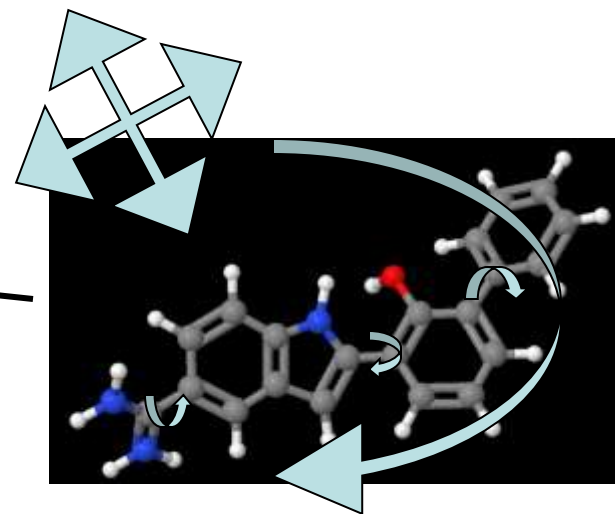
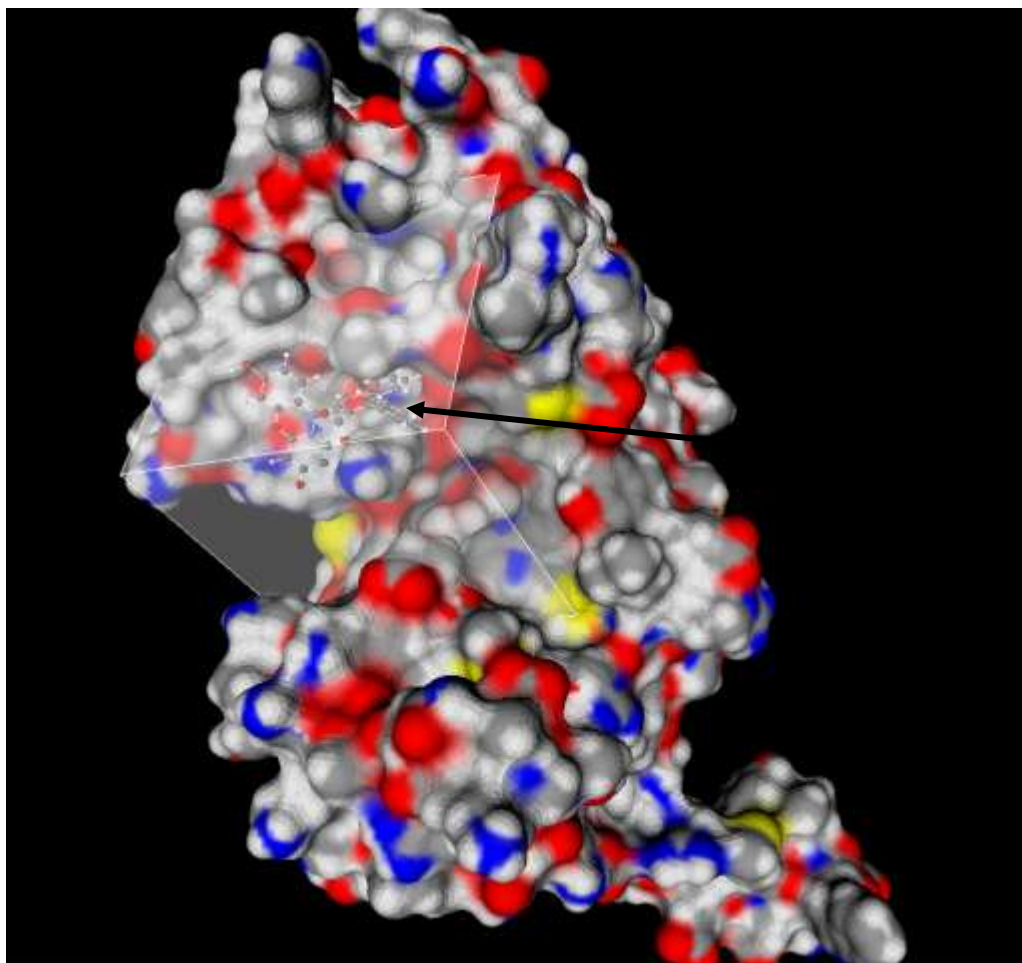


Молекулярный докинг: практика

31.03.2016

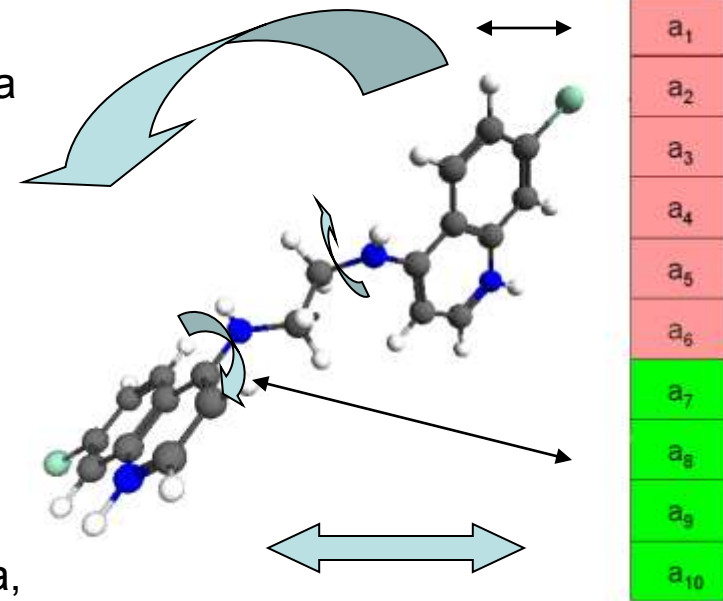
НИВЦ МГУ

Докинг: позиционирование ингибитора в активном центре белка-мишени и вычисление константы связывания ингибитора с белком



Докинг: основные положения

- **Цель:** найти такое положение(-ия) лиганда, в котором свободная энергия образования комплекса белок-лиганд будет минимальна.
- **Свободная энергия связывания** рассчитывается в силовом поле (**MMFF94**).
- **Алгоритмы поиска глобального минимума** функции энергии связывания: систематические, эвристические (генетический алгоритм)
- **Упрощения, применяемые в докинге:**
- **Сеточный докинг:** осуществляется в куб докинга, охватывающий активный центр белка-мишени. В этом кубе в узлах трехмерной сетки записаны потенциалы взаимодействия атомов лиганда с атомами белка.
- Расчет потенциалов в силовом поле **MMFF94**.
- При докинге возможны **вращения вокруг торсионных степеней свободы** лиганда, а также вращение и трансляция лиганда как целого.
- Длины связей и валентные углы лиганда остаются неизменными.
- Жесткая структура белка



Что нужно для проведения моделирования?

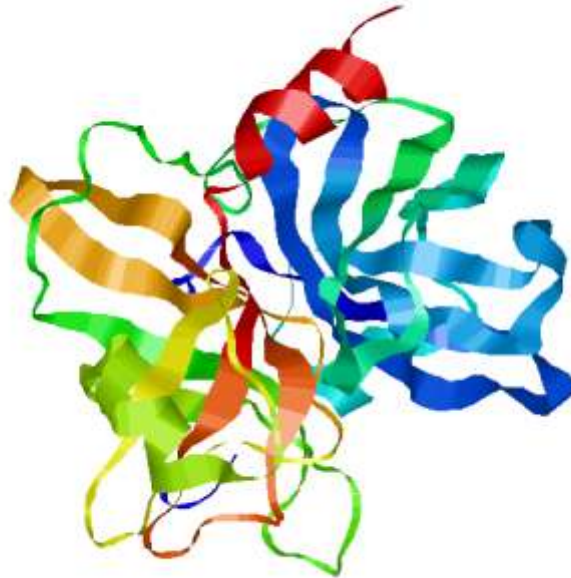
- 3D структура белка
- Структура лиганда
- Программа докинга

} Требуется
подготовка

3D-структура белков и комплексов белок-лиганд

Protein Data Bank - PDB:

<http://www.rcsb.org/pdb/home/home.do>



Файл белка записан в формате pdb.
Это текстовый формат

Structure Summary

3D View

Annotations

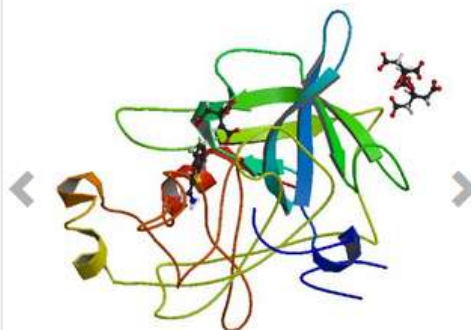
Sequence

Sequence Similarity

Structure Similarity

Experiment

Biological Assembly 1 ?



• •

View in 3D: JSmol or PV (in Browser)

Standalone Viewers

Simple Viewer Protein Workshop
Ligand Explorer Kiosk Viewer

Protein Symmetry: Asymmetric (View in 3D)

Protein Stoichiometry: Monomer

Biological assembly 1 assigned by authors and
generated by PISA (software)

Macromolecule Content

- Unique protein chains: 2

1C5W

STRUCTURAL BASIS FOR SELECTIVITY OF A SMALL MOLECULE, S1-BINDING,
SUB-MICROMOLAR INHIBITOR OF UROKINASE TYPE PLASMINOGEN ACTIVATOR

DOI: 10.2210/pdb1c5w/pdb

Classification: [BLOOD CLOTTING](#)

Deposited: 1999-12-22 Released: 2000-12-22

Deposition author(s): [Katz, B.A.](#), [Mackman, R.](#), [Luong, C.](#), [Radika, K.](#), [Martelli, A.](#), [Sprengeler, P.A.](#), [Wang, J.](#), [Chan, H.](#), [Wong, L.](#)Organism: [Homo sapiens](#)

Expression System: Pichia pastoris, Pichia pastoris

Mutation(s): 1

Structural Biology Knowledgebase: 1C5W (1 model >23 annotations) [SBKB.org](#)

Display Files

Download Files

Experimental Data Snapshot

Method: X-RAY DIFFRACTION

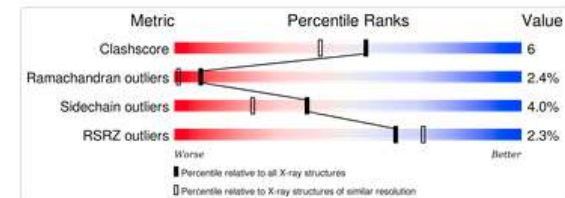
Resolution: 1.94 Å

R-Value Free: 0.211

R-Value Work: 0.177

wwPDB Validation

Full Report



Literature

Download Primary Citation

Structural basis for selectivity of a small molecule, S1-binding, submicromolar inhibitor of urokinase-type plasminogen activator.

[Katz, B.A.](#), [Mackman, R.](#), [Luong, C.](#), [Radika, K.](#), [Martelli, A.](#), [Sprengeler, P.A.](#), [Wang, J.](#), [Chan, H.](#), [Wong, L.](#)

(2000) Chem.Biol. 7: 299-312

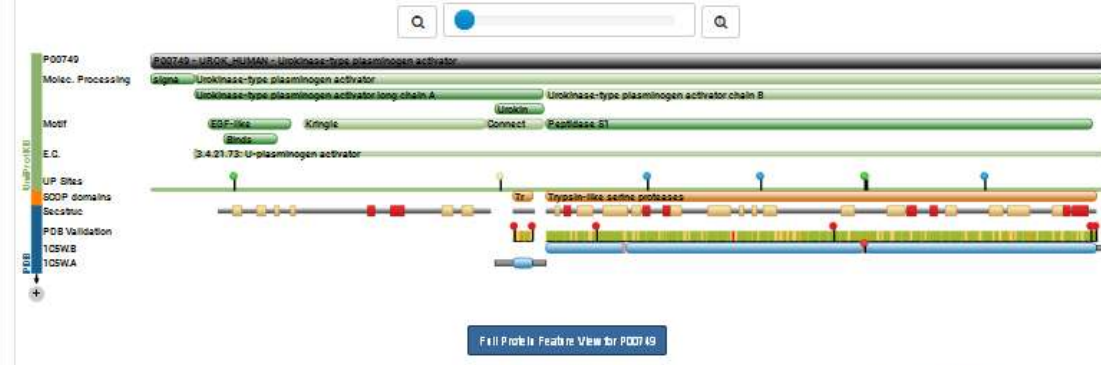
Classification: [BLOOD CLOTTING](#)[Sequence Display for IC5W](#)

Total Structure Weight: 32014.25

Macromolecule Entities

[Toggle Protein Feature View](#)

Molecule	Chains	Length	Organism	Details
PROTEIN (UROKINASE-TYPE PLASMINOGEN ACTIVATOR)	A	23	Homo sapiens	EC#: 3.4.21.73 IU BMB Fragment: SHORT CHAIN PLAU Gene View

Protein Feature View - UniProtKB AC: [P00749](#) [UniProt](#)Find similar proteins by: [Sequence](#) | [Structure](#)

Molecule	Chains	Length	Organism	Details
PROTEIN (UROKINASE-TYPE PLASMINOGEN ACTIVATOR)	B	253	Homo sapiens	EC#: 3.4.21.73 IU BMB Fragment: CATALYTIC DOMAIN Mutation: N145A PLAU Gene View

Small Molecules

Ligands **2** Unique

ID	Chains	Name / Formula / InChI Key	2D Diagram & Interactions	3D Interactions
ESI Query on ESI Download SDF File Download CCD File	B	4-iodobenzo[<i>b</i>]thiophene-2-carboxamide C ₉ H ₆ I N ₂ S YERQOXAYAFWFEJ-UHFFFAOYSA-D	 	Ligand Explorer Binding Pocket (JSmol) Electrostatics (JSmol)
FLC Query on FLC Download SDF File Download CCD File	B	CITRATE ANION C ₆ H ₅ O ₇ KRKNYBCHXYNGQX-UHFFFAOYSA-K	 	Ligand Explorer Binding Pocket (JSmol) Electrostatics (JSmol)

External Ligand Annotations

ID	Binding Affinity (Sequence Identity %)
ESI	IC50: 210 - 320 nM (99) Binding 0.8 Ki: 79.43 - 1700 nM (99 - 100) Binding 0.8

Структура PDB файла

- HEADER HYDROLASE 29-FEB-08 3CEN
- TITLE FACTOR XA IN COMPLEX WITH THE INHIBITOR N-(2-(((5-CHLORO-2-
- TITLE 2 PYRIDINYL) AMINO)SULFONYL)PHENYL)-4-(2-OXO-1(2H)-
- TITLE 3 PYRIDINYL)BENZAMIDE
- COMPND MOL_ID: 1;
- COMPND 2 MOLECULE: COAGULATION FACTOR X, HEAVY CHAIN;
- COMPND 3 CHAIN: A;
- COMPND 4 FRAGMENT: ACTIVATED FACTOR XA HEAVY CHAIN, UNP RESIDUES
- ...
- REMARK 465 MISSING RESIDUES
- REMARK 465 THE FOLLOWING RESIDUES WERE NOT LOCATED IN THE
- REMARK 465 EXPERIMENT. (M=MODEL NUMBER; RES=RESIDUE NAME; C=CHAIN
- REMARK 465 IDENTIFIER; SSSEQ=SEQUENCE NUMBER; I=INSERTION CODE.)
- REMARK 465
- REMARK 465 M RES C SSSEQI
- REMARK 465 VAL A 245
- ...
- ATOM 1 N ILE A 16 11.705 37.377 61.752 1.00 32.92 N
- ATOM 2 CA ILE A 16 12.656 38.506 61.551 1.00 32.27 C
- ATOM 3 C ILE A 16 11.976 39.658 60.826 1.00 33.91 C
- ATOM 4 O ILE A 16 11.369 39.468 59.767 1.00 34.98 O
- ...
- HETATM 1899 C3 GSH A1002 31.993 28.794 61.671 1.00 54.57 C
- HETATM 1900 O31 GSH A1002 32.704 29.765 61.357 1.00 53.99 O
- HETATM 1901 O32 GSH A1002 31.549 27.919 60.886 1.00 54.91 O
- HETATM 1902 O HOH A1003 7.445 41.220 71.922 1.00 43.77 O
- HETATM 1903 O HOH A1004 30.381 33.589 55.571 1.00 25.66 O
- ...
- CONECT 226 340
- CONECT 340 226

Форматы данных структурных файлов белков (pdb формат)

Порядковый номер атома

Идентификатор типа атома

Название аминокислоты

Номер аминокислоты

структурный фактор

х, у, z координаты

Название полипептидной цепи

ATOM	20	CA	CYS	L	1	10.413	20.329	19.019	1.00	20.41
ATOM	21	C	CYS	L	1	9.336	20.079	20.788	1.00	22.76
ATOM	22	O	CYS	L	1	8.851	20.826	21.635	1.00	23.32
ATOM	23	CB	CYS	L	1	11.808	19.997	20.426	1.00	29.45
ATOM	24	SG	CYS	L	1	12.206	20.492	22.136	1.00	24.97
ATOM	25	N	GLY	L	2	8.864	18.862	20.569	1.00	18.95
ATOM	26	CA	GLY	L	2	7.827	18.338	21.429	1.00	17.85
ATOM	27	C	GLY	L	2	6.429	18.881	21.294	1.00	19.54
ATOM	28	O	GLY	L	2	5.543	18.370	21.980	1.00	20.95
ATOM	29	N	LEU	L	3	6.225	19.915	20.468	1.00	22.46
ATOM	30	CA	LEU	L	3	4.894	20.498	20.233	1.00	19.35
ATOM	31	C	LEU	L	3	4.411	20.041	18.851	1.00	22.15
ATOM	32	O	LEU	L	3	4.921	20.485	17.823	1.00	23.57
ATOM	33	CB	LEU	L	3	4.965	22.017	20.298	1.00	21.80
ATOM	34	CG	LEU	L	3	5.355	22.546	21.677	1.00	26.59
ATOM	35	CD1	LEU	L	3	5.592	24.042	21.604	1.00	30.38
ATOM	36	CD2	LEU	L	3	4.282	22.196	22.703	1.00	18.88
ATOM	37	N	ARG	L	4	3.471	19.102	18.838	1.00	21.39
ATOM	38	CA	ARG	L	4	2.067	18.520	17.507	1.00	22.20

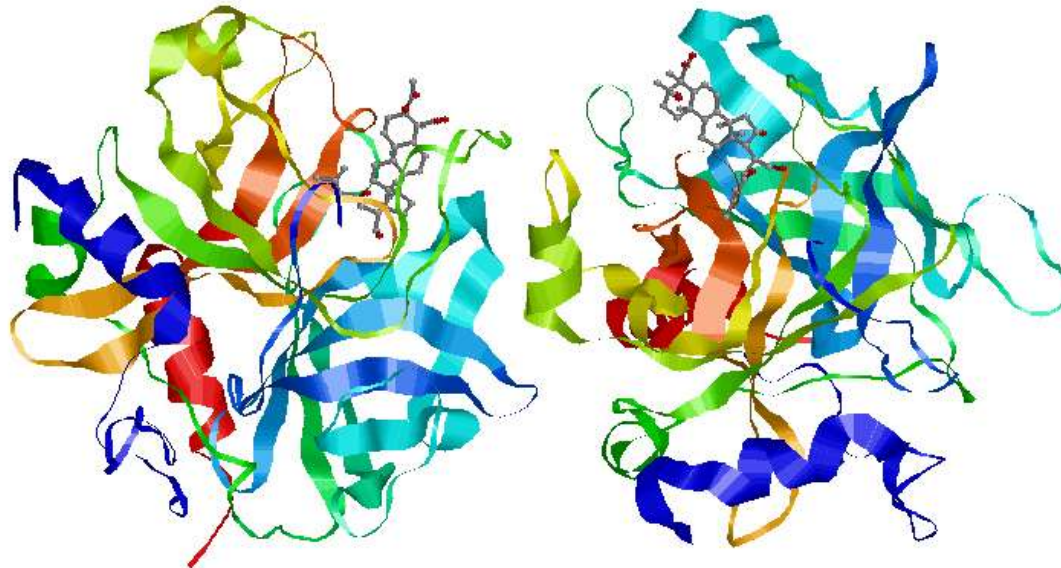
Подготовка белка к докингу

- Упрощение белка: удаление идентичных цепей

COMPND MOL_ID: 1;

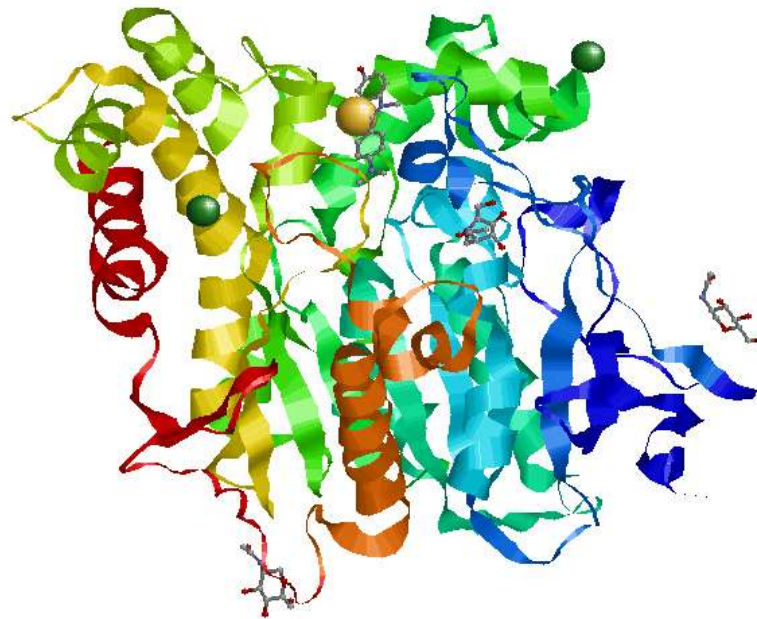
COMPND 2 MOLECULE: ALPHA THROMBIN;

COMPND 3 CHAIN: A, C;



Подготовка белка к докингу

- Удаление молекул растворителя, ионов



- HETATM 1899 C3 GSH A1002 31.993 28.794 61.671 1.00 54.57 C
- HETATM 1900 O31 GSH A1002 32.704 29.765 61.357 1.00 53.99 O
- HETATM 1901 O32 GSH A1002 31.549 27.919 60.886 1.00 54.91 O
- HETATM 1902 O HOH A1003 7.445 41.220 71.922 1.00 43.77 O
- HETATM 4314 MG MG A1542 5.741 101.507 53.668 1.00 15.70 MG
- HETATM 4315 MG MG A1543 -33.695 115.975 26.928 1.00 18.85 MG

Подготовка белка к докинг

- Вынесение молекулы лиганда в отдельный файл

•	HETATM	4252	C2	TFL	A1538	-23.673	110.345	39.838	1.00	58.49	C
•	HETATM	4253	C3	TFL	A1538	-22.828	110.885	38.766	1.00	57.69	C
•	HETATM	4254	C4	TFL	A1538	-21.598	111.612	39.071	1.00	57.23	C
•	HETATM	4255	C5	TFL	A1538	-21.193	111.815	40.453	1.00	57.35	C
•	HETATM	4256	C6	TFL	A1538	-22.056	111.287	41.487	1.00	57.41	C
•	HETATM	4257	C7	TFL	A1538	-23.256	110.577	41.192	1.00	58.06	C
•	HETATM	4258	C8	TFL	A1538	-19.879	112.563	40.862	1.00	56.94	C
•	HETATM	4259	N1	TFL	A1538	-19.262	112.874	42.095	1.00	56.39	N
•	HETATM	4260	C9	TFL	A1538	-18.039	113.559	41.996	1.00	55.11	C
•	HETATM	4261	S1	TFL	A1538	-18.900	113.131	39.501	1.00	60.72	S
•	HETATM	4262	C10	TFL	A1538	-17.688	113.771	40.545	1.00	56.81	C
•	HETATM	4263	C11	TFL	A1538	-16.480	114.436	40.154	1.00	56.31	C
•	HETATM	4264	C12	TFL	A1538	-15.580	114.890	41.187	1.00	54.88	C
•	HETATM	4265	C13	TFL	A1538	-15.903	114.689	42.575	1.00	53.38	C
•	HETATM	4266	C14	TFL	A1538	-17.102	114.036	42.965	1.00	53.58	C
•	HETATM	4267	O3	TFL	A1538	-14.283	115.593	40.838	1.00	53.25	O
•	HETATM	4268	N2	TFL	A1538	-24.909	109.578	39.579	1.00	59.13	N
•	HETATM	4269	C15	TFL	A1538	-25.391	109.278	38.209	1.00	59.81	C
•	HETATM	4270	C16	TFL	A1538	-25.723	109.046	40.700	1.00	58.11	C
•	HETATM	4271	C17	TFL	A1538	-19.852	112.527	43.422	1.00	56.73	C



Ligand.pdb

Подготовка белка к докингу

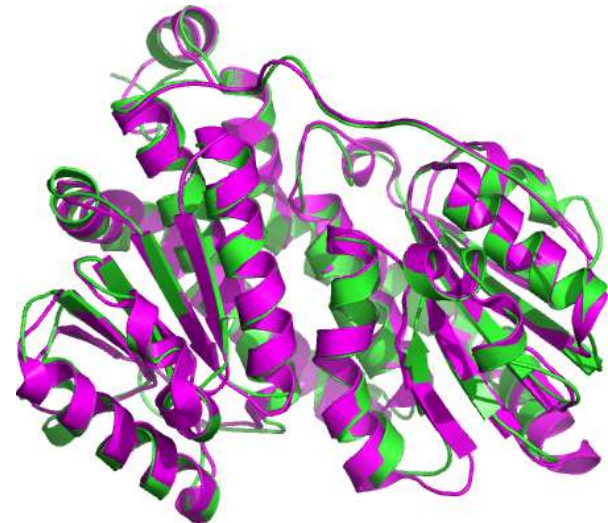
- Восстановление пропущенных аминокислотных остатков и атомов

Пропущенные аминокислотные остатки указаны в начале файла в качестве

- REMARK 465 MISSING RESIDUES

Пропущенные атомы также указываются в начале файла

- REMARK 470 MISSING ATOM



- Этот шаг можно проигнорировать, если пропущенных атомов и остатков нет, или они являются крайними аминокислотными остатками в цепях и находятся далеко от активного центра.

Подготовка белка к докинггу

- Добавление атомов водорода: рентгеноструктурный анализ не дает координат атомов водорода.
- Типизация атомов белка: присвоение каждому атому определенного типа в выбранном силовом поле.



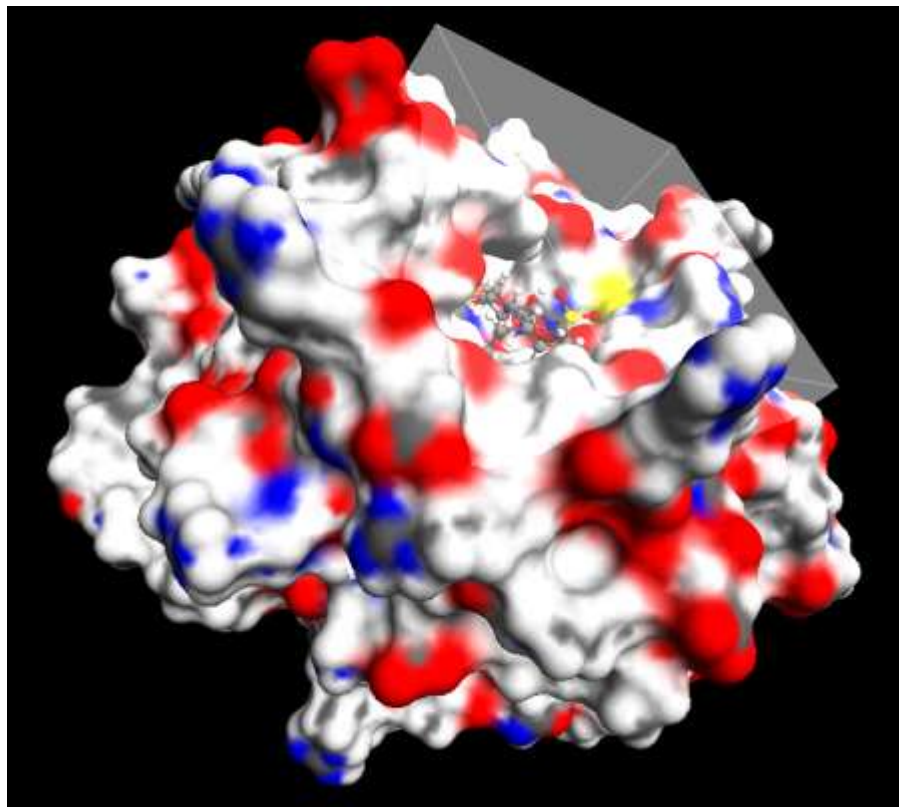
Программа подготовки белка Apline



Protein_h.pdb

Подготовка белка к докингу

- Определение области докинга – куба задочивания:
- Центр куба = геометрический центр лиганда
- Грань куба обычно составляет 22 Å



Aplite



Protein.par

Подготовка белка к докингу

- Построение сетки потенциалов: в кубе задочивания в узлах трехмерной сетки записываются потенциалы взаимодействия атомов лиганда с атомами белка.
- Сетка потенциалов вычисляется заранее: *.bin (~300 Mb)
- Сетка – это набор «сеток» потенциалов для разных типов атомов и разных типов взаимодействий
- Область докинга – куб размера 101 x 101 x 101 точек



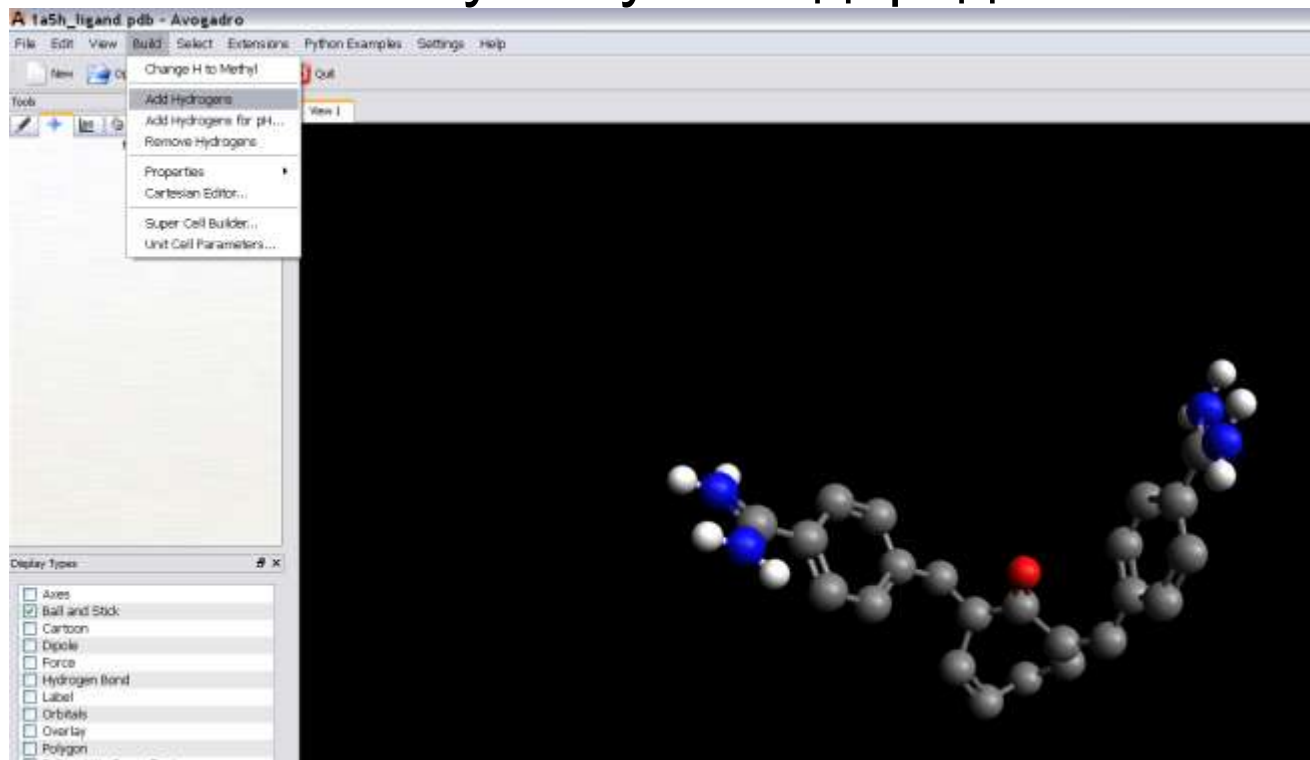
SOLGRIG



Protein_h.bin

Подготовка лиганда к докингу

- Нативный (закристаллизованный лиганд) можно взять из комплекса PDB
- Но в нем также отсутствуют водороды!

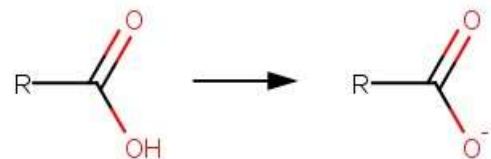
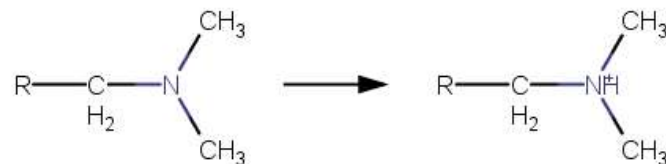
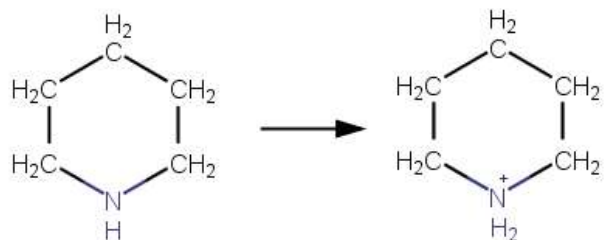
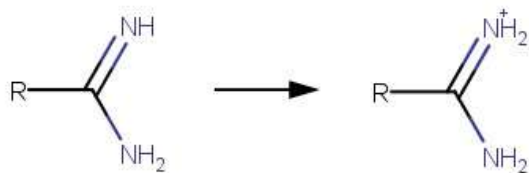
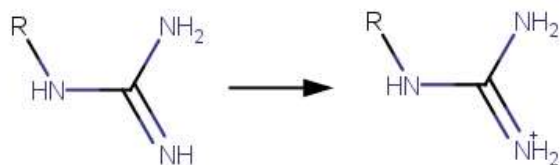


Программа Avogadro

Подготовка лиганда к докинг

- Зарядовые состояния лиганда и проверка правильности протонирования: для построения модели в правильном зарядовом состоянии нужно знать константы диссоциации функциональных групп, входящих в состав молекулы и предполагаемую кислотность среды в месте действия лекарственного вещества

При pH = 7,4



Подготовка лиганда к докингу

OpenBabel103281614313D

```
18 18 0 0 0 0 0 0 0 0 0999 V2000
  11.4530  48.4690  19.8070 C  0 0 0 0 0
  11.8190  47.8060  21.0300 C  0 0 0 0 0
  12.0360  48.5620  22.2270 C  0 0 0 0 0
  11.8890  49.9840  22.2120 C  0 0 0 0 0
  11.5260  50.6520  21.0020 C  0 0 0 0 0
  11.3080  49.8980  19.8030 C  0 0 0 0 0
  11.2380  47.7610  18.6630 C  0 0 0 0 0
  11.3180  46.3790  18.6800 N  0 0 0 0 0
  10.9450  48.3550  17.5790 N  0 0 0 0 0
  11.9330  46.7105  21.0460 H  0 0 0 0 0
  12.3163  48.0475  23.1597 H  0 0 0 0 0
  12.0555  50.5647  23.1331 H  0 0 0 0 0
  11.4136  51.7477  20.9909 H  0 0 0 0 0
  11.0276  50.4173  18.8730 H  0 0 0 0 0
  11.1473  45.8157  17.7715 H  0 0 0 0 0
  11.5512  45.8616  19.6018 H  0 0 0 0 0
  10.7764  47.7819  16.6763 H  0 0 0 0 0
  10.8625  49.4532  17.5577 H  0 0 0 0 0
  7  1  1  0  0  0
  6  1  2  0  0  0
  1  2  1  0  0  0
  2  3  2  0  0  0
  2 10  1  0  0  0
  4  3  1  0  0  0
  3 11  1  0  0  0
  5  4  2  0  0  0
  4 12  1  0  0  0
  6  5  1  0  0  0
  5 13  1  0  0  0
  6 14  1  0  0  0
  9  7  2  0  0  0
  7  8  1  0  0  0
  8 15  1  0  0  0
  8 16  1  0  0  0
  9 17  1  0  0  0
  9 18  1  0  0  0
M  END
```

Формат MOL

Ligand_h.mol

Типы атомов лиганда определяет
программа докинга SOL

Подготовка к докингу

- Файл параметров докинга:

```
#####  
# Parametr file for program SOL version 5.1.2  
#####  
PARAMETER DIRECTORY "/home/dimonta/bin/sol-mmffparam/"  
IGNORE_ROTATION_OF_METHYL  
WRITE MRK 5  
  
NUMBER OF RUNS          50  
POPULATION SIZE        30000  
MATING POOL SIZE        70  
NUMBER OF GENERATIONS   1000  
THRESHOLD GRID ENERGY  100.0
```

Формат и количество найденных
конформаций лиганда:
От 0 до Number of Runs

Количество независимых
запусков алгоритма

Параметры
генетического алгоритма

Результаты докинга

out – файл:

конформации лиганда после докинга:

The sol program for flexible ligand docking
version 5.1.4 single mode
Copyright (C) 2006–2008 Alexey Romanov, Copyright (C) Moscow State University

```
*****  
* DOCKING PARAMETERS *  
*****  
PARAMETERS FILE NAME:  
sol-work.par  
  
GRID FILE NAME:  
lppb_prot_h.bin  
  
LIGAND FILE NAME:  
lppb_lig_h.mol  
  
OUTPUT FILES: T, mrk, 5  
DEBUG MODE: F  
MPIDEBUG MODE: F  
RANDOMISATION BY TIME: T  
UNIFORM CROSSOVER: T  
ONE POINT CROSSOVER: F  
TWO POINT CROSSOVER: F  
ROULETTE WHEEL SELECTION: F  
STEPFUNCTION SELECTION: F  
STEPFUNCTION SELECTION WITH NICHING: T  
  
NUMBER OF RUNS: 50  
POPULATION SIZE: 30000  
MATING POOL SIZE: 70  
KILLING ENERGY: 25.000000  
NUMBER OF GENERATIONS: 1000  
ELITE AMOUNT: 4  
*****  
CROSSOVER RATE: 0.750000  
MIXING (only for uniform crossover): 0.300000  
MUTATION PROBABILITY 1(FOR INTERNAL ROTATIONS): 0.040000  
MUTATION PROBABILITY 2(FOR EXTERNAL ROTATIONS): 0.900000  
MUTATION PROBABILITY 3(FOR TRANSLATIONS): 0.900000  
MUTATION WINDOW 1(FOR INTERNAL ROTATIONS): 1.000000  
MUTATION WINDOW 2(FOR EXTERNAL ROTATIONS): 3.000000  
MUTATION WINDOW 3(FOR TRANSLATIONS): 0.900000  
*****  
INNER ENERGY COEFFICIENT FOR SCORING: 1.000000  
INNER ENERGY ELECTROSTATICS EPSILON: 2.000000  
*****  
DIVERSITY FACTOR (ACTUAL ONLY FOR NICHING): 1.000000  
THRESHOLD GRID ENERGY: 100.000000  
FITNESS NORMALIZATION COEFFICIENT: 1.000000  
CLUSTERISATION THRESHOLD: 1.000000  
*****  
GRID ENERGY COEFFICIENT FOR SCORING: 0.100000  
ENTROPY PENALTY (kcal/mol*rotator) FOR INNER ROTATIONS: 0.330000  
*****
```

Ligand_h_01.mrk

Ligand_h_02.mrk

Ligand_h_03.mrk

Ligand_h_04.mrk

Ligand_h_05.mrk

...

Анализ результатов докинга

- Скоринг-функция (Score) – рассчитанная энергия связывания белок-лиганд.

Хороший Score < - 5 ккал/моль

$$\Delta G = RT \ln(K_i)$$

- RMSD (root min square derivation) – среднеквадратичное расстояние между химически эквивалентными атомами лиганда для двух различных решений

Хорошее RMSD от нативного ~ 1-2 Å

- Кластеризация. Если RMSD-расстояния < 1 Å – решения собираются в один кластер.

Чем меньше кластеров, и чем больше решений собирается в первый кластер, тем вероятнее, что найден глобальный минимум

Анализ результатов докинга

Final statistics for 50 runs, ordered by increasing energy

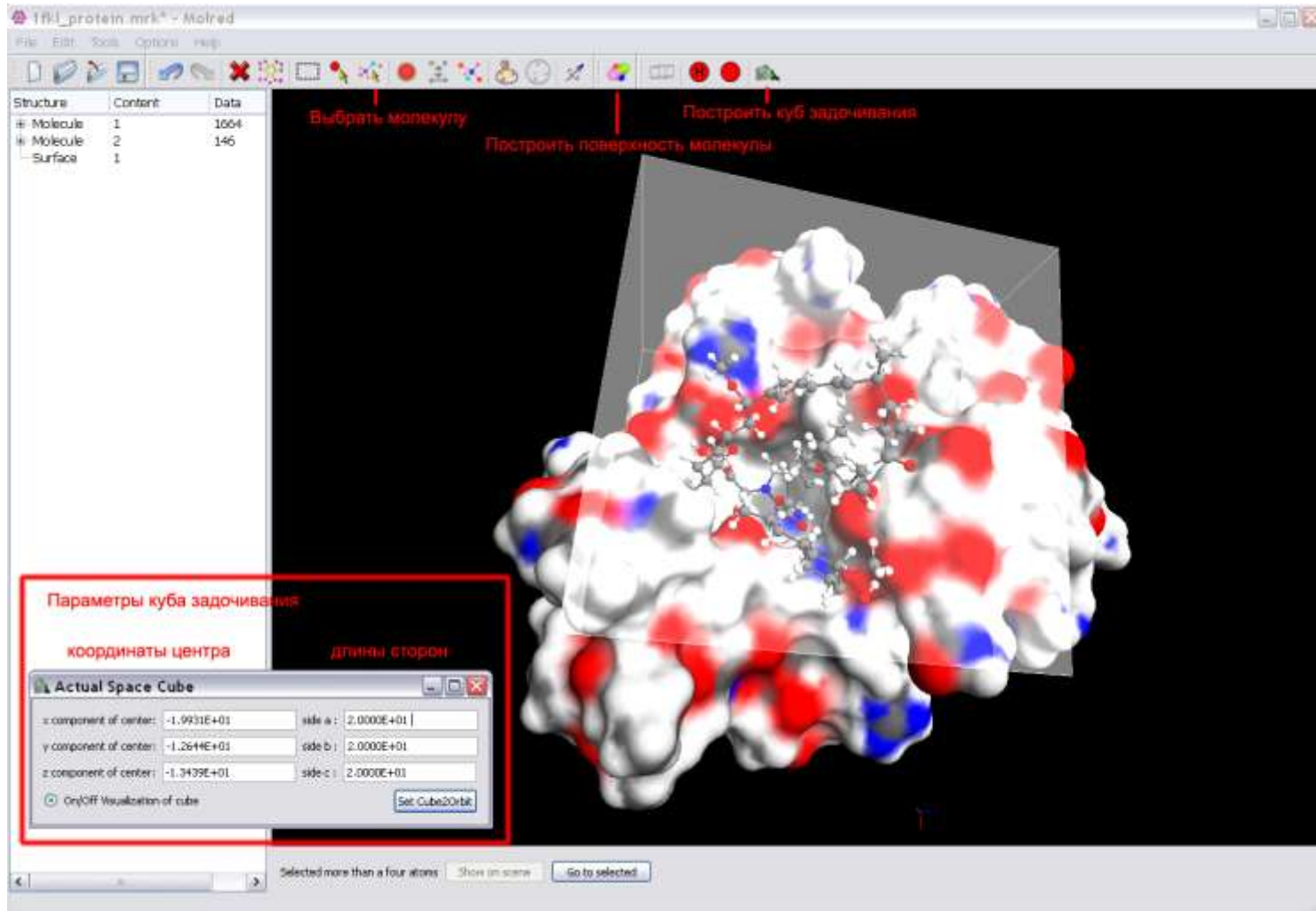
N	Docked energy	Cluster N	initial position RMS	Inner Energy	Grid Energy	order0 grid	order1 grid	order2 grid
1	-56.6752	1	1.5095	3.9648	-60.6400	-23.3630	-48.4212	11.1442
2	-56.6698	1	1.5133	4.0369	-60.7067	-22.9802	-48.8624	11.1359
3	-56.6591	1	1.5141	3.9898	-60.6489	-23.0117	-48.7925	11.1553
4	-56.6551	1	1.5078	3.9318	-60.5870	-23.2842	-48.4523	11.1495
5	-56.6503	1	1.5068	4.1508	-60.8010	-23.4788	-48.4591	11.1370
6	-56.6497	1	1.5131	4.1301	-60.7799	-22.7297	-49.2065	11.1563
7	-56.6436	1	1.5165	4.1639	-60.8075	-23.0010	-48.9722	11.1657
8	-56.6402	1	1.5148	4.0671	-60.7073	-23.0609	-48.8303	11.1838
9	-56.6376	1	1.5137	4.0371	-60.6747	-22.5613	-49.2944	11.1810
10	-56.6356	1	1.4212	4.0771	-60.7127	-22.9678	-48.8261	11.0813
11	-56.6338	1	1.5238	4.2796	-60.9134	-21.3610	-50.7349	11.1825
12	-56.6325	1	1.5041	3.8767	-60.5092	-24.2100	-47.4557	11.1565
13	-56.6324	1	1.5111	3.9873	-60.6197	-23.9736	-47.7614	11.1152
14	-56.6317	1	1.5078	3.7707	-60.4024	-23.8768	-47.6566	11.1309
15	-56.6302	1	1.5224	4.1957	-60.8259	-21.6322	-50.3510	11.1574
16	-56.6277	1	1.5121	3.8010	-60.4287	-23.6436	-47.9273	11.1421
17	-56.6275	1	1.5049	3.8416	-60.4692	-24.2034	-47.4010	11.1353
18	-56.6216	1	1.5335	3.8301	-60.4517	-23.7158	-47.8299	11.0940
19	-56.6193	1	1.5203	4.2780	-60.8973	-22.0763	-49.9820	11.1610
20	-56.6164	1	1.5060	3.8288	-60.4452	-23.9839	-47.5693	11.1079
21	-56.6150	1	1.4916	3.9577	-60.5727	-23.5110	-48.1474	11.0857
22	-56.6101	1	1.4986	4.2392	-60.8493	-24.0584	-47.9197	11.1288
23	-56.6064	1	1.4303	4.0387	-60.6451	-23.1366	-48.5849	11.0764
24	-56.6018	1	1.5062	3.8521	-60.4539	-24.5647	-46.9995	11.1102
25	-56.6009	1	1.5313	4.1969	-60.7978	-22.4923	-49.5188	11.2133
26	-56.5940	1	1.5164	3.7539	-60.3479	-23.2440	-48.2405	11.1366
27	-56.5871	1	1.5794	4.0086	-60.5957	-23.8563	-47.9374	11.1980
28	-56.5867	1	1.5109	4.1181	-60.7048	-24.0846	-47.7810	11.1607
29	-56.5839	1	1.4180	4.3502	-60.9341	-22.3829	-49.6616	11.1104
30	-56.5769	1	1.5110	3.7173	-60.2942	-23.3717	-48.0604	11.1379
31	-56.5657	1	1.5934	3.8594	-60.4251	-23.8098	-47.8581	11.2428
32	-56.5498	1	1.4162	4.7676	-61.3174	-21.8214	-50.6054	11.1095
33	-56.5498	1	1.5174	3.7319	-60.2816	-23.3826	-48.0143	11.1153
34	-56.5489	1	1.5879	4.0123	-60.5612	-23.5790	-48.2353	11.2530
35	-56.5470	1	1.4299	4.2926	-60.8396	-22.9916	-48.9567	11.1087
36	-56.5429	1	1.5957	3.8157	-60.3586	-23.6719	-47.9120	11.2252
37	-56.5406	1	1.5005	4.1787	-60.7194	-23.5467	-48.2278	11.0552
38	-56.5346	1	1.5915	3.8076	-60.3422	-24.1813	-47.3373	11.1764
39	-56.4921	1	1.5560	3.8026	-60.2947	-23.7665	-47.7600	11.2318
40	-56.4884	1	1.5622	3.7110	-60.1995	-24.2043	-47.1899	11.1947
41	-56.4871	1	1.5973	3.6811	-60.1681	-24.0300	-47.3347	11.1967
42	-56.4732	1	1.4223	4.6569	-61.1301	-22.2705	-49.9626	11.1030
43	-56.4660	1	1.6144	3.6155	-60.0815	-23.0467	-48.2986	11.2638
44	-56.4438	1	1.5957	3.6374	-60.0813	-24.1975	-47.0742	11.1905
45	-55.5281	1	1.1565	6.4725	-62.0006	-23.0863	-49.9708	11.0564
46	-55.1660	2	1.9306	5.4688	-60.6349	-21.6108	-50.2750	11.2509
47	-55.1072	2	1.9680	5.5669	-60.6740	-22.2571	-49.5843	11.1674
48	-55.1016	2	1.9385	5.0711	-60.1727	-20.9661	-50.5006	11.2939
49	-55.0517	2	1.9230	5.6205	-60.6723	-21.9295	-49.9400	11.1973
50	-54.9187	2	1.9323	6.4168	-61.3355	-21.5881	-51.0011	11.2537

Анализ результатов докинга

```
Founding 2 clusters, separated by more than 1.0000 angstroms
Clust.N   popul.   min RMS   max RMS   mean RMS   min docked energy   min grid energy   min scoring
  1         45      0.0093    0.6299    0.1568     -56.6752           -62.0006           -5.8701
  2         5       0.0553    0.2619    0.1567     -55.1660           -61.3355           -5.8036
*****
BEST SCORING: -5.734001
BEST GRID ENERGY: -60.640006
NUMBER OF ROTATORS: 1
*****
Total time (12213.000000 seconds):
  0 days
  3 hours
 23 minutes
 33 seconds
```

Просмотр результатов докинга

Программа MolRed:



Контакты:

- Сайт: <http://molddesign.ru>
- НИВЦ, комната 111, тел. (495)939-40-04
- Каткова Екатерина Владимировна
E-mail: katkova@molddesign.ru
- Сулимов Алексей Владимирович
E-mail: as@molddesign.ru

Новости

• Начало лабораторных работ

Внимание магистров первого года, обучающихся на кафедре биофизики физического факультета МГУ: в четверг 31 марта на лекции будут раздаваться задания для лабораторных работ по весеннему курсу 2016 года "Компьютерные методы в фармакологии". Если вы отсутствовали на лекции, получить задание можно, написав на почту:

katkova@moldesign.ru

[Читать дальше](#)

Спасибо за внимание!