

dNTPases - Project #415

Заряд vs координация в MnmE

17.05.2021 16:41 - Alexander Zlobin

Status:	In Progress	Start date:	20.05.2021
Priority:	Normal	Due date:	01.09.2021
Assignee:	Evgenia Elizarova	% Done:	0%
Category:			
Target version:			
Description			
<h2>Обзор</h2>			
<p>Калий нужен для работы MnmE. Почему? Что он делает? Кто еще может это делать, а кто не может (остаток, металл)?</p> <p>Калий предстает перед нами в 2-х сущностях: * нечто, что имеет заряд +1, локализованный в определенном месте (q) * нечто, организующее кислороды в определенную систему взаиморасположений (c)</p> <p>Интересно количественно оценить вклады обеих составляющих. Для этого нужно: * Иметь процедуру сопоставления системе числа (dG*) * Получить эти числа для 4-х систем: q-c-, q+c-, q-c+, q+c+</p> <p>Нужно далее обосновать полученные числа через концепции, понятные химикам. В основном это геометрические соображения.</p>			
<h2>Процедура сопоставления системе числа dG*</h2>			
<p>Используем WT-MetaD вдоль единой PATH CV, так как сравниваем влияние сторонней интервенции на один и тот же процесс. Один и тот же процесс == одна и та же CV. Откуда берем эту CV?</p>			
<h2>Выбор CV</h2>			
<p>Unbiased Metad по инвариантной CV. Инвариантен для нас процесс разрыва O(beta)-P(gamma) и образования P(gamma)-O(water). Что не инвариантно: миграция протона. Необходимо получить как минимум 1 разумный путь несколько раз независимо - это повышает уверенность в том, что этот путь в действительности является путем с наименьшим барьером для данной системы.</p>			
<h2>Сравнение путей</h2>			
<p>Если путей несколько, то необходимо получение сошедшегося профиля по каждому. Барьер по лучшему пути должен быть в разумных пределах от экспериментального значения.</p>			
<h2>Дополнительная валидация</h2>			
<p>Мы заранее имеем причины думать, что трансфер протона происходит эстафетно на глутамат. Есть мутант по глутамату, работающий в 10000 раз хуже. С одной стороны это плюс - есть подтверждение важности глутамата. С другой стороны минус - он не на 100% важен, так как реакция все еще может быть детектирована и описана количественно. Чтобы заявить с уверенностью о роли глутамата как акцептора, нужно показать, как реализуется реакция без него. Барьер опять же должен быть в разумных рамках от ожидаемого значения.</p>			
<h2>Создание систем с разделением вкладов Q и C</h2>			
<p>Нужно насэмплировать длительную QM/MM динамику в RS, чтобы охарактеризовать взаиморасположения координаторов калия. <i>Дописать</i></p>			
Subtasks:			
Exploration # 421: Проработка сетапа для получения барьера			New

History

#1 - 20.05.2021 15:43 - Alexander Zlobin

- Tracker changed from Написать to Project

