ОТЧЕТ ПО ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЕ

"Компьютерные методы в фармакологии"

СТУДЕНТ \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_ ГРУППА \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_  
№ PDB ID \_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_\_

**Состав отчета**

* + - 1. Название белка. Функции белка. Может ли данный белок быть мишенью для лекарственного средства (обосновать)? Из какого организма был выделен белок? Сколько цепей в структуре белка и к каким доменам белка они относятся?
      2. Название лиганда. Привести изображение лиганда. Измерена ли для него ингибирующая активность? Если да – привести величины и пересчитать их в свободную энергию образования комплекса (желательно, привести в ккал/моль).
      3. Каким методом и при каком разрешении получена структура комплекса?
      4. Привести ссылку на статью, описывающую получение кристаллической структуры комплекса.
      5. Дать описание того, каким образом готовился для докинга белок и лиганд.
      6. Запуск программы SOLGRID: какие входные файлы использовались, что они из себе представляли, и что получилось на выходе? Привести, на каком компьютере проводился расчет (какой процессор, какая частота, какая память RAM), а также время счета.
      7. Запуск программы SOL: Какие входные файлы и какие параметры использовались при запуске SOL? Что они из себя представляют? Что получилось на выходе? Привести время счета.
      8. Привести величину среднеквадратичного отклонения задоченного положения от нативного положения для лучшей по энергии (по Docked Energy) конформации лиганда. Приложить картинки, иллюстрирующие положения нативного лиганда и задоченного лиганда в активном центре белка. Одна картинка в отчете: просто отдельно лиганд со всеми атомами водорода; другой рисунок – лучшая задоченная поза лиганда (из первого кластера) в белке, при этом белок представляется поверхностью SES (строится в редакторе MolRed); еще один рисунок – без белка строится нативное (закристаллизованное) положение лиганда в белке и лучшая задоченная поза лиганда, причем одну из этих поз лиганда надо выделить цветом (в MolRed’е). Может случится так, что лучшая по энергии задоченная поза лиганда будет сильно отличаться от нативной (закристаллизованной) позы, т.е. будет иметь большое RMSD, а небольшое значение RMSD будет для позы из другого кластера. Тогда привести и эту последнюю позу на отдельном рисунке вместе с нативной позой.
      9. Привести кластеризацию: сколько всего получилось кластеров, какова их населенность?
      10. Привести значение скоринг-функции для лучшего положения лиганда. Здесь же привести значение свободной энергии связывания, пересчитанной из константы ингибирования (см. пункт 4).
      11. Написать заключение.
      12. Вместе с отчетом прислать: подготовленный для докинга белок, подготовленный для докинга лиганд, входной и выходной файлы программ SOLGRID и SOL (кроме большого бинарного файла!), файлы задоченных поз лиганда.