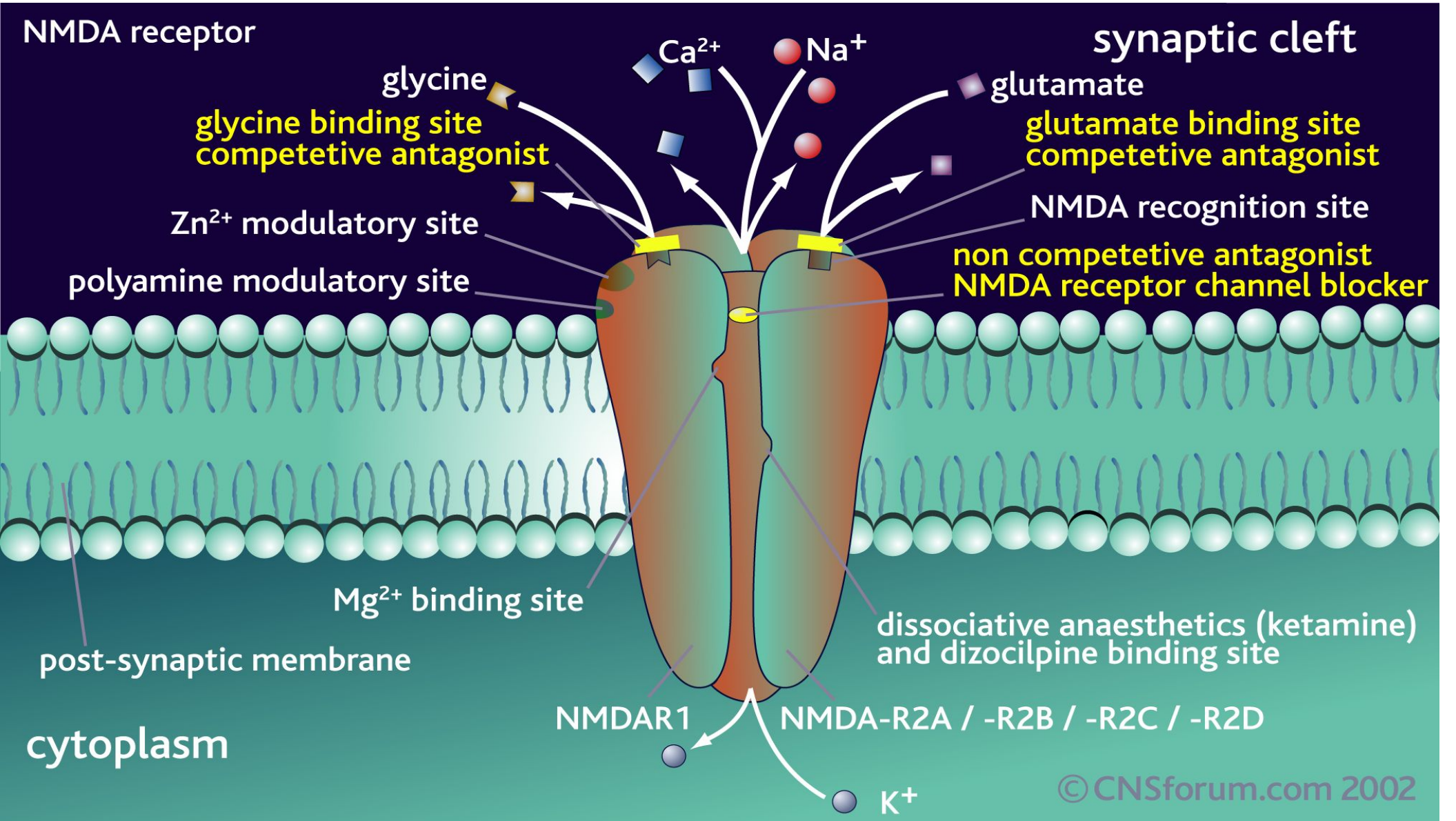


Роль антагонистов NMDA-рецепторов в развитии опухолей

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

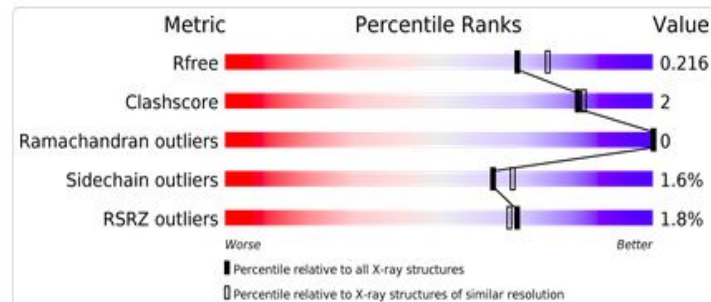
R-Value Work: 0.182

R-Value Observed: 0.184

wwPDB Validation ?

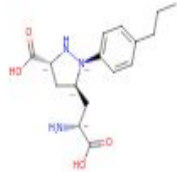
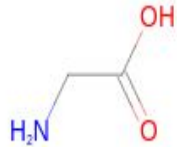
[3D Report](#)

[Full Report](#)

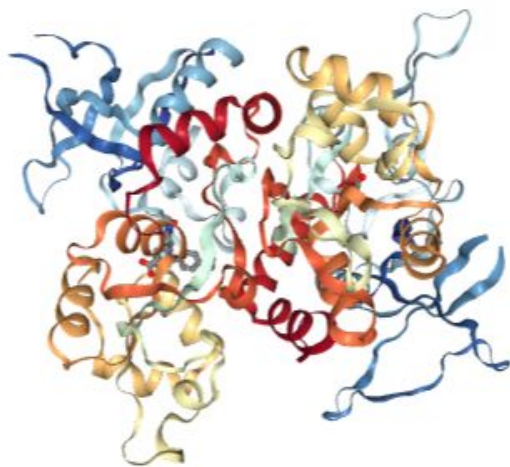


Small Molecules

Ligands **2 Unique**

ID	Chains	Name / Formula / InChI Key	2D Diagram	3D Interactions
N9D Query on N9D Download Ideal Coordinates CCD File 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		Ligand Interaction
GLY Query on GLY Download Ideal Coordinates CCD File Download Instance Coordinates	A	GLYCINE C ₂ H ₅ N O ₂ DHMQDGOQFOQNFH-UHFFFAOYSA-N		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 ?

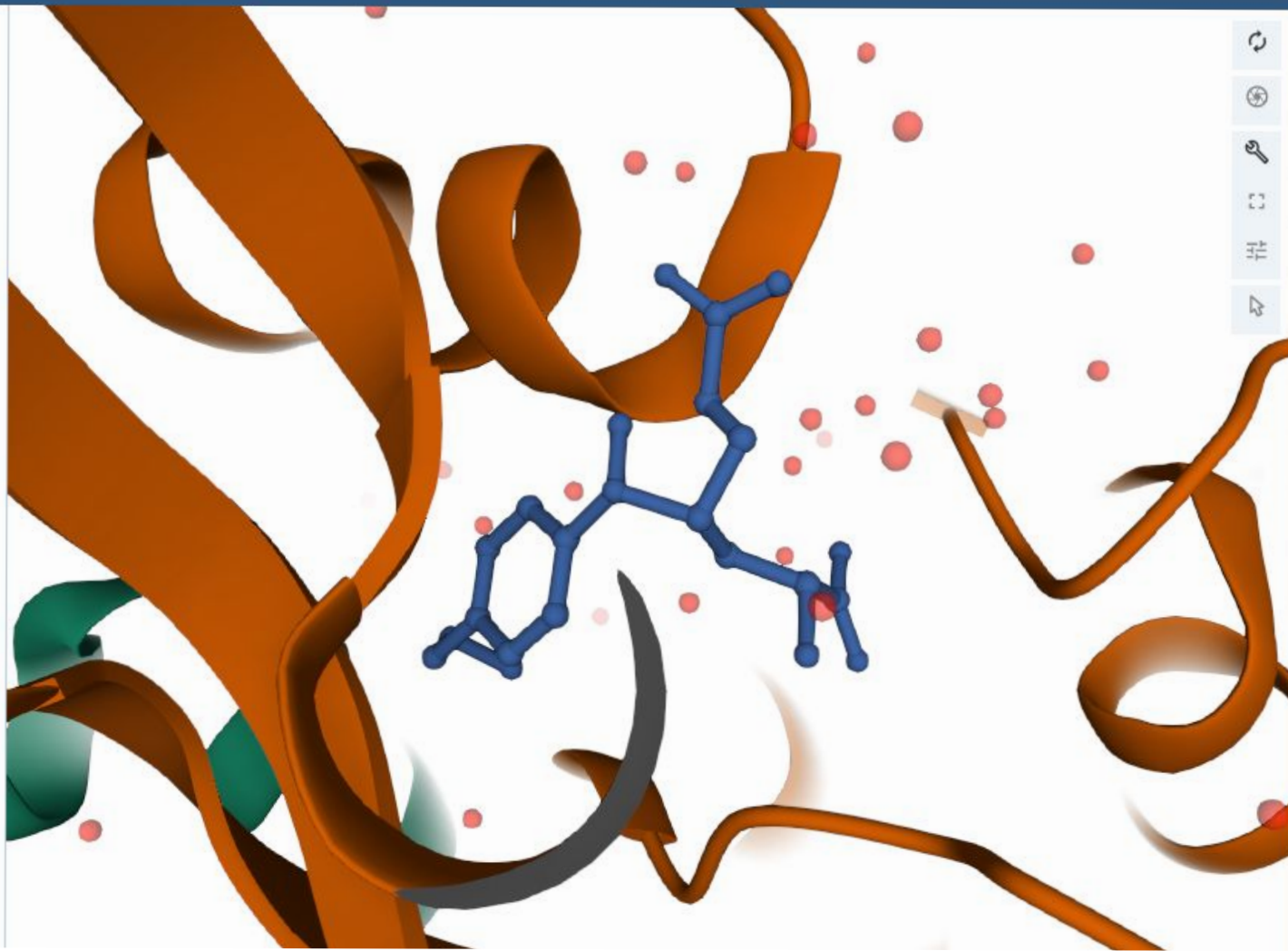
Perspective Camera

White background

Focus ?



0



Interaction toolbar with icons for: refresh, zoom, pan, rotate, zoom in, zoom out, zoom reset

Assembly Information: Asm Id 1: Author Defined Asse...

Nothing Focused

Measurements

Structural Motif Search

Components 6OVE

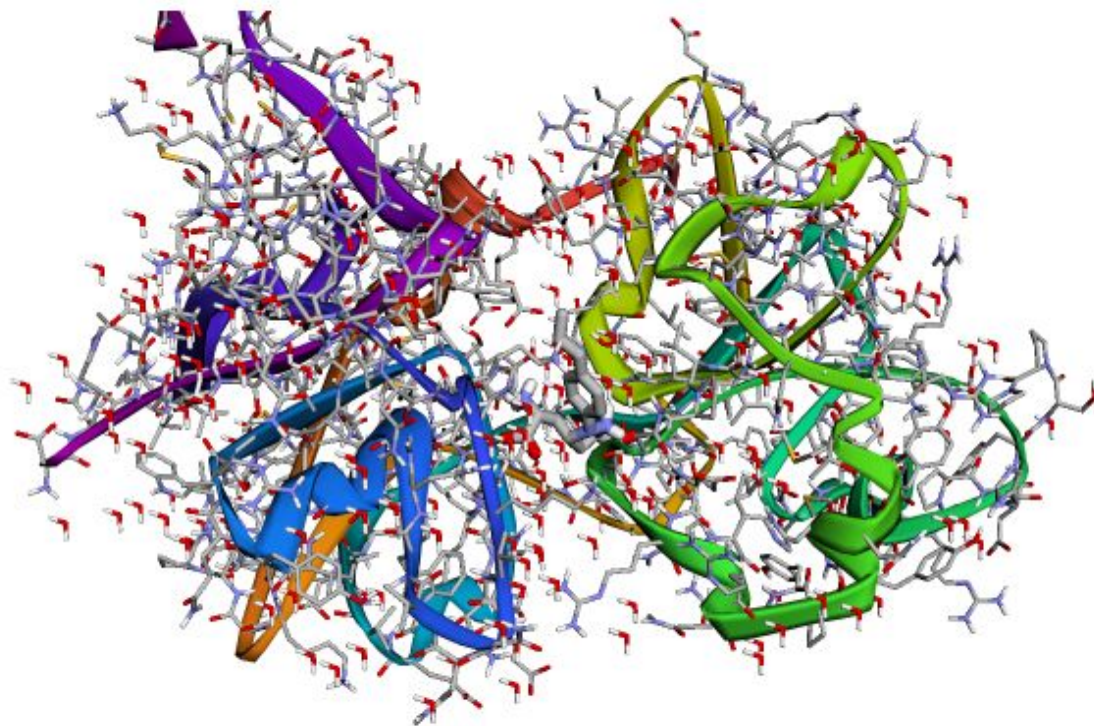
Preset	+ Add	Filter	Refresh
Polymer	Cartoon	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Ligand	Ball & Stick	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>
Water	Ball & Stick	<input type="checkbox"/>	<input type="checkbox"/>

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.
-