

Практикум 1. RutoI. Взаимодействия

В данном практикуме требовалось визуализировать структуру NMDA-рецептора, а также отобразить его взаимодействие с лигандом - NMDA, с помощью программы RutoI. NMDA-рецепторы представляют собой тетрамерные ионные каналы, состоящие из двух субъединиц GluN1 и двух субъединиц GluN2. Для активации рецептору необходимо связаться с глутаматом, который вызывает открытие канала.

В отличие от других глутаматных рецепторов, NMDA-рецептор способен также избирательно связывать N-метил-D-аспарат (NMDA), из-за чего он и носит такое название. Связывание NMDA в активном центре белка происходит за счет полярных взаимодействий с участием атомов кислорода и азота основной цепи Ser536, Thr538, Arg543, Ser714 и Thr715. В отличие от глутамата у NMDA также есть N-метильная группа, размещению которой способствуют окружающие гидрофобные остатки Tyr755 и Val759 [1].

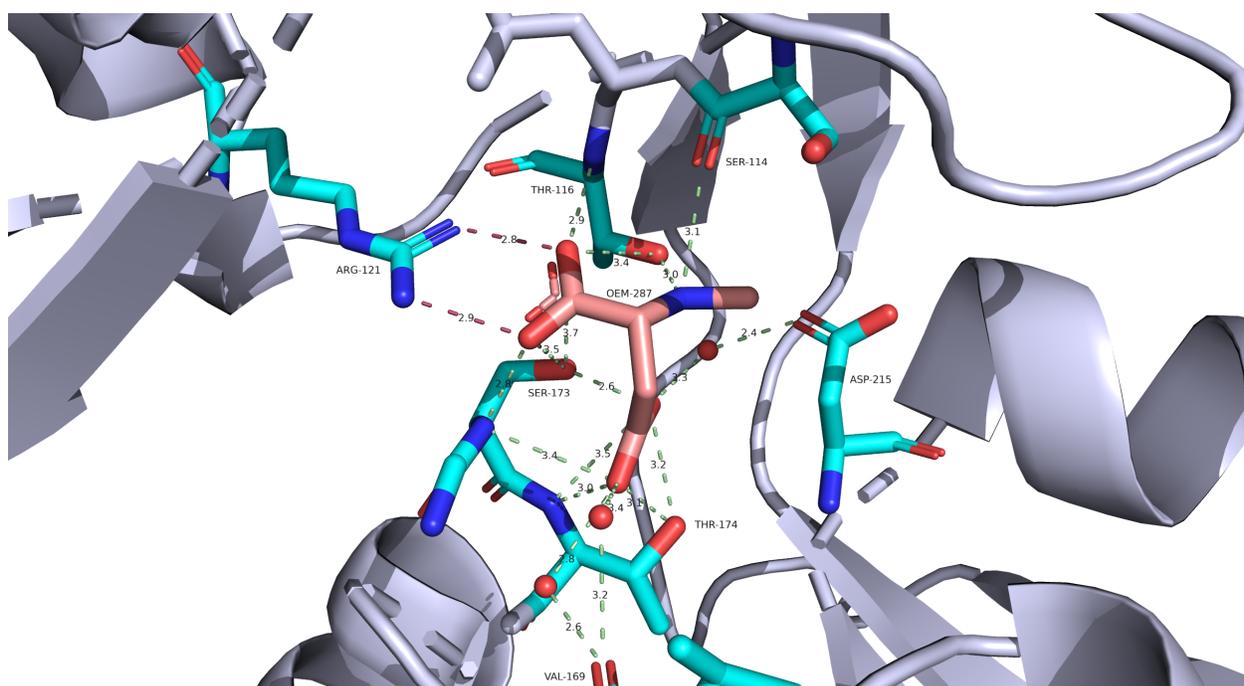


Рис. 1 Взаимодействие NMDA (показан розовым цветом) с аминокислотными остатками рецептора. Зеленым цветом показаны водородные связи, розовым солевые мостики. Длина связей указана в ангстремах

Сессия в Pymol.

[1] Vance, K., Simorowski, N., Traynelis, S. *et al.* Ligand-specific deactivation time course of GluN1/GluN2D NMDA receptors. *Nat Commun* **2**, 294 (2011).

<https://doi.org/10.1038/ncomms1295>