

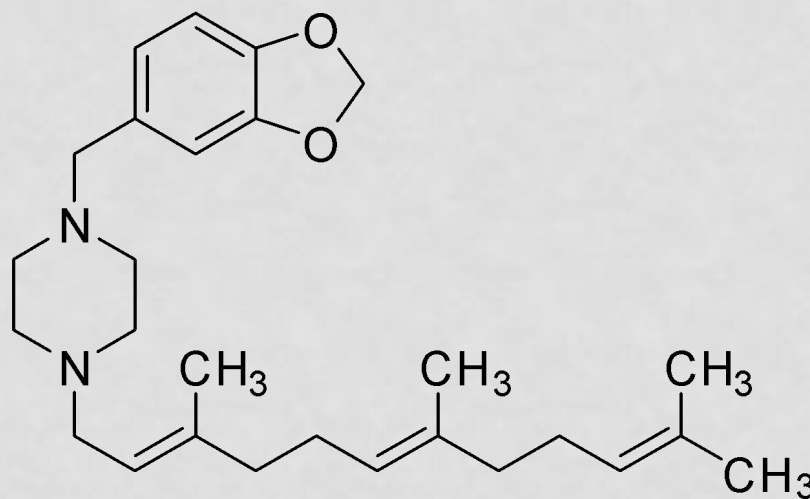
РИФАРИН

RIBAVIRIN



ПИФАРНИН

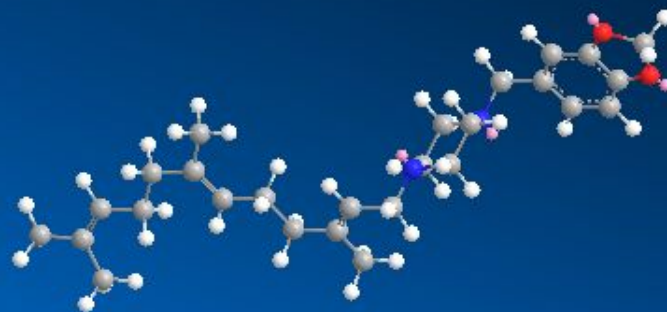
ИЮПАК	4-Farnesyl-1-(3,4-methylenedioxybenzyl)piperazine
MW	424,629
MF	$C_{27}H_{40}N_2O_2$



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.

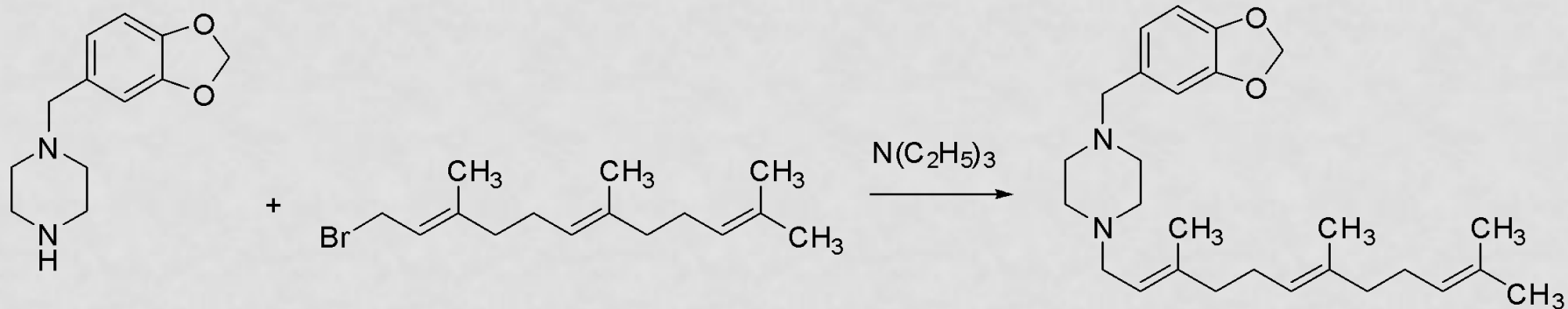
MM2 MINIMIZATION



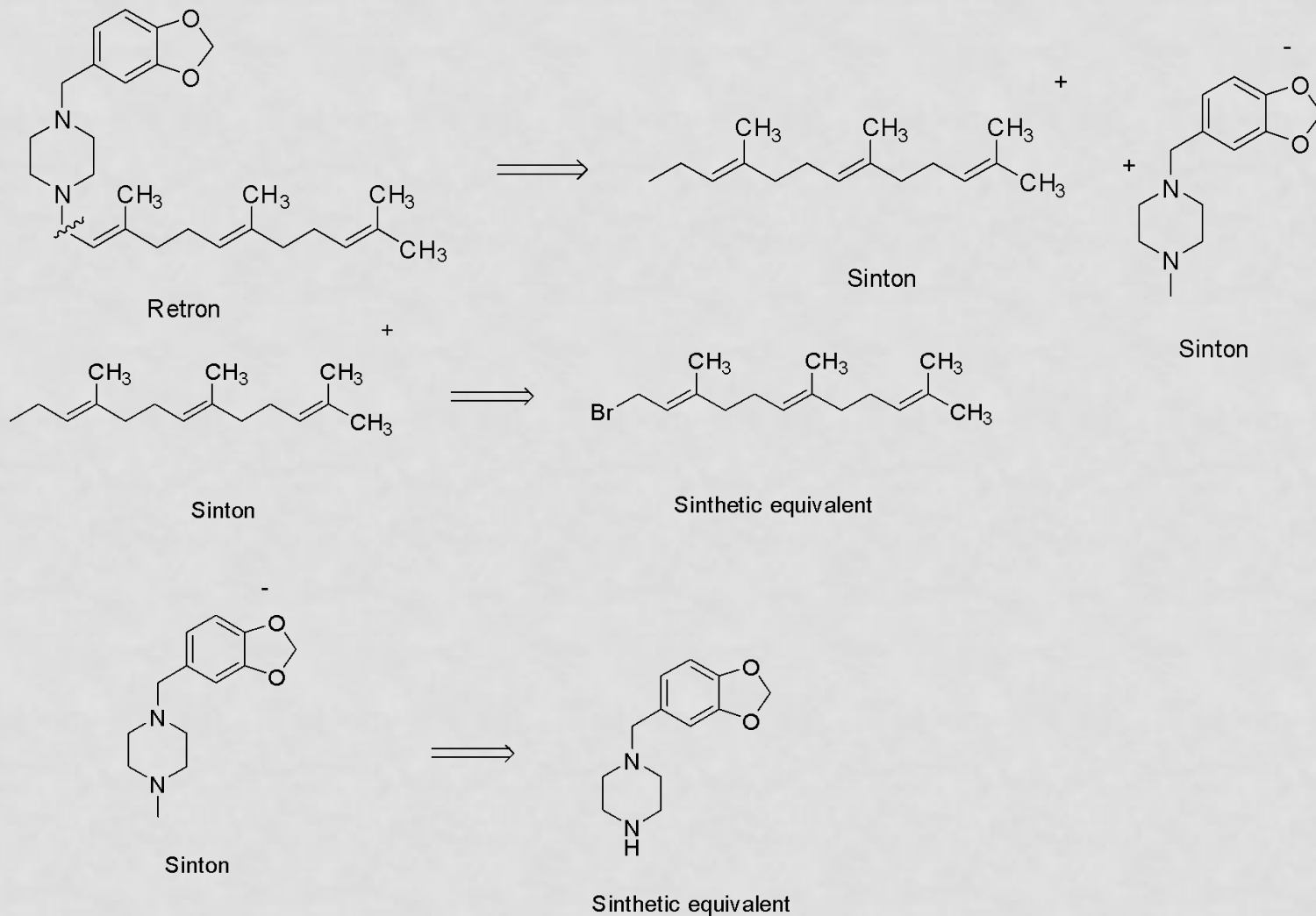
Output

```
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

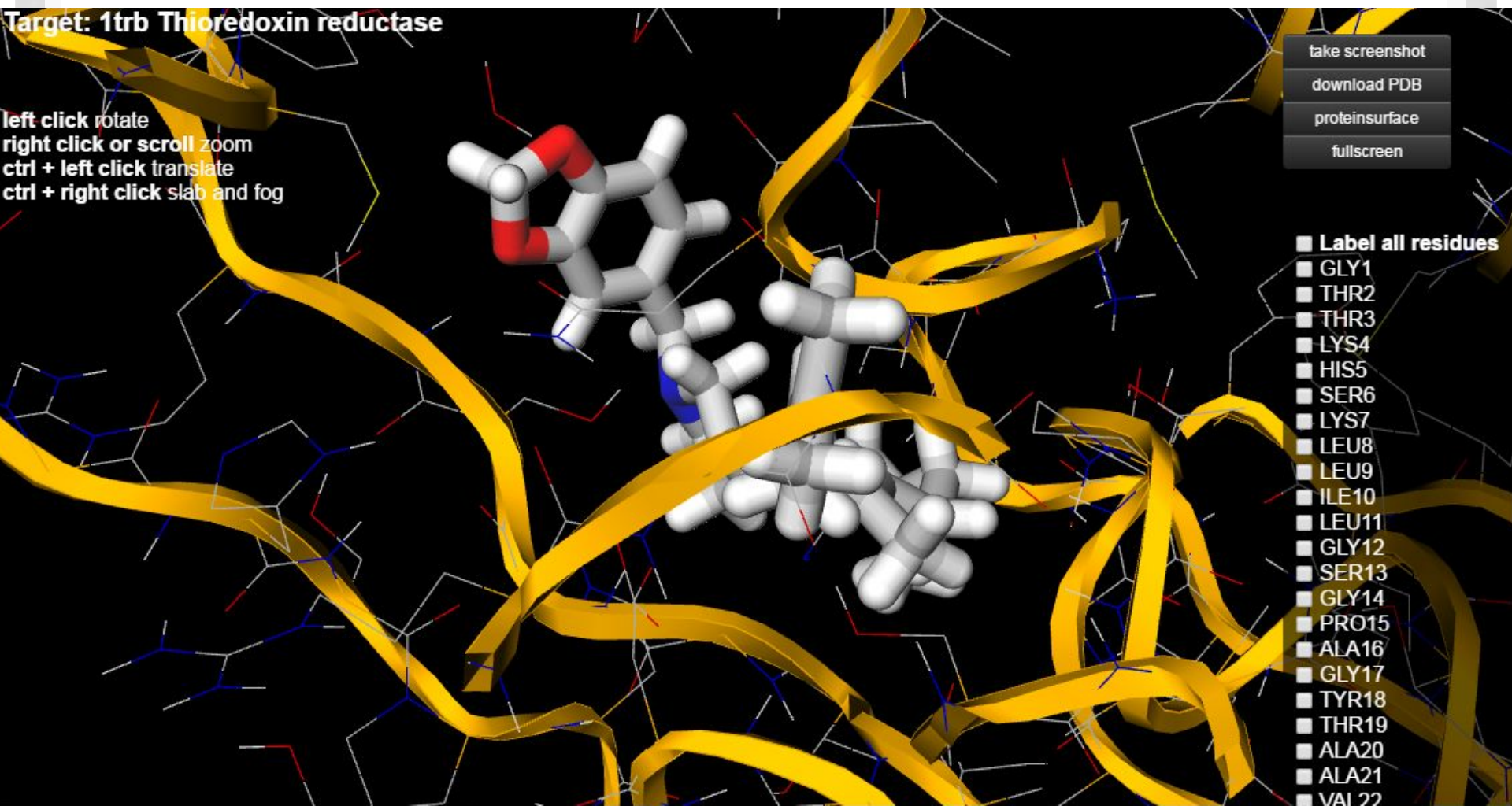
download PDB

proteinsurface

fullscreen

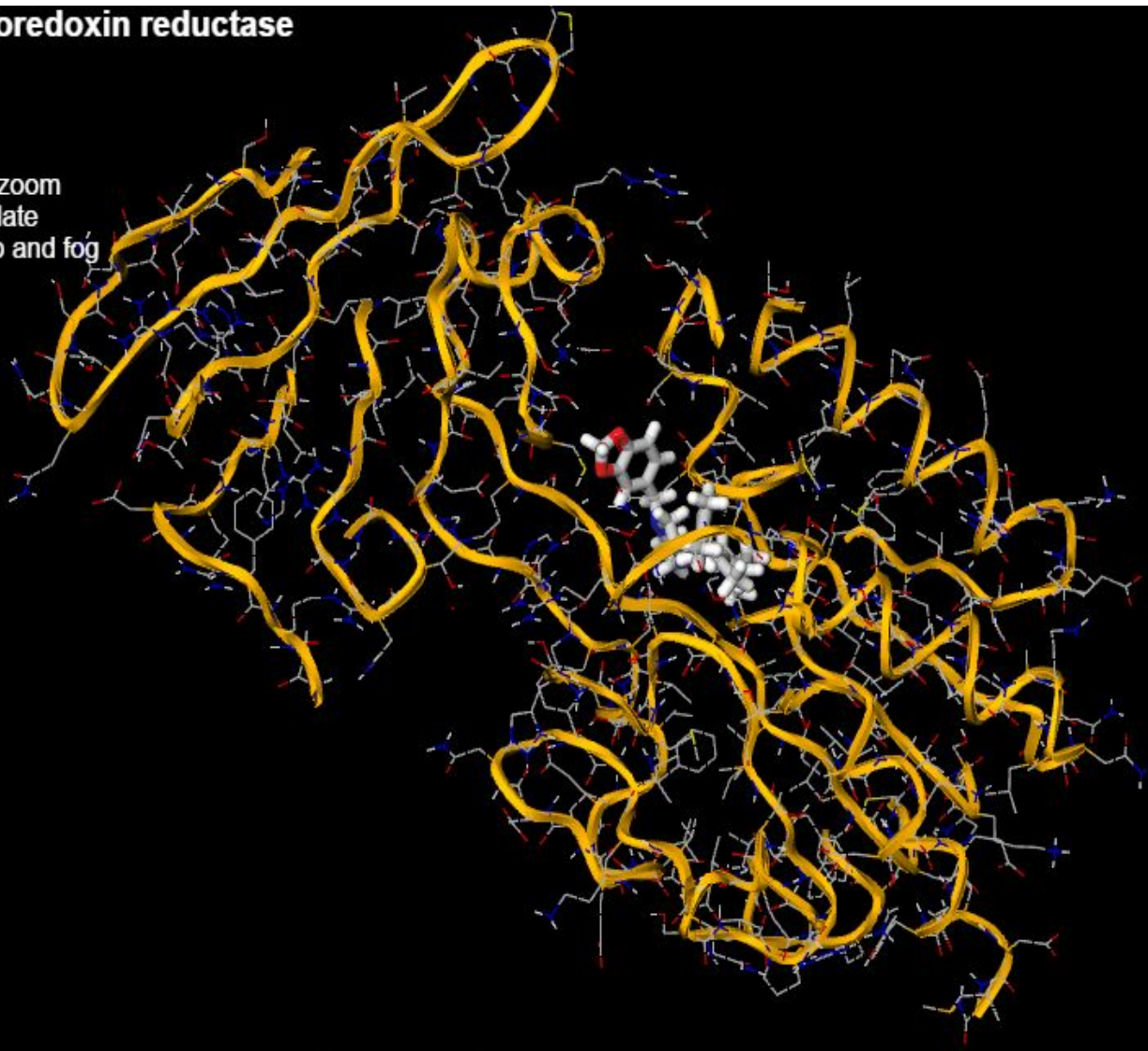
Label all residues

- 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

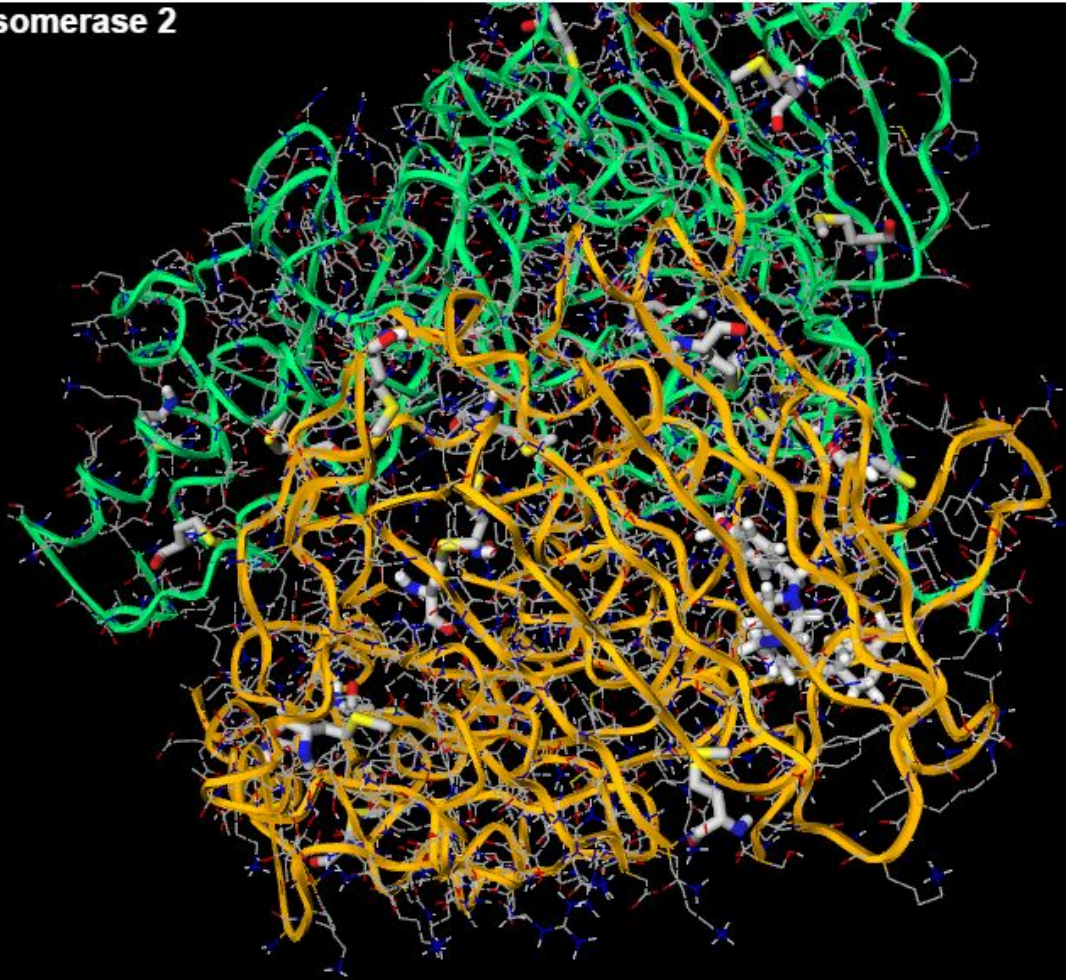
- GLY1
- THR2
- THR3
- LYS4
- HIS5
- SER6
- LYS7
- LEU8
- LEU9
- ILE10
- LEU11
- GLY12
- SER13
- GLY14
- PRO15
- ALA16
- GLY17
- TYR18
- THR19
- ALA20
- ALA21
- VAL22

РЕЗУЛЬТАТ РАБОТЫ В DOCKING 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

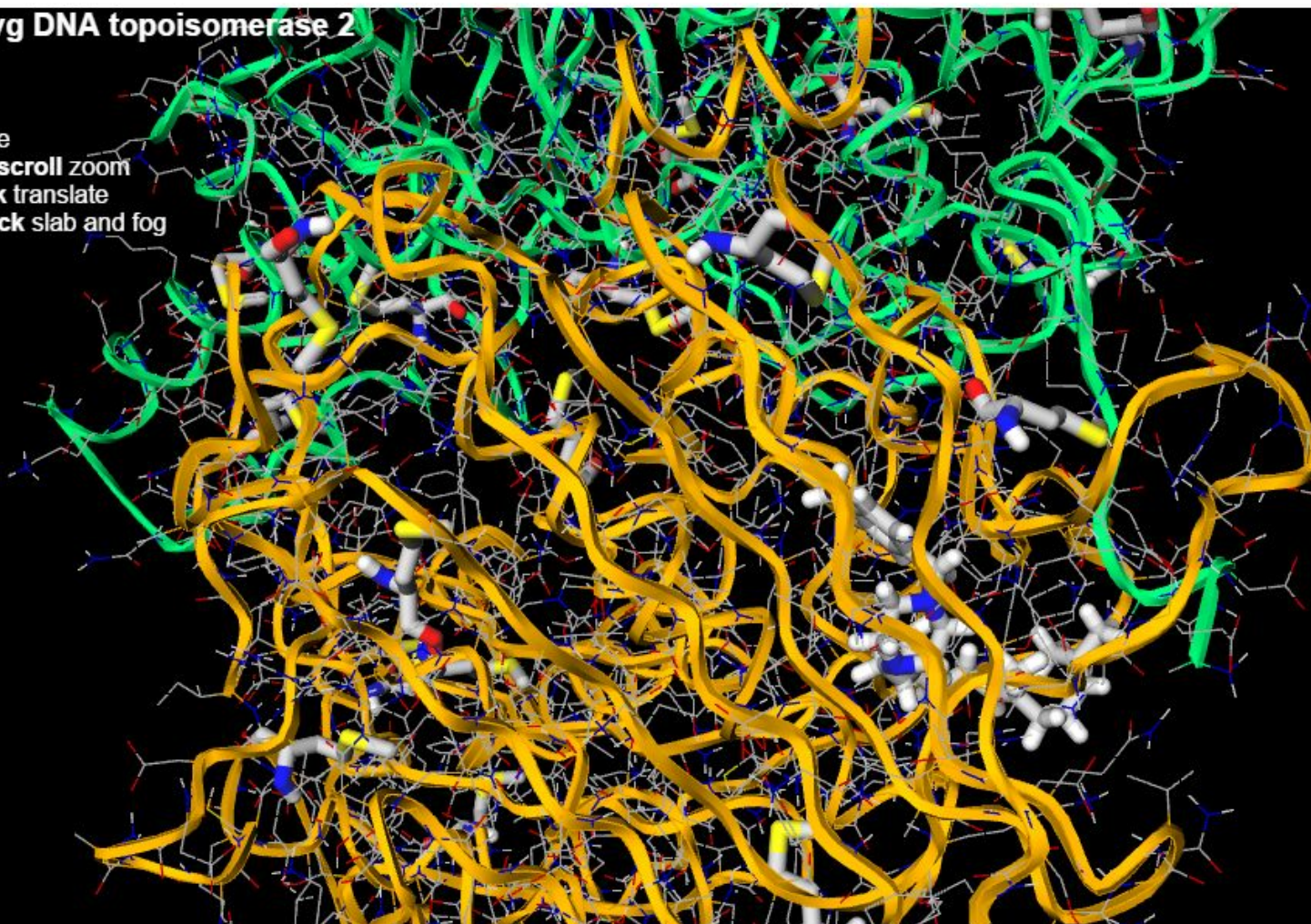
download PDB

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

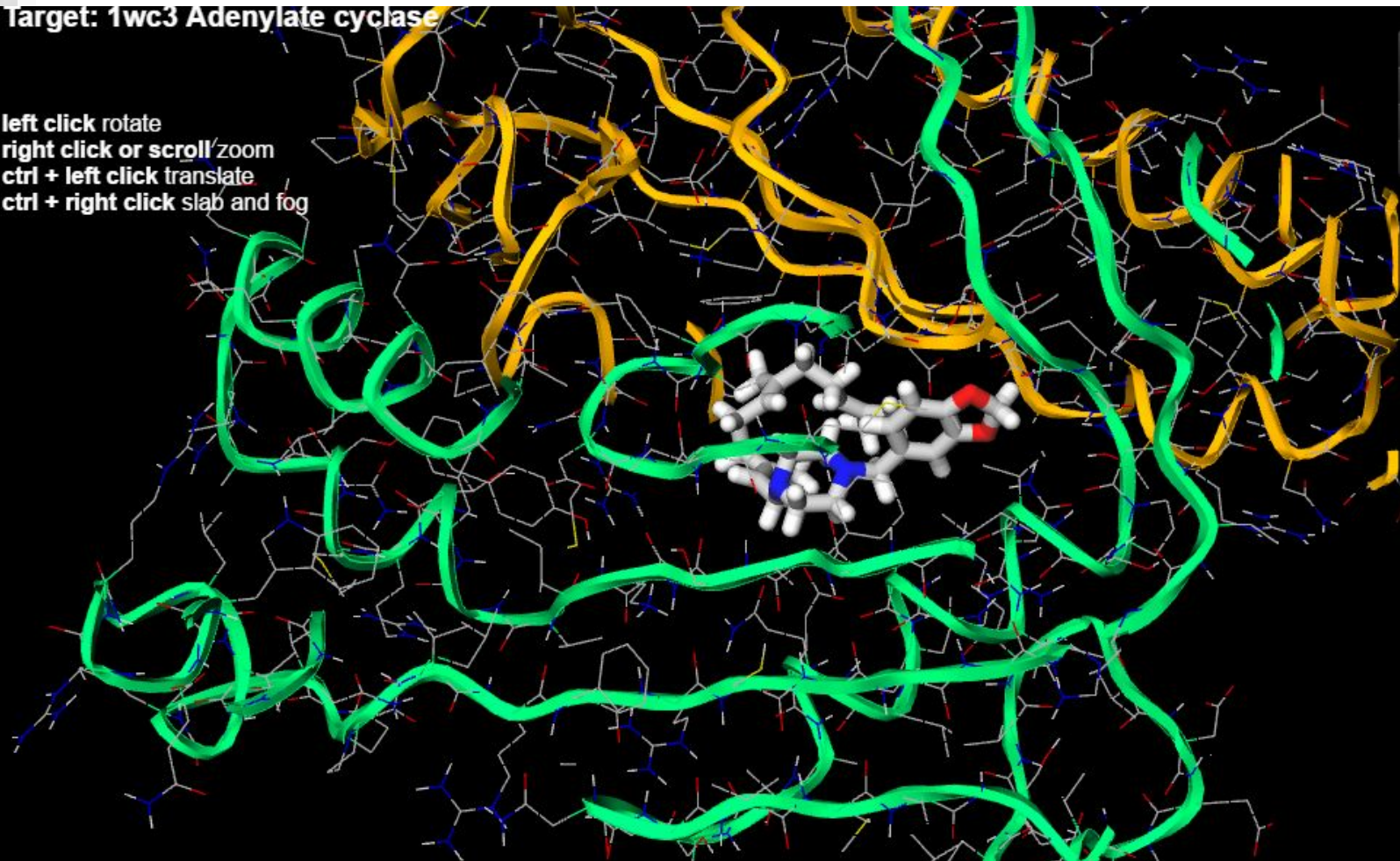
Docking pose	Docking score		
#1	-7.3	VISUALIZE POSE	DOWNLOAD POSE
#2	-7.3	VISUALIZE POSE	DOWNLOAD POSE
#3	-7.2	VISUALIZE POSE	DOWNLOAD POSE
#4	-7.0	VISUALIZE POSE	DOWNLOAD POSE

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

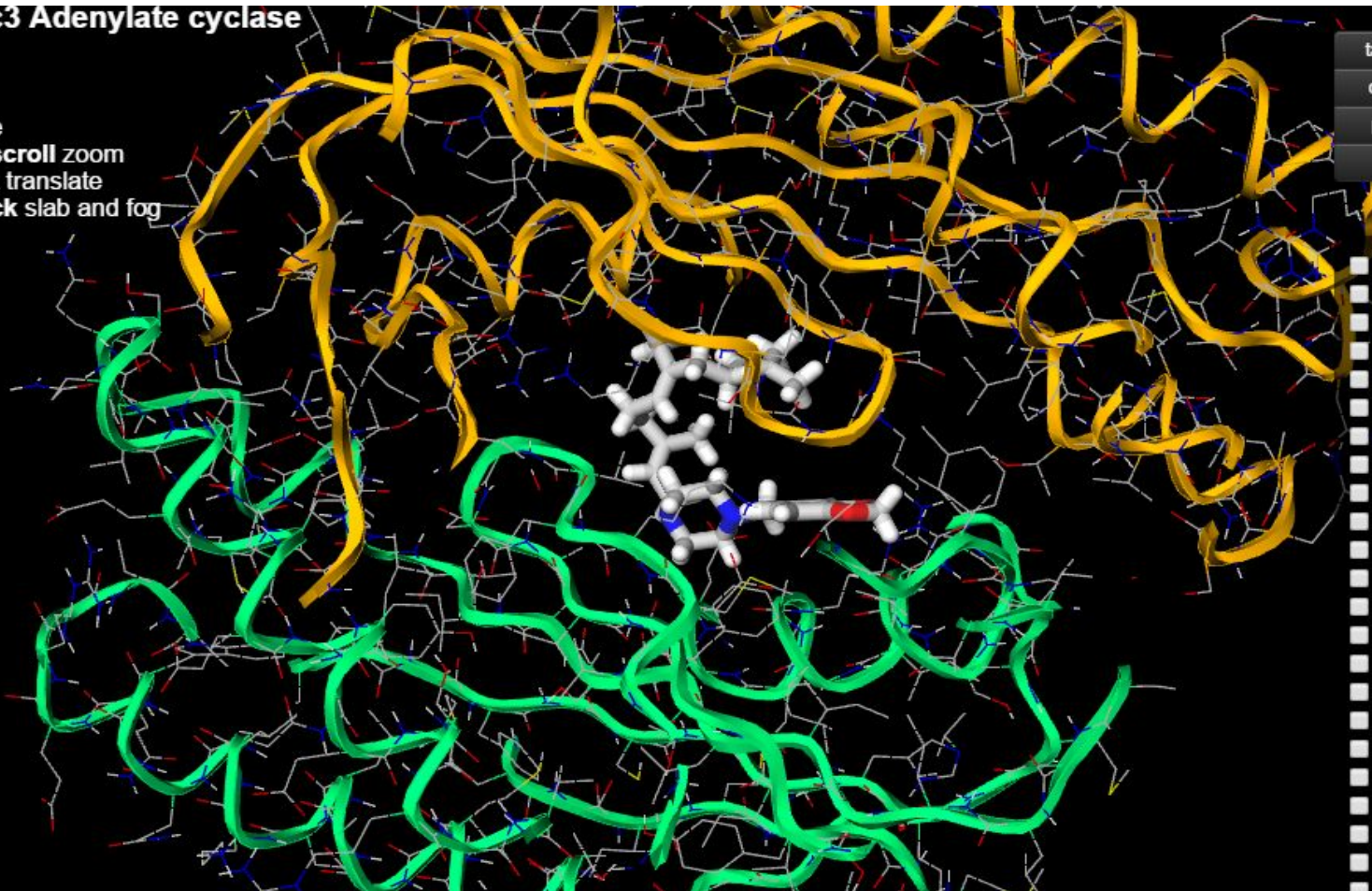
download PDB

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.