобиться поставить свою миниконду под своего пользователя на срв и научиться делать энвайронменты.

History

#1 - 27.09.2021 10:05 - Anastasia Rachkova

- Due date changed from 27.09.2021 to 02.10.2021

Сравнить по литературным данным тулы для генерации параметров для малых молекул и выбрать тот, что больше подходит.

#2 - 01.10.2021 13:13 - Anastasia Rachkova

- Due date changed from 02.10.2021 to 04.10.2021

- % Done changed from 0 to 50

Решено пока оставить Bespoke-fit в покое и сделать все с помощью GAFF.

#3 - 07.10.2021 03:03 - Anastasia Rachkova

Сделаны параметры для субстратов - обоих стереоизомеров. Далее нужно

1) сделать системы комплексов

2) сделать минимизацию

#4 - 07.10.2021 04:03 - Anastasia Rachkova

За основу фермента взяла белок из 3EZN буркходелии, очистила его от воды и гликолей.

Хотела бахнуть pdb2gmx (поле amber03 и модель PIP3P - как делали в статье, в которой моделировали С-конец) , но вылезла ошибка:

Fatal error:
Residue 38 named GLN of a molecule in the input file was mapped
to an entry in the topology database, but the atom CG used in
that entry is not found in the input file. Perhaps your atom
and/or residue naming needs to be fixed.
Решение ее оставляю на день, возможно, имеет смысл просто взять другой pdb.

#5 - 07.10.2021 15:09 - Alexander Zlobin

- Status changed from New to In Progress

Такс

Во-первых, поле 03 очень древнее - на это намекает цифра 03, то бишь 2003 год. Что брать - ff19sb. Как это делать:
export GMXLIB=/home/domain/data/zlobin/gmxlib

И потом pdb2gmx -ff amber19sb

Во-вторых, по поводу этой самой ошибки

Посмотрите внимательно на остаток, идущий 38-ым в PDB. Вероятно, каких-то атомов попросту не хватает (его номер исходно может быть и не таким, но Громаксу на это пофигу, ему важен именно номер по порядку. Чтобы не запутаться, можно исходно перенумеровать стартовый PDB, чтобы номера остатков шли с 1. gmx editconf -f <input.pdb> -o <output.pdb> -resnr 1. Как с этим бороться - либо руками в PyMol (Wizard > Mutagenesis и бахнуть ту аминку, которая там и должна быть. Ротамер выбрать на свой вкус). Либо есть автоматические инструменты, типо PDBFixer для питона.

В-третьих, кристаллическую воду не надо убирать. Потом ждать, что сгенерированная зальется в места, где должна быть структурная вода - вечность.

#6 - 11.10.2021 21:17 - Anastasia Rachkova

Взяла новое поле и пофиксила глутамин 38 (pdbfixer'ом), команда:
gmx pdb2gmx -ff amber19sb -f 3ezn.pdb -o 3ezn_processed.gro
Вылезла ошибка "Fatal error:
Atom HB3 in residue MET 1 was not found in rtp entry NMET with 19 atoms
while sorting atoms." Буду игнорировать водороды:
gmx pdb2gmx -ff amber19sb -f 3ezn.pdb -o 3ezn_processed.gro -ignh - сработало!
Надо проверить, что там вообще наделалось: в нормальной ли (неанионной форме аспартат и глутамат -> в pdb2pqr посчитать pKa остатков) и в какой таутомерной форме гистидины, хотя бы внутренние.

#7 - 27.10.2021 12:24 - Alexander Zlobin

Привет, апдейтни по подготовке систем, пожалуйста. Когда смогу их посмотреть и обсудить?
И следи за своевременным обновлением дедлайнов с пояснениями.

#8 - 28.10.2021 01:21 - Anastasia Rachkova

- Due date changed from 04.10.2021 to 30.10.2021

У меня небыстро продвигается с ручной обработкой гистидинов и аспарагинов с глутаминами. Хочу к 30 ноября доделать наконец и попробовать запустить моделирование, посмотреть, не сломается ли ничего.
Если можно, обсудила бы с вами, что получилось, в понедельник или вторник (1 или 2 ноября).

#9 - 28.10.2021 09:48 - Alexander Zlobin

Подготовка корректных систем - половина успешности моделирования, так что да, каким бы ни было унылым, делать приходится.

Да, конечно, как только дойдете до добавления ионов, дайте ссылку на эти файлы.

#10 - 31.10.2021 03:06 - Anastasia Rachkova

У меня какой-то фейл с тем, чтобы вращать остатки амидов, делаю это не по-русски. Вы не подскажете еще раз, пожалуйста, что вы использовали, чтобы только их поворачивать?

#11 - 31.10.2021 17:51 - Alexander Zlobin

Режим editing в Pymol
Ctrl + ПКМ, щелчок по связи и зажать - будет вращение той группы, к которой ближе вы щелкнули.

#12 - 01.11.2021 14:25 - Anastasia Rachkova

Спасибо! pdb сделала, двигаюсь дальше.

#13 - 02.11.2021 19:10 - Anastasia Rachkova

- File фейл.jpg added
- File 3ezn_rdpg.gro added
- File RDPG_CHARMM.prm added
- File RDPG_GMX.itp added

Сделала общий файл "3ezn_rdpg.gro" с координатами.
Потом делала ячейку и заливала ее водой:
gmx editconf -f 3ezn_rdpg.gro -o 3ezn_rdpg__cell.gro -bt cubic -d 1.0
gmx solvate -cp 3ezn_rdpg__cell.gro -cs spc216.gro -p topol.top -o 3ezn_rdpg_solv.gro

Не уверена, что стоило делать ее такой формы, в мануале был додекаэдр, но мне показалось, что это может быть незачем, в статьях (https://www.frontiersin.org/articles/10.3389/fmolb.2018.00065/full
https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC6438627/) делали кубик и я попробовала тоже.
gmx solvate -cp 3ezn_rdpg__cell.gro -cs spc216.gro -p topol.top -o 3ezn_rdpg_solv.gro

Дальше хотела бахнуть ионы:
gmx grompp -f ions.mdp -c 3ezn_rdpg_solv.gro -p topol.top -o ions.tpr
Но потерпела поражение.

Может, использовала какие-то совсем не те файлы...

- Оставлю себе тут пару ссылок на статьи про моделирование ***

[[https://www.ncbi.nlm.nih.gov/pmc/articles/PMC4030948/]]
[[https://tbiomed.biomedcentral.com/articles/10.1186/1742-4682-11-52]]

#14 - 03.11.2021 13:05 - Alexander Zlobin

А путь-то какой к файлам? Где они лежат?

#15 - 10.11.2021 03:39 - Anastasia Rachkova

PDB Burchodelii 3ezn - удалила одну из цепей, гликоли удалила, воду оставила.

pdbfixer 3ezn_Achain.pdb --output=3ezn.pdb --add-atoms=all
gmx pdb2gmx -ff amber19sb -f 3ezn.pdb -o 3ezn_processed.gro -ignh
gmx editconf -f 3ezn_processed.gro -o 3ezn_processed.pdb

Дальше опять ручками поправляла гистидины, аспарагины и глутамины. Даже полезно второй раз с этим потренироваться.
alter (sele), resn="HID"

gmx editconf -f 3ezn_his.pdb -o 3ezn_his.gro

В файле 3ezn_rdpg.gro совместила белок и лиганд, изменила количество строк. Также внесла изменения в topol.top (только itp файл, никаких prm).

gmx editconf -f 3ezn_rdpg.gro -o 3ezn_rdpg_cell.gro -bt cubic -d 1.0
gmx solvate -cp 3ezn_rdpg_cell.gro -cs spc216.gro -p topol.top -o 3ezn_rdpg_solv.gro
Тут повозилась с тем, что у меня itp файл был немножко кривоват - исправила вручную.

gmx grompp -f ions.mdp -c 3ezn_rdpg_solv.gro -p topol.top -o ions.tpr - ошибка,
"number of coordinates in coordinate file (3ezn_rdpg_solv.gro, 121106)
does not match topology (topol.top, 4276)"

#16 - 10.11.2021 19:12 - Anastasia Rachkova

Итоги встречи 10 ноября:
-текстовые файлы надо всегда смотреть и проверять ручками
-чтобы юзать поле, можно просто один раз за сессию сделать export нужной папки
-для новой попытки создать новую папку без ненужных файлов
Про планы на ближайшее время:
-взять pdb 3GP5, в котором уже есть 2,3-дифосфоглицерат. На первый взгляд, его заряд -5 и водородов нигде нет. Туда подобавлять воду. Потом в текстовом файле поменять гистидин на H2E.
-мне получить с помощью acpype параметры для 2-PG, 2,3-PG, 3-PG. Можно рисовать в Avogadro, есть на сервере.
-А.С. взять параметры для фосфогистидинов и переделать их под поле 19 года.

#17 - 13.11.2021 12:25 - Alexander Zlobin

Фосфорилированные остатки в поле добавил. Теперь достаточно остатку иметь нужное название и атомы фосфора и фосфорильных кислородов. Варианты гистидинов: H1E, H2E, H1D, H2D. Буква - к какому азоту крепится фосфат, цифра - заряд на фосфате. Нам нужен H2D.

#18 - 16.11.2021 01:31 - Anastasia Rachkova

Для 2,3-фосфоглицератов заряд ставила -5, для остальных -4. Рисовала все ручками в Авогадро.
Файлы лежат в папке /home/domain/rachkovanastya/PGM_start

#19 - 10.12.2021 17:36 - Anastasia Rachkova

Файл с фосфогистидином сделала, но на команде *pdb2gmx -ff amber19sb -f 3ezn.pdb -o 3ezn_processed.gro -ignh* ложится, пдб фиксером не фиксится. попробую что-то сделать еще.
лежит в PGM_start, 3PG5_ph_his.pdb

#20 - 11.12.2021 13:59 - Alexander Zlobin

С чем конкретно ложится?

#21 - 13.12.2021 14:43 - Anastasia Rachkova

Забавно, когда делала первый раз - у него была ошибка на Met1, сейчас такая:
Fatal error:
Atom O3 in residue HIS 9 was not found in rtp entry CHIE with 18 atoms
while sorting atoms.

#22 - 13.12.2021 14:47 - Alexander Zlobin

Ну он тут все говорит прямо. В его рецепте для остатка HIE (в данном случае Ц-концевого HIE - кстати, проверь, должен ли он быть Ц-концевым, может там закрался лишний TER в файл) нет атома с именем O3. И действительно не должно быть.

При этом в PDB файле он, видимо, есть.

Открываю и вижу:

```
ATOM     72  N   HIS A   9       4.651 -27.787  32.625  1.00 13.38           N
ATOM     73  CA  HIS A   9       4.325 -27.748  34.022  1.00 14.08           C
ATOM     74  C   HIS A   9       2.943 -28.347  34.257  1.00 14.64           C
ATOM     75  O   HIS A   9       2.086 -28.343  33.390  1.00 13.13           O
ATOM     76  CB  HIS A   9       4.350 -26.304  34.565  1.00 14.62           C
ATOM     77  CG  HIS A   9       3.346 -25.393  33.921  1.00 14.21           C
ATOM     78  CD2 HIS A   9       3.446 -24.561  32.849  1.00 14.41           C
ATOM     79  ND1 HIS A   9       2.054 -25.288  34.370  1.00 16.06           N
ATOM     80  CE1 HIS A   9       1.403 -24.419  33.618  1.00 17.01           C
ATOM     81  NE2 HIS A   9       2.217 -23.975  32.675  1.00 13.92           N
TER
HETATM   82  O3  HIS A   9       3.248 -21.563  31.620  1.00 16.33           O
HETATM   83  O2  HIS A   9       2.001 -24.090  30.109  1.00 17.09           O
HETATM   84  O1  HIS A   9       0.261 -22.293  32.290  1.00 17.35           O
HETATM   85  P   HIS A   9       1.669 -22.473  31.040  1.00 17.72           V
```

Видимо, это должен быть быть фосфогистидин. Но он называется не HIS и не HIE. Нужно дать ему его имя (H2E, H2D, что-то такое же было?)

Во-сторых, между атомами закрался TER, что командует громаксу разорвать цепь. Его нужно отсюда убрать.

#23 - 13.12.2021 15:49 - Anastasia Rachkova

Интересно, когда я пофиксила pdbfixer'ом созданный мною файл, там реально получился какой-то треш. Сейчас пробую сделать заново, но пока там тирозином и не пахнет, откуда он вообще взялся.

#24 - 13.12.2021 16:02 - Alexander Zlobin

Каким тирозином?... Я что-то совершенно запутался. Не надо использовать никакой pdbfixer, он ничего не знает про фосфогистидины.

#25 - 15.12.2021 22:42 - Anastasia Rachkova

- File Молекулярное моделирование каталитического механизма фосфоглицерат мутазы.png added

Добрый вечер! Пишу про сроки проекта. На самом деле я не так уж и отклонилась от исходного плана: в декабре сделать стартовые системы для обоих изомеров. В январе провести собственно моделирование реакции (двух вариантов), переделать, если все взорвется и сломается. В феврале - анализ результатов, сравнение скорости для двух изомеров. Я думаю, что успеть это сделать реально, но необходимо не допускать больше сидения на одном этапе месяц без продвижений.
Такое замедление в ноябре и начале декабря можно объяснить тем, что я уезжала в Сириус, а потом много тупила и еще и не спрашивала сразу, если нужна была помощь.
Меры пресечения такого:
Два раза в неделю в независимости от наличия вопросов писать тут (или в другой системе, которая будет) отчет по выполненной части работы (как минимум для себя).
Задавать вопросы вам или в общую беседу сразу по мере поступления, если не могу их решить сама за вечер.

#26 - 15.12.2021 22:45 - Anastasia Rachkova

- File 3GP5_ph_bond_1.pdb added

А еще я разобралась-таки с исходным pdb. Исправила название атома, убрала этот TER и сделала фосфатную группу частью основания. Но gromax снова выдал ошибку. Кажется, у него проблемы с тем, что он не может в своих файлах найти основание H2E.

Fatal error:
The residues in the chain MET1--ALA248 do not have a consistent type. The
first residue has type 'Protein', while residue H2E9 is of type 'Other'.
Either there is a mistake in your chain, or it includes nonstandard residue
names that have not yet been added to the residuetypes.dat file in the GROMACS
library directory. If there are other molecules such as ligands, they should
not have the same chain ID as the adjacent protein chain since it's a separate
molecule.

#27 - 15.12.2021 22:52 - Anastasia Rachkova

С тирозином это я и сама запуталась, извините. А вот с O3 не поняла, там же действительно 3 кислорода, почему не должно быть O3?

#28 - 16.12.2021 16:57 - Alexander Zlobin

Потому что у остатка HIE нет никаких кислородов. Они есть у остатка H2E. Это совсем разные остатки.
Сейчас ошибка говорит, что H2E не является белком. Как он это понимает? Есть в папке на один уровень выше папки с полем файлик residuetypes.dat. Там нужно прописать то. что является белком. Я это действительно не прописал раньше. Сейчас добавил, попробуй заново.

По поводу плана -- получим модели до 30 декабря, никаких проблем. Но да, нужно не терять темпа работы. Сириус меня вообще никак не касается, это вопрос лично твоих приоритетов. В общий чатик, конечно, стоит писать) А еще читать, что там есть, очень много карьерно значимых вещей там обсуждается. Все, что за гранью конкретной курсовой, но про карьеру.

Я также прошу выделить на работу в лаборатории конкретные временные слоты и сообщить их мне. Например "понедельник, 18-20, среда, 15-16", в таком духе. Один набор до конца января, и второй -- на следующий семестр, как станет известно расписание.

#29 - 16.12.2021 23:30 - Anastasia Rachkova

Точное время для лабораторной работы до конца января:
Понедельник 12:30 - 14:00
Среда 14:00 - 16:30
Суббота либо 14:00 - 16:00, либо 19:00 - 21:00

#30 - 16.12.2021 23:32 - Anastasia Rachkova

Попробовала еще раз, ошибка следующая:

Fatal error:
Atom O1 in residue H2E 9 was not found in rtp entry H2E with 21 atoms
while sorting atoms.

Видимо, у вас (то бишь в файлах с параметрами поля) атомы кислорода в фосфатной группе называются как-то по-другому?

#31 - 17.12.2021 11:12 - Alexander Zlobin

Вы можете сами такие вещи смотреть.
Отсылаю к этой части обсуждения: export GMXLIB=/home/domain/data/zlobin/gmxlib
Это путь к полям. Внутри есть папка amber19sb, в ней есть aminoacids.rtp

внутри него есть такие строчки:

```
 [ H2E ]
  [ atoms ]
     N    N          -0.5163      1
     H    H           0.2936      2
    CA    CX          0.330527    3
    HA    H1          0.031846    4
    CB    CT         -0.410313    5
   HB1    HC          0.101457    6
   HB2    HC          0.101457    7
    CG    CC          0.240309    8
   ND1    NA         -0.372805    9
   HD1    H           0.355424   10
```

```
CE1    CR          0.039056   11
HE1    H5          0.212475   12
NE2    NA         -0.052173   13
CD2    CW         -0.225382   14
HD2    H4          0.2656     15
 P     P          1.349034   16
O1P    OO         -0.899504   17
O2P    OO         -0.899504   18
O3P    OO         -0.899504   19
 C     C           0.5366     20
 O     O          -0.5819     21
```

Соответственно атомы кислорода это O1P O2P O3P

#32 - 18.12.2021 21:59 - Anastasia Rachkova

О, спасибо большое за инструкцию!
Я сделала рабочий файл-таки, пришлось сначала фиксить его без фосфогистидина, а потом уже добавлять фосфогистидин.

#33 - 22.12.2021 14:18 - Anastasia Rachkova

Локально (только на этой неделе) переношу время работы над проектом с сегодня (среда) но четверг.

#34 - 25.12.2021 16:31 - Anastasia Rachkova

Добрый вечер!
Я продвинулась дальше, но снова наткнулась на неочевидную ошибку при запуске команды:
gmx grompp -f ions.mdp -c 3GP5_solv.gro -p topol.top -o ions.tpr

```
_ERROR 1 [file ffbonded.itp, line 2373]:
  Unknown bond_atomtype nN

There was 1 note
-------------------------------------------------------
Program:     gmx grompp, version 2018.1
Source file: src/gromacs/gmxpreprocess/toppush.cpp (line 943)
Fatal error:
There was 1 error in input file(s)_
```

Эта строка в файле выглядит вот так:

```
[ dihedraltypes ] ; improper
.....
; lipid17
 cA cA cB cB 4 180.0 4.6024 2
 cA cB cB hB 4 180.0 4.6024 2
 cA oO cC oO 4 180.0 4.6024 2
 cB cD cB hB 4 180.0 4.6024 2
 cD oC cC oS 4 180.0 43.932 2
```

+ cA cC nN hN 4 180.0 4.6024 2+
cD nN cC oC 4 180.0 4.6024 2

#35 - 25.12.2021 16:35 - Anastasia Rachkova

Этот момент в файле вроде не касается даже аминоксилот и прочего, но я как-то не рискнула просто удалить эту строчку в своей копии файла, кажется, это не очень хорошо.

#36 - 29.12.2021 12:13 - Anastasia Rachkova

Важные моменты:
В файле complex.gro лучше сразу ставить атомы лиганда сразу после белка и перед водой, все атомы должны идти друг за другом, а атомы лиганда еще и в том же порядке, что в файле **лигагд**.itp. Еще в 1ой строке не забываем менять кол-во атомов всего (плюсуем атомы лиганда)
В файл topol.top добавляем
; Include ligand topology
#include "RthreePG_GMX.itp"
в начале, сразу после
; Include forcefield parameters
#include "amber19sb.ff/forcefield.itp"
А еще в молекулс добавляем лиганд

; Compound #mols
Protein_chain_A 1
R3PG 1
SOL 27

При исполнении **gmx grompp -f ions.mdp -c 3GP5_cell.gro -p topol.top -o ions.tpr** возникла проблема с тем, что атом лиганда h1 уже был записан в поле ранее, я просто переименовала его в файлах RthreePG_GMX.itp и complex.gro

gmx genion -s ions.tpr -o 3GP5_ions.gro -p topol.top -pname NA -nname CL -neutral - выбрала группу 15 (SOL)

#37 - 03.01.2022 15:50 - Anastasia Rachkova

При выполнении
gmx grompp -f em.mdp -c 3GP5_ions.gro -p topol.top -o em.tpr
возникла сдедующая ошибка:
Fatal error:
Something is wrong in the coordinate formatting of file 3GP5_ions.gro. Note
that gro is fixed format (see the manual)
Наверное, единственное, где могли бы быть проблемы, это последние строки, которые обновлялись при добавлении ионов:
267SOL OW 3992 5.418 3.642 2.514
267SOL HW1 3993 5.500 3.642 2.572
267SOL HW2 3994 5.337 3.642 2.572
268SOL OW 3995 5.746 4.095 2.983
268SOL HW1 3996 5.828 4.095 3.041
268SOL HW2 3997 5.746 4.176 2.925
269SOL OW 3998 6.368 4.124 4.160
269SOL HW1 3999 6.450 4.124 4.217
269SOL HW2 4000 6.368 4.042 4.102

270NA NA 4001 5.503 2.427 3.140
271NA NA 4002 4.199 3.078 3.688
272NA NA 4003 5.995 3.288 3.706
273NA NA 4004 5.808 2.242 4.209
274NA NA 4005 5.324 4.035 4.129
275NA NA 4006 5.000 1.807 3.258
276NA NA 4007 4.777 3.340 3.912
8.88820 8.88820 8.88820
Путь к этому файлу в моей папке: /home/domain/rachkovanastya/PGM_start/3GP5_ions.gro

#38 - 10.01.2022 02:35 - Anastasia Rachkova

Что есть:
прочитала статьи.
для R-изомера еще раз заново сделала файл белка, поправила руками Asn, Gln, His. Сделала комплекс, добавив лиганд с координатами из его комплекса с белком. Сделала ячейку (d = 0,5), залила водой, добавила ионы. Минимизация энергии пошла, но прервалась из-за неправильного положения какой-то молекулы воды (я предполагаю, какой, попробую днем поправить).
для S-изомера получила файл белка, начала делать комплекс, обнаружила, что неправильно посчитала параметры для лиганда - надо пересчитать и доделать.
Соответственно, днем 10ого - поправить воду в комплексе для R изомера и запустить минимизацию повторно. А для S изомера с новыми параметрами сделать комплекс и далее по списку.

#39 - 10.01.2022 17:59 - Anastasia Rachkova

Переделала все еще раз, подкорректировала воду, в который сомневалась в прошлый раз. Но снова при запуске gmx mdrun -v -deffnm em все ломается.
step 11: One or more water molecules can not be settled.
Check for bad contacts and/or reduce the timestep if appropriate.

Back Off! I just backed up step11b_n15.pdb to ./#step11b_n15.pdb.1#

Back Off! I just backed up step11c_n14.pdb to ./#step11c_n14.pdb.1#

Back Off! I just backed up step11c_n15.pdb to ./#step11c_n15.pdb.1#
Wrote pdb files with previous and current coordinates
tMPI error: Receive buffer size too small for transmission (in valid comm)
Aborted (core dumped)

Файл с новыми координатами стопорится на одной из добавленных молекул воды, ничем не примечательной:
ATOM 23147 OW SOL 1 50.713 47.831 12.344 1.00 0.00
ATO

Может, стоит еще уменьшить размер ячейки (чтобы минимизировать систему меньшего размера)? Или стоит просмотреть все файлы с новыми координатами в паймоле (интересно, что у меня не получилось пока их открыть) и искать глазами, где что не так встало?

#40 - 10.01.2022 19:21 - Anastasia Rachkova

Для S-изомера все получилось, с ним работала в новой папке
/home/domain/rachkovanastya/PGM_S_start

Files

фейл.jpg	100 KB	02.11.2021	Anastasia Rachkova
3ezn_rdpg.gro	329 KB	02.11.2021	Anastasia Rachkova
RDPG_CHARMM.prm	2.39 KB	02.11.2021	Anastasia Rachkova
RDPG_GMX.itp	14.1 KB	02.11.2021	Anastasia Rachkova
Молекулярное моделирование каталитического механизма фосфоглицерат мутазы.png	69 KB	15.12.2021	Anastasia Rachkova
3GP5_ph_bond_1.pdb	165 KB	15.12.2021	Anastasia Rachkova