

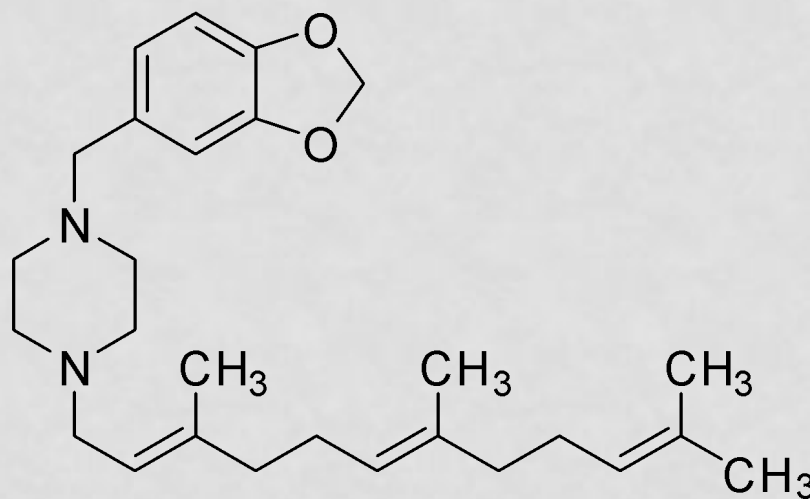
РИФАРИН

RIBAVIRIN



ПИФАРНИН

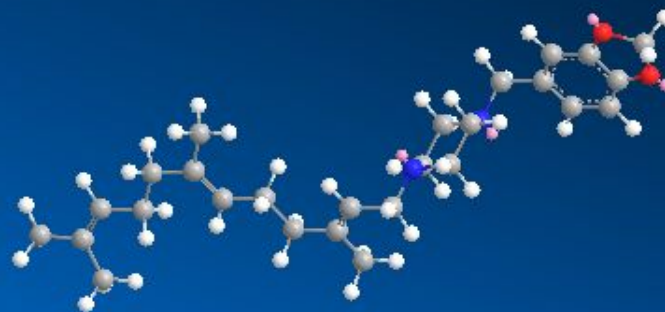
ИЮПАК	4-Farnesyl-1-(3,4-methylenedioxybenzyl)piperazine
MW	424,629
MF	$C_{27}H_{40}N_2O_2$



ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ РАБОТЫ:

- Изучение биологической активности пифарнина, поиск новых мишеней для данного соединения.
- Освоить программу для создания химических формул в графическом виде – ChemBioDraw Ultra
- познакомится с работой в системе для предсказания химической активности - Pass
- познакомится с докинг-анализом.

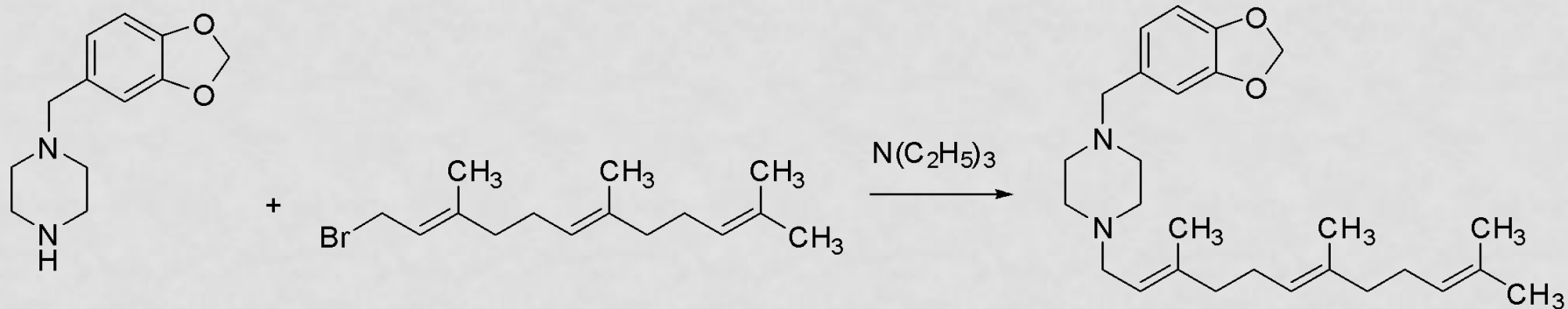
MM2 MINIMIZATION



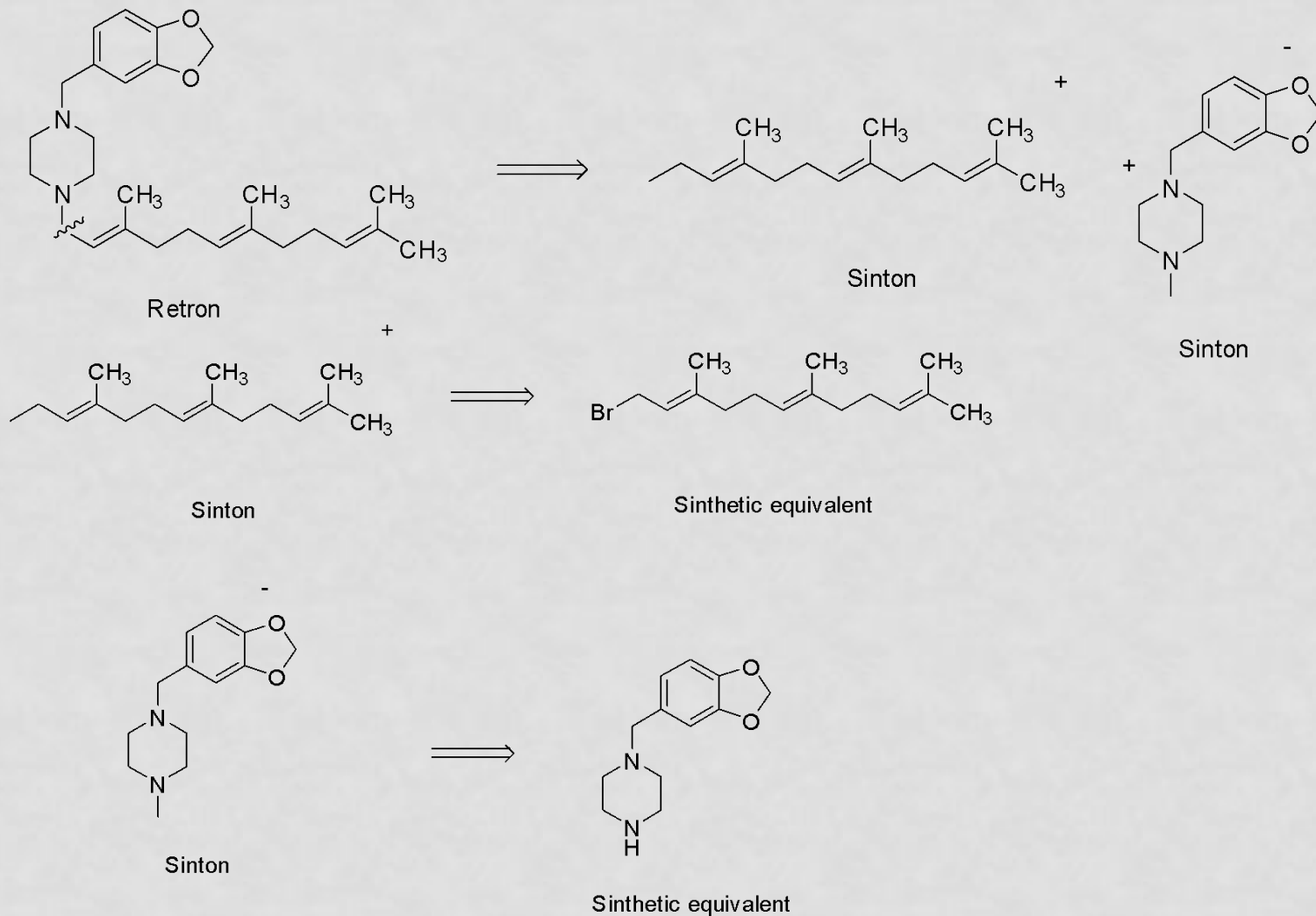
Output

```
Dipole/Dipole:      2.5114
Total Energy:      26.0822 kcal/mol
Calculation ended
-----|
```

СХЕМА СИНТЕЗА ПИФАРНИНА



РЕТРОСИНТЕТИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ



РЕЗУЛЬТАТ РАБОТЫ В PASS

Mechanisms of Action	Pi	Pa
Thioredoxin reductase inhibitor	0,119	0,122
Ribonucleoside diphosphate reductase inhibitor	0,023	0,118
Phosphofructokinase-1 inhibitor	0,006	0,346

РЕЗУЛЬТАТ РАБОТЫ В DOCKING THIOREDOXIN REDUCTASE INHIBITOR

Docking pose	Docking score		
#1	-7.4	VISUALIZE POSE	DOWNLOAD POSE
#2	-6.9	VISUALIZE POSE	DOWNLOAD POSE
#3	-6.3	VISUALIZE POSE	DOWNLOAD POSE
#4	-6.3	VISUALIZE POSE	DOWNLOAD POSE

Target: 1trb Thioredoxin reductase

left click rotate
right click or scroll zoom
ctrl + left click translate
ctrl + right click slab and fog

take screenshot

download PDB

proteinsurface

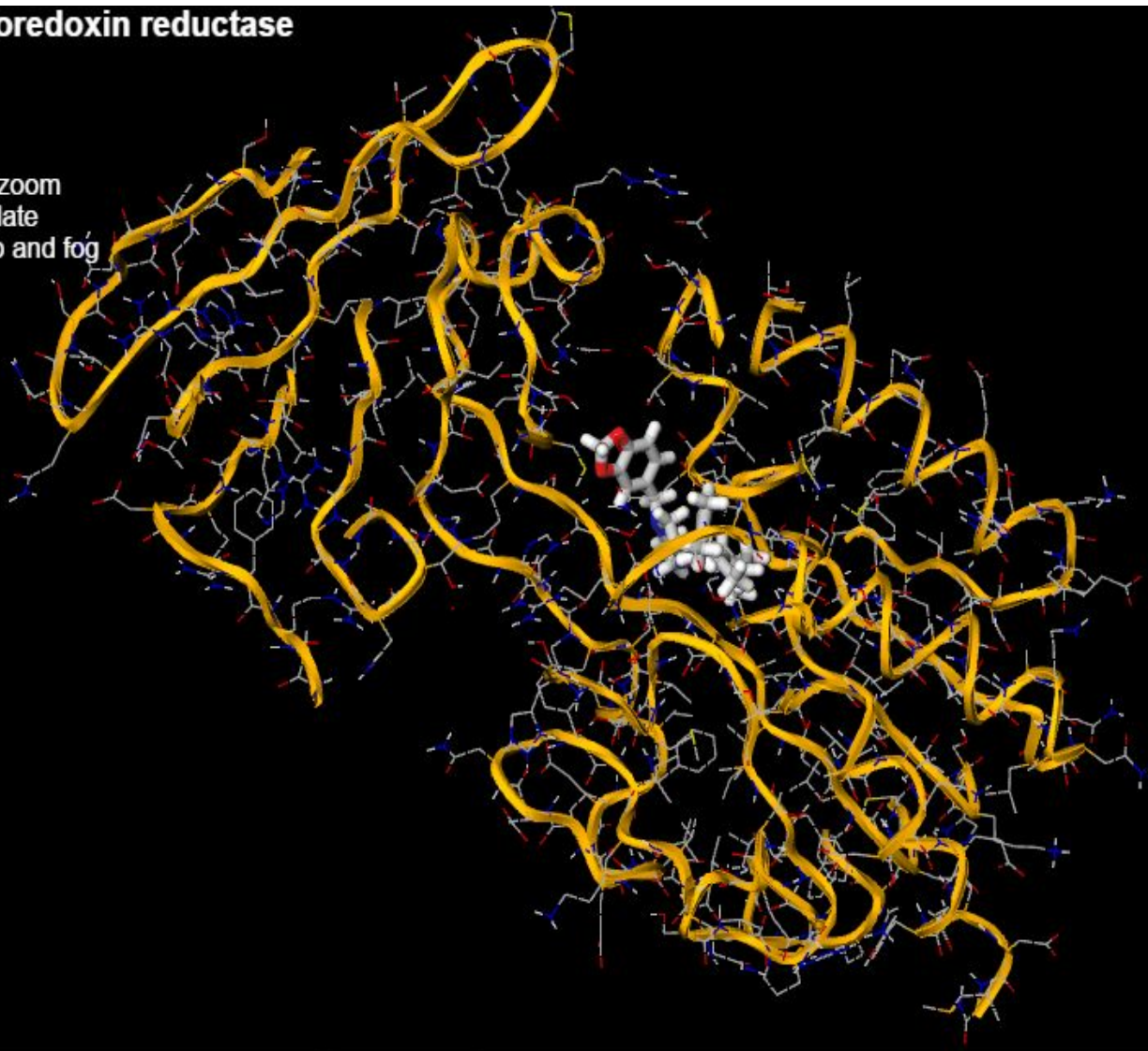
fullscreen

Label all residues

- GLY1
- THR2
- THR3
- LYS4
- HIS5
- SER6
- LYS7
- LEU8
- LEU9
- ILE10
- LEU11
- GLY12
- SER13
- GLY14
- PRO15
- ALA16
- GLY17
- TYR18
- THR19
- ALA20
- ALA21
- VAL22

Target: 1trb Thioredoxin reductase

left click rotate
right click or scroll zoom
ctrl + left click translate
ctrl + right click slab and fog



take screenshot

download PDB

proteinsurface

fullscreen

Label all residues

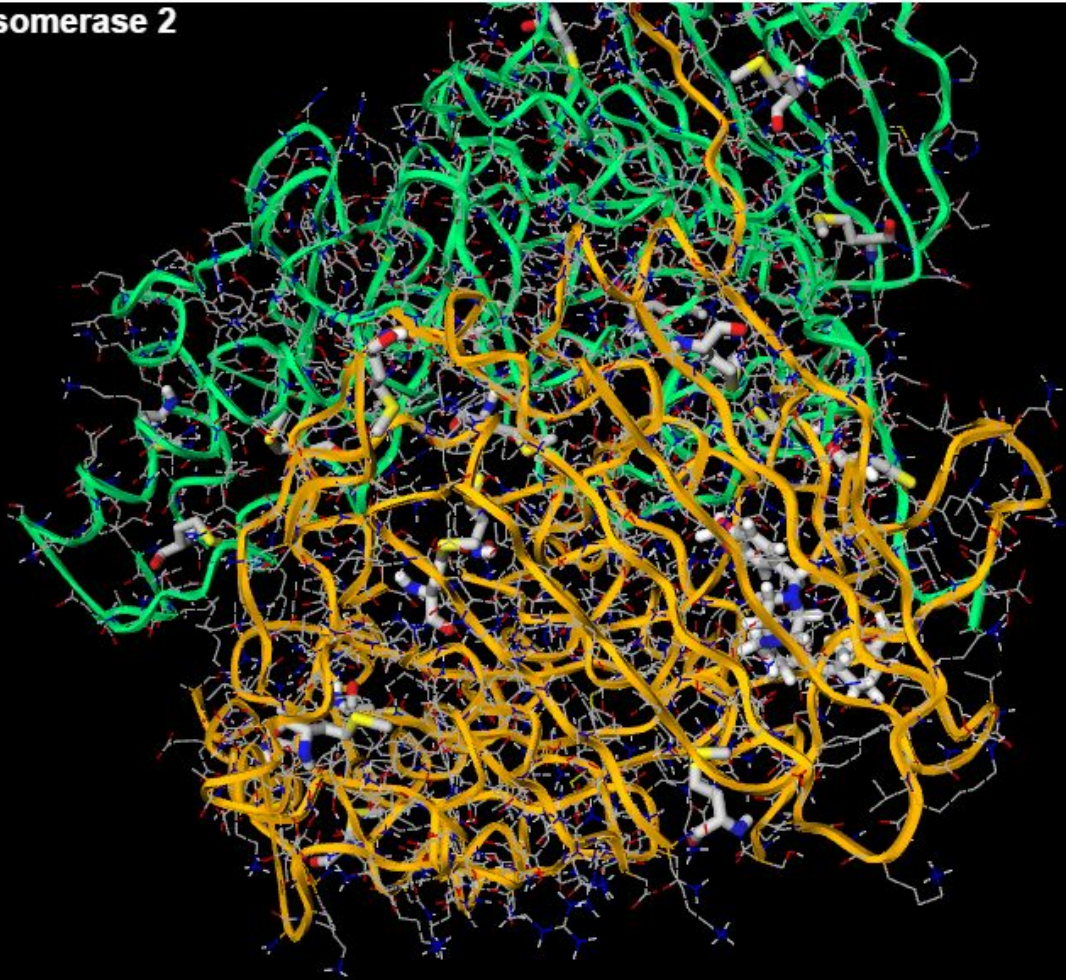
- GLY1
- THR2
- THR3
- LYS4
- HIS5
- SER6
- LYS7
- LEU8
- LEU9
- ILE10
- LEU11
- GLY12
- SER13
- GLY14
- PRO15
- ALA16
- GLY17
- TYR18
- THR19
- ALA20
- ALA21
- VAL22

РЕЗУЛЬТАТ РАБОТЫ В DOKING TOPOISOMERASE II INHIBITOR

Docking pose	Docking score		
#1	-9.1	VISUALIZE POSE	DOWNLOAD POSE
#2	-9.0	VISUALIZE POSE	DOWNLOAD POSE
#3	-8.7	VISUALIZE POSE	DOWNLOAD POSE
#4	-8.6	VISUALIZE POSE	DOWNLOAD POSE

Target: 1pvg DNA topoisomerase 2

left click rotate
right click or scroll zoom
ctrl + left click translate
ctrl + right click slab and fog



take screenshot

download PDB

proteinsurface

fullscreen

■ Label all residues

- SER1
- ALA2
- SER3
- ASP4
- LYS5
- TYR6
- GLN7
- LYS8
- ILE9
- SER10
- GLN11
- LEU12
- GLU13
- HIS14
- ILE15
- LEU16
- LYS17
- ARG18
- PRO19
- ASP20
- THR21
- TYR22

Target: 1pvg DNA topoisomerase 2

left click rotate
right click or scroll zoom
ctrl + left click translate
ctrl + right click slab and fog

take screenshot

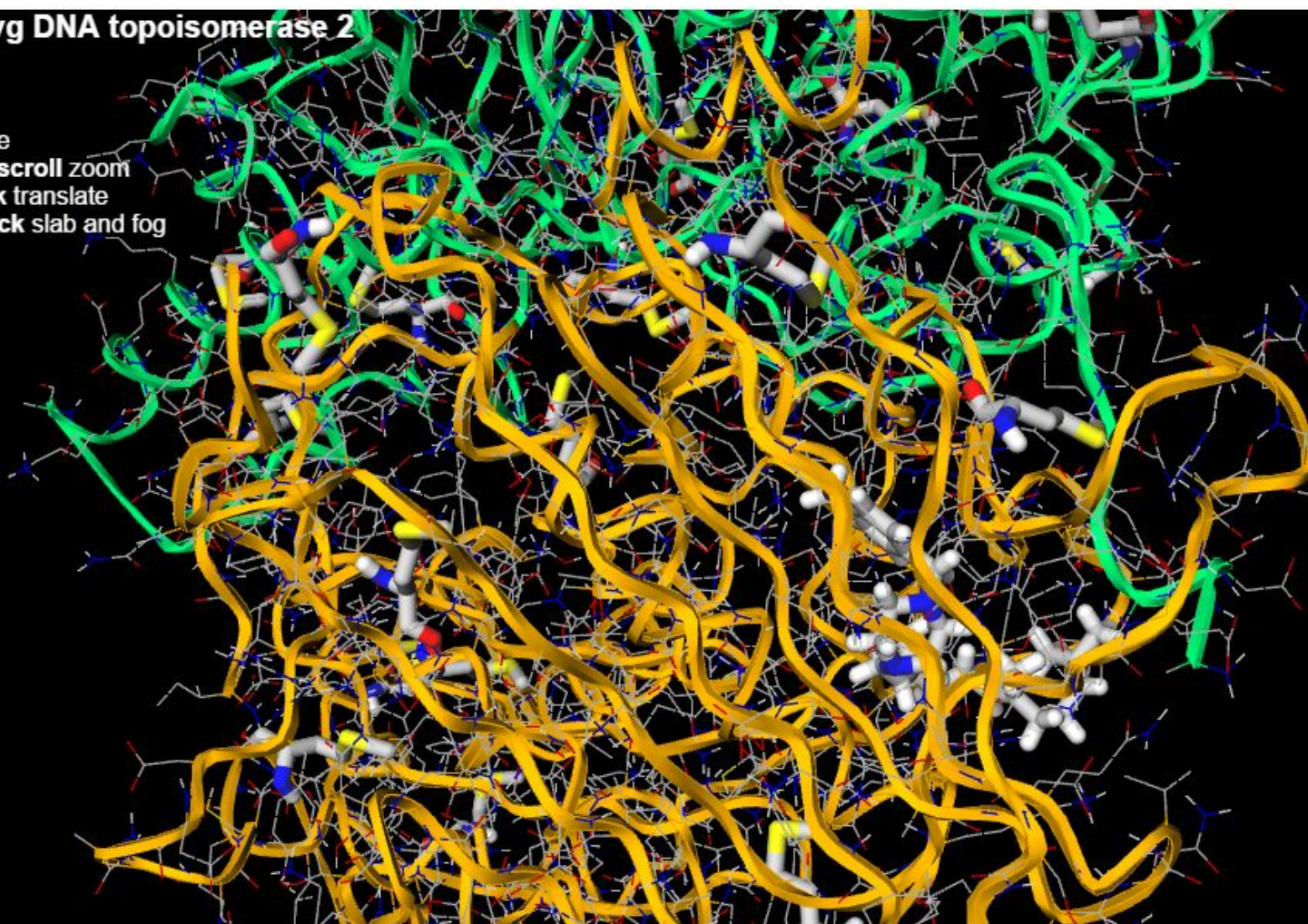
download PDB

proteinsurface

fullscreen

Label all residues

- SER1
- ALA2
- SER3
- ASP4
- LYS5
- TYR6
- GLN7
- LYS8
- ILE9
- SER10
- GLN11
- LEU12
- GLU13
- HIS14
- ILE15
- LEU16
- LYS17
- ARG18
- PRO19
- ASP20
- THR21
- TYR22



РЕЗУЛЬТАТ РАБОТЫ В DOKING ADENYLATE CYCLASE STIMULANT

Docking pose	Docking score		
#1	-7.3	VISUALIZE POSE	DOWNLOAD POSE
#2	-7.3	VISUALIZE POSE	DOWNLOAD POSE
#3	-7.2	VISUALIZE POSE	DOWNLOAD POSE
#4	-7.0	VISUALIZE POSE	DOWNLOAD POSE

Target: 1wc3 Adenylate cyclase

left click rotate
right click or scroll zoom
ctrl + left click translate
ctrl + right click slab and fog

take screenshot

download PDB

proteinsurface

fullscreen

Label all residues

SER1

HIS2

MET3

ARG4

PRO5

GLU6

PRO7

ARG8

LEU9

ILE10

THR11

ILE12

LEU13

PHE14

SER15

ASP16

ILE17

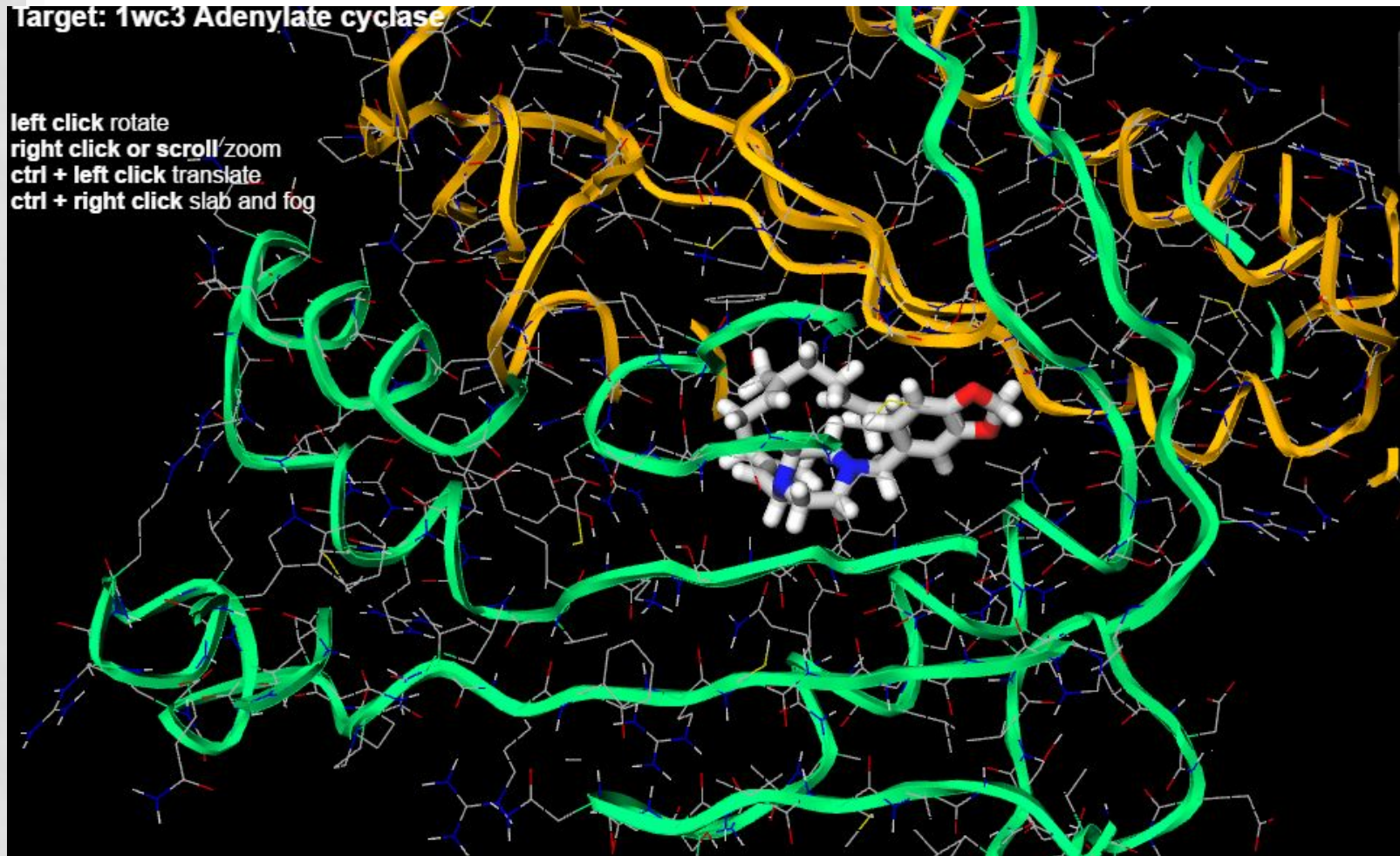
VAL18

GLY19

PHE20

THR21

ARG22



Target: 1wc3 Adenylate cyclase

left click rotate
right click or scroll zoom
ctrl + left click translate
ctrl + right click slab and fog

take screenshot

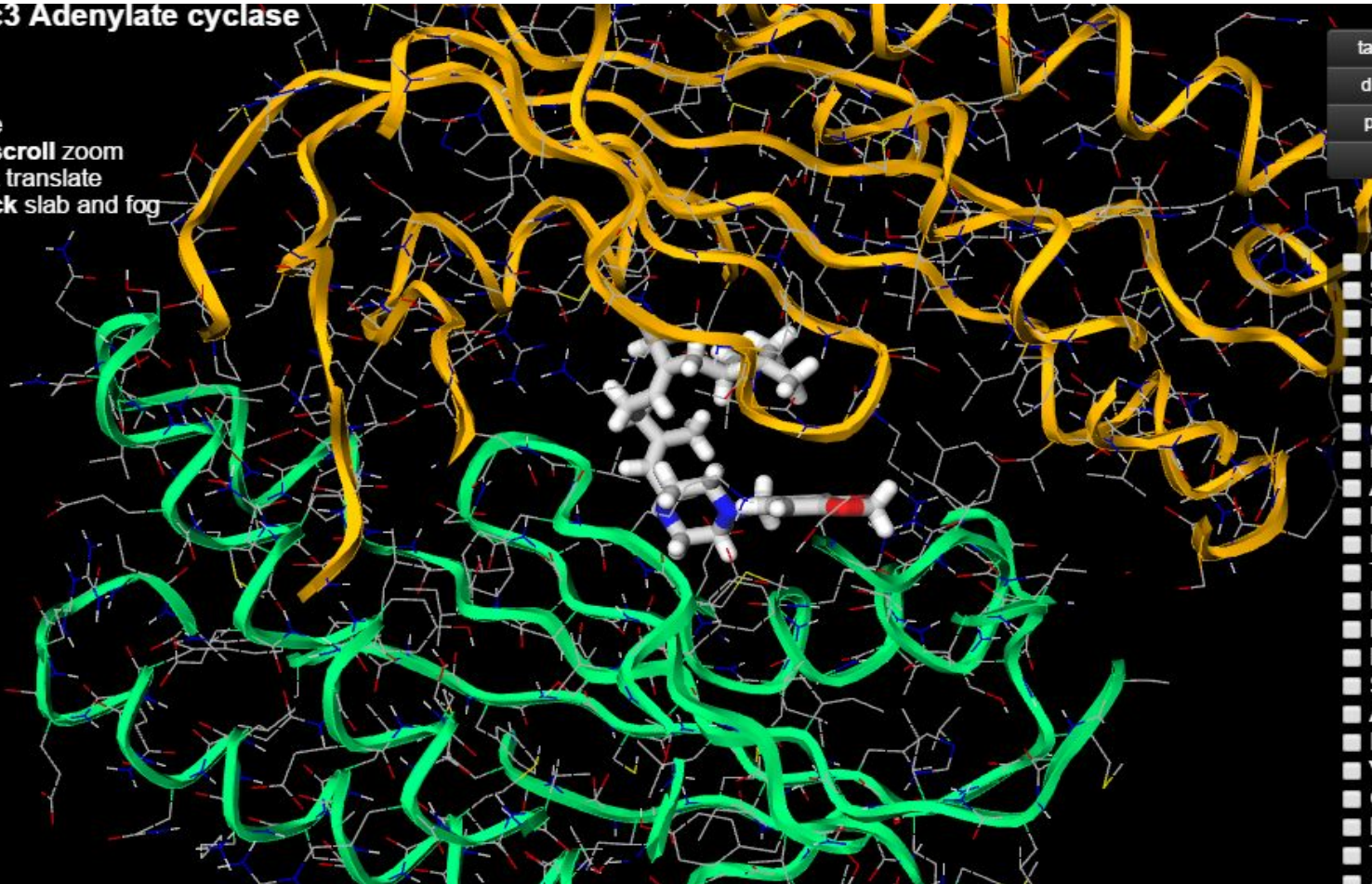
download PDB

proteinsurface

fullscreen

Label all residues

- SER1
- HIS2
- MET3
- ARG4
- PRO5
- GLU6
- PRO7
- ARG8
- LEU9
- ILE10
- THR11
- ILE12
- LEU13
- PHE14
- SER15
- ASP16
- ILE17
- VAL18
- GLY19
- PHE20
- THR21
- ARG22



ВЫВОДЫ ПО РАБОТЕ

- Результат биологической активности получены с помощью программы Pass показали что Пифарнин является препаратом, обладающим спазмолитическим и обезболивающим действием.
- В результате докинг-анализа рассматриваемого вещества для 3-х мишеней, были рассчитаны энергии на основании которых можно сделать вывод, что наибольшее взаимодействие Пифарнин проявляет с Topoisomerase II.