

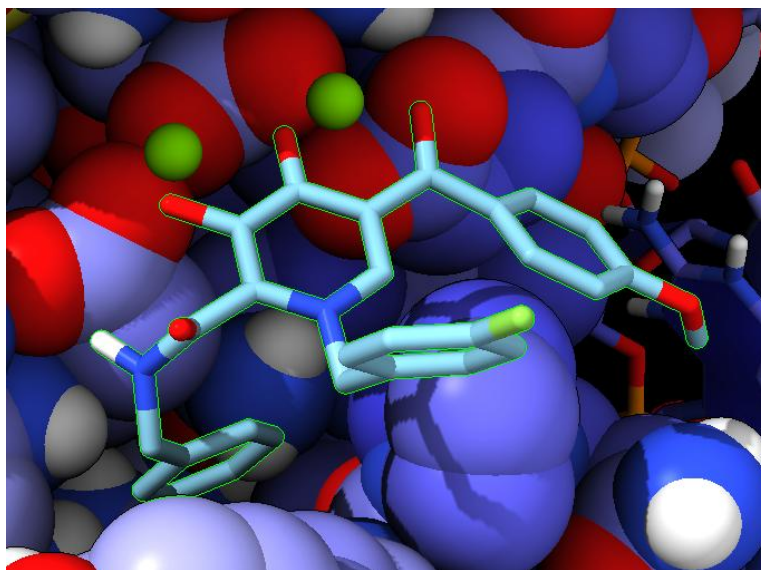
МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ 4-ПИРИДОНОВ С ВИЧ-ИНТЕГРАЗОЙ И КЭП-ЗАВИСИМОЙ ЭНДОНУКЛЕАЗОЙ ГРИППА А

Стебеньков В.Д., Обыденнов Д.Л., Сосновских В.Я., Обыденнов К.Л.

Уральский федеральный университет
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

4-Пиридоны представляют собой важный класс гетероциклических соединений, обладающих разнообразными химическими и биологическими свойствами. Их производные нашли широкое применение в медицине, так как их структурные характеристики позволяют им взаимодействовать с различными биологическими мишенями, проявляя значимую противовирусную активность, например, против вируса иммунодефицита человека (ВИЧ) или вируса гриппа.

Было проведено компьютерное моделирование ряда замещённых 4-пиридонов и его полициклических производных с применением молекулярного докинга в ПО Autodock Vina. В качестве мишеней использовались ВИЧ-интеграза и кэп-зависимая эндонуклеаза гриппа типа А. По результатам моделирования определены энергетические параметры и сайты связывания производных 4-пиридонов с соответствующими белками. Из полученных значений энергий связывания выявлено, что некоторые соединения проявляют высокую афинность к соответствующим мишеням, что является значимым признаком противовирусной активности.



Вид комплекса замещённого 3-гидрокси-4-пиридона и ВИЧ-интегразы