

1. Полученная информация о препарате из первого задания

- a. **Действующее вещество:** Силденафил
- b. **Область применения:** показания к применению при импотенции, лечение лёгочной гипертензии, лечение синдрома Рейно.
- c. **Молекулярный механизм действия:** Избирательно воздействует на циклическую гуанозинмонофосфат (цГМФ) специфичную фосфодиэстеразу 5 типа (PDE5) и ингибирует ее, тем самым внутриклеточная концентрация циклического нуклеотида падает, что приводит к длительному расслаблению гладкой мускулатуры.

Источник - <https://ncit.nci.nih.gov> поиск по слову viagra

2. Полученный ноутбук с выполненным докингом (формат *.ipynb)

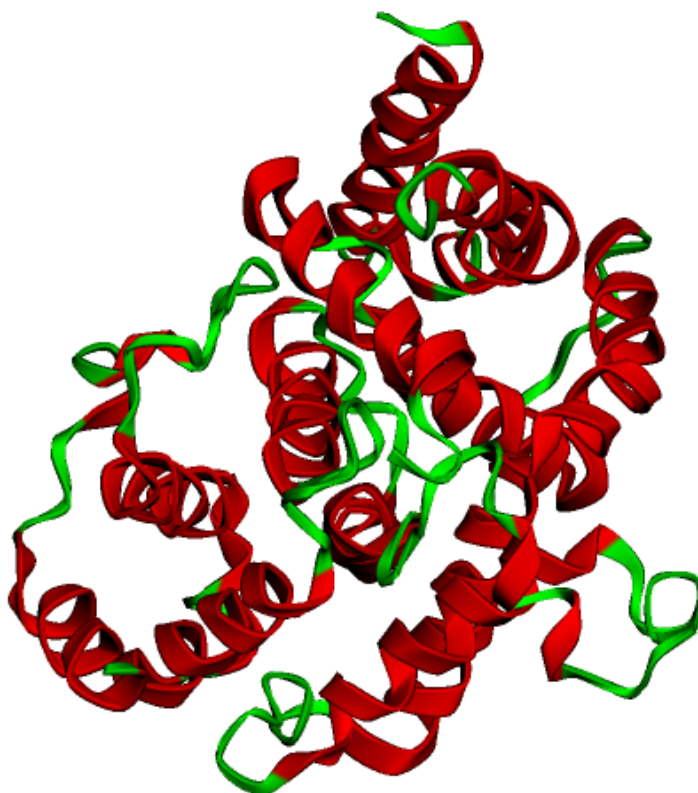
Находится в файле **res.ipynb**

3. Полученный результат докинга в формате PDB

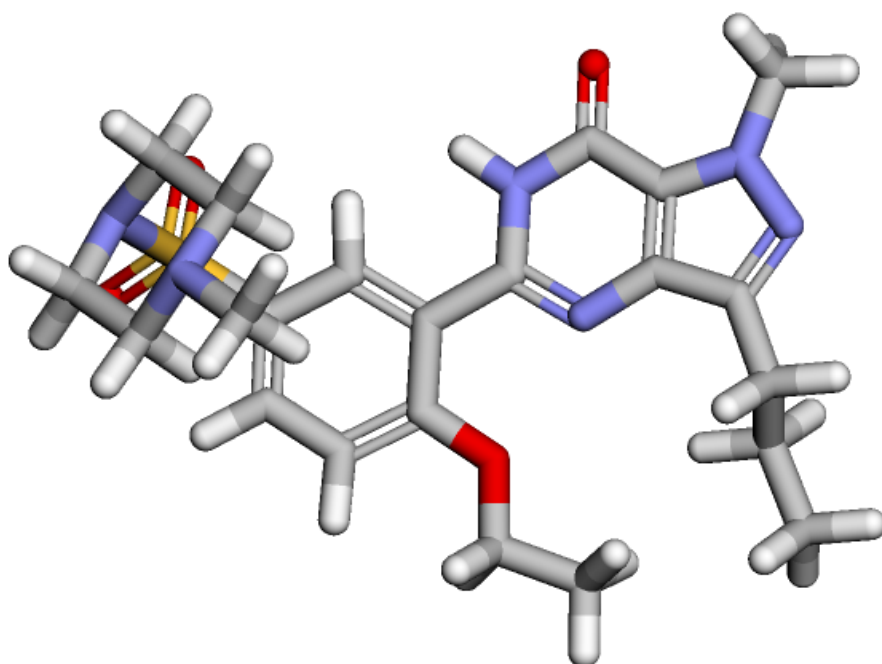
Находится в файле **VIA_1.pdb**

4. Изображения

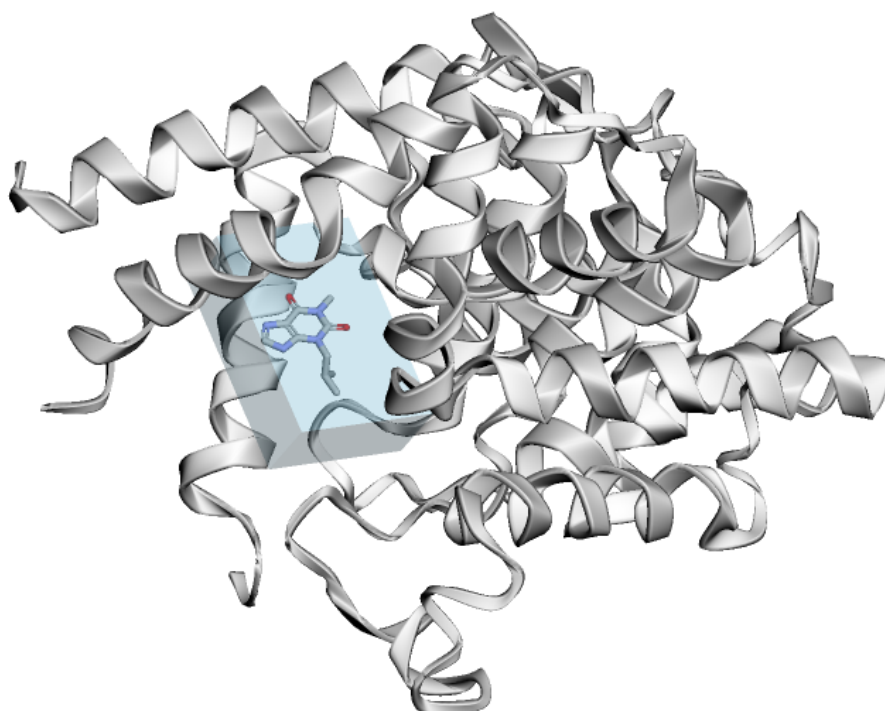
- a. Трёхмерной структуры подготовленного таргета



- b. Трёхмерной структуры исходного лиганда (лиганд Силденафил - VIA, который мы будем вставлять в таргет выше)



с. Полученного бокса (тут лиганд IBM, который шел вместе с 1RKP)



d. Полученного докинга

