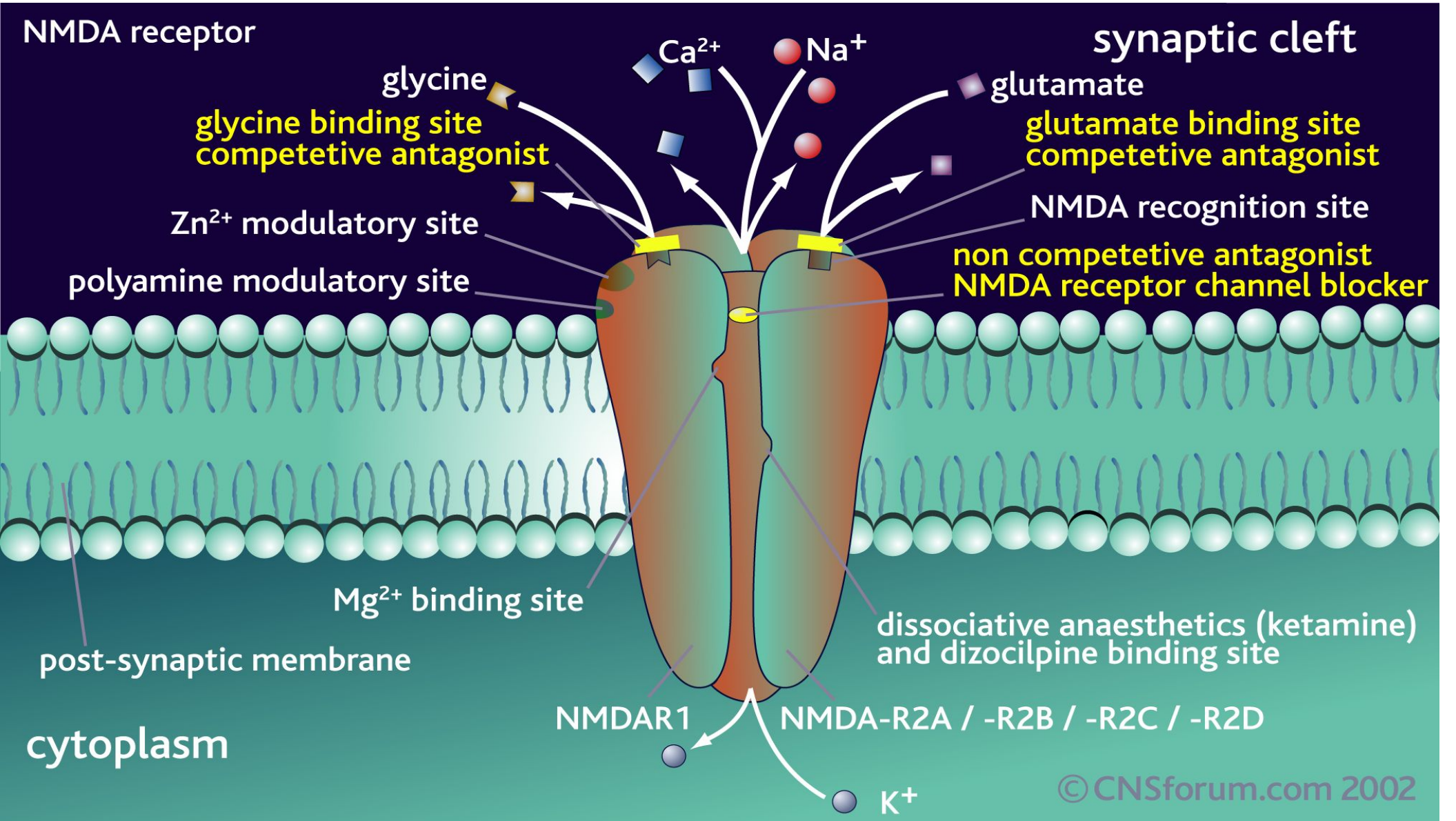


Роль антагонистов NMDA-рецепторов в развитии опухолей

Курсант 5 курса 2 факультета
рядовой Аксенов А.И.

Роль NMDA-рецепторов

- Глутамат-опосредованная передача сигнала в опухолях способствует их росту и пролиферации.
- В клетках опухолей также отмечается повышенный уровень экспрессии генов субъединиц NMDA-рецепторов.



Докинг

- Процедура, позволяющая оценить степень комплементарности молекулярной структуры в соответствующей активной полости молекулярной мишени, отвечающей за те или иные функции.

- Цель докинга

- Найти такое положение лиганда, в котором свободная энергия образования комплекса белок-лиганд будет минимальной.

Оценка результатов

- Скоринг-функция(Score) – рассчитанная энергия связывания белок-лиганд.
- $\text{Score} < -5$ ккал/моль

Biological Assembly 1 ?



3D View: [Structure](#) | [Electron Density](#) | [Ligand Interaction](#)

Global Symmetry: Asymmetric - C1 ⓘ

Global Stoichiometry: Hetero 2-mer - A1B1 ⓘ

Pseudo Symmetry: Cyclic - C2 ⓘ (3D View)

Pseudo Stoichiometry: Homo 2-mer - A2 ⓘ

[Find Similar Assemblies](#)

6OVE

Crystal structure of GluN1/GluN2A NMDA receptor agonist binding domains with glycine and antagonist, 4-propylphenyl-ACEPC

DOI: [10.2210/pdb6OVE/pdb](https://doi.org/10.2210/pdb6OVE/pdb)

Classification: **PROTEIN TRANSPORT**

Organism(s): *Rattus norvegicus*

Expression System: *Escherichia coli*

Mutation(s): No ⓘ

Deposited: 2019-05-07 Released: 2020-05-13

Deposition Author(s): Syrenne, J.T., Mou, T.C., Tamborini, L., Pinto, A., Sprang, S.R., Hansen, K.B.

Funding Organization(s): National Institutes of Health/National Institute of General Medical Sciences (NIH/NIGMS), National Institutes of Health/National Institute of Neurological Disorders and Stroke (NIH/NINDS)

Experimental Data Snapshot

Method: X-RAY DIFFRACTION

Resolution: 2.00 Å

R-Value Free: 0.216

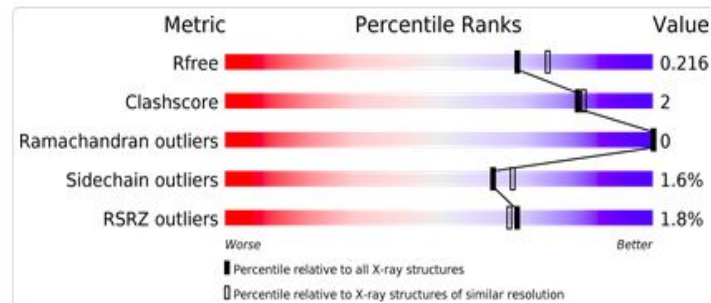
R-Value Work: 0.182

R-Value Observed: 0.184

wwPDB Validation ⓘ

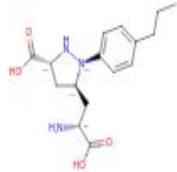
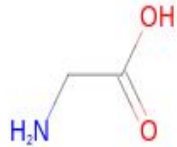
3D Report

Full Report

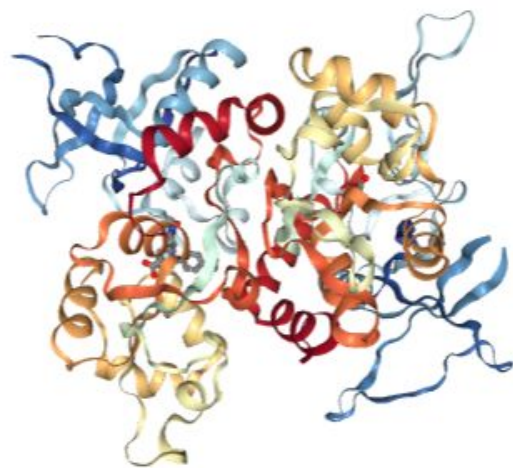


Small Molecules

Ligands **2 Unique**

ID	Chains	Name / Formula / InChI Key	2D Diagram	3D Interactions
N9D Query on N9D <input type="button" value="Download Ideal Coordinates CCD File"/> <input type="button" value="Download Instance Coordinates"/>	B	(3R,5S)-5-[(2R)-2-amino-2-carboxyethyl]-1-(4-propylphenyl)pyrazolidine-3-carboxylic acid C ₁₆ H ₂₃ N ₃ O ₄ UPNZKJBKYMIUDF-BFHXYJOUA-N		<input type="button" value="Ligand Interaction"/>
GLY Query on GLY <input type="button" value="Download Ideal Coordinates CCD File"/> <input type="button" value="Download Instance Coordinates"/>	A	GLYCINE C ₂ H ₅ N O ₂ DHMQDGOQFOQNFH-UHFFFAOYSA-N		<input type="button" value="Ligand Interaction"/>

Note: Use your mouse to drag, rotate, and zoom in and out of the structure. Mouse-over to identify atoms and bonds. Mouse controls documentation.



View Density Maps View

Structure View Documentation

Assembly ? Bioassembly 1

Model ? Model 1

Symmetry ? None

Style ? Cartoon

Color ? Rainbow

Ligand ? Ball & Stick

Quality ? Automatic

Water ? Ions ? Hydrogens ? Clashes ?

Default Structure View ?

Spin ?

Center ?

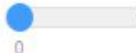
Fullscreen ?

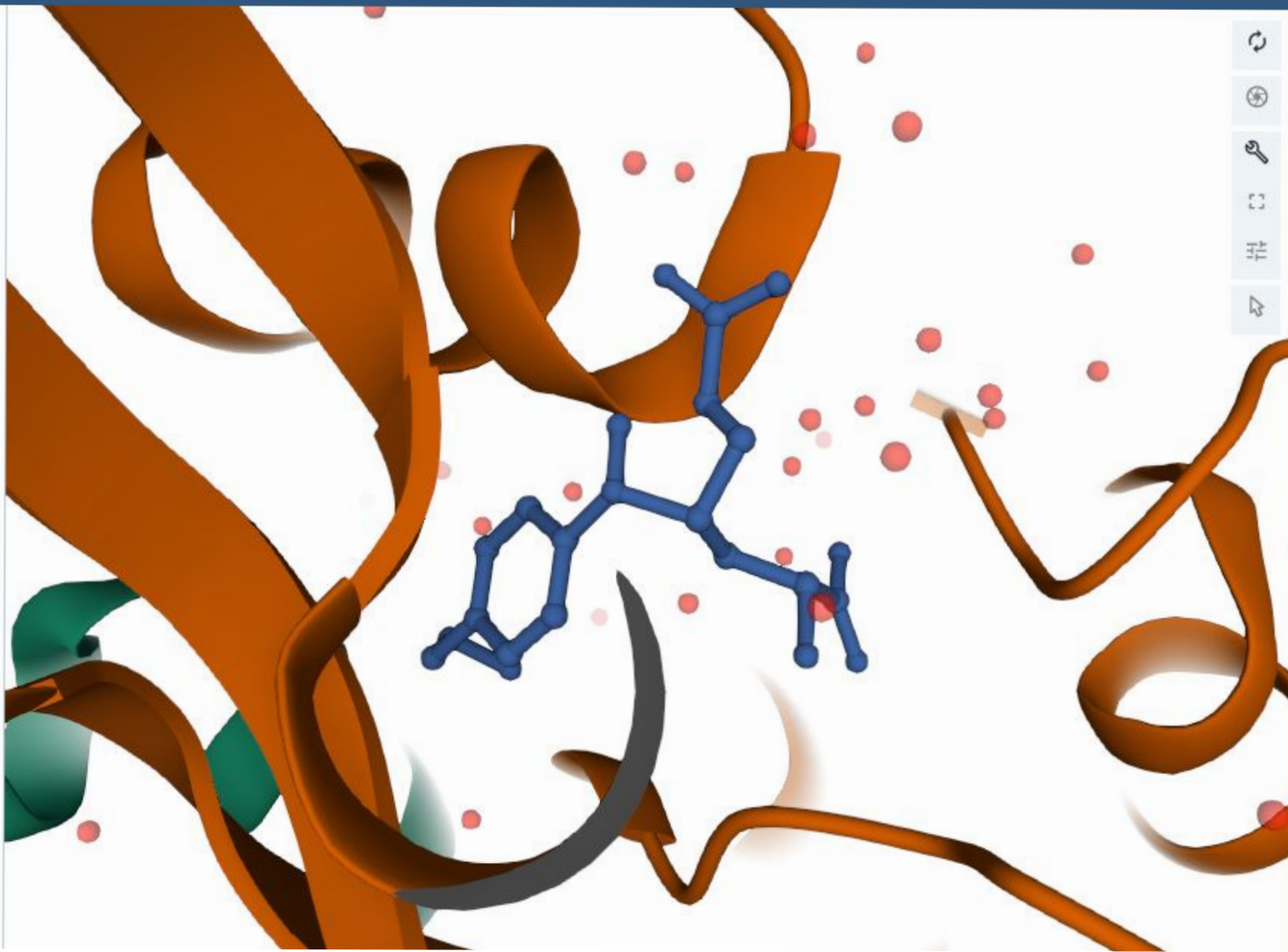
Screenshot ?

Perspective Camera

White background

Focus ?



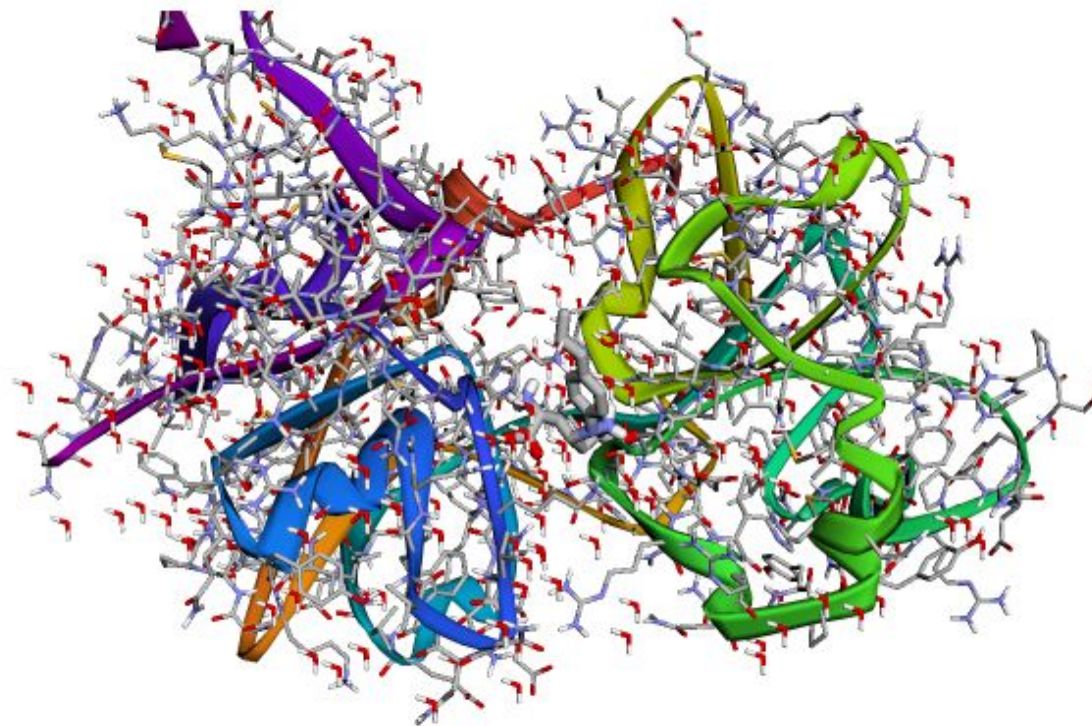


Vertical toolbar with icons for: refresh, zoom in, zoom out, pan, rotate, and zoom reset.

Right sidebar menu with the following sections:

- Asm Id 1: Author Defined Asse...
- Nothing Focused
- Measurements
- Structural Motif Search
- Components 6OVE
 - Preset + Add
 - Polymer Cartoon
 - Ligand Ball & Stick
 - Water Ball & Stick
- Unit Cell P 21 21 21
- Density
- Assembly Symmetry

Visualization



All Atoms

Surface

Mode	Affinity (kcal/mol)	Dist From Rmsd L.B.	Dist From Rmsd U.B.
1	1.6	0	0
2	3.5	1.397	2.085

Литература

- Гуреев М.А., Кадочников В.В., Порозов Ю.Б. Молекулярный докинг и его верификация в контексте виртуального скрининга. – СПб: Университет ИТМО, 2018. – 50с.
-