

Домашнее задание №6 “Докинг лекарственных формул”

- 1) Я выбрал препарат “Виагра”. Действующее вещество препарата: силденафила цитрат. Способ применения: внутрь.

Показания к применению:

Лечение нарушений эрекции, характеризующихся неспособностью к достижению или сохранению эрекции полового члена, достаточной для удовлетворительного полового акта.

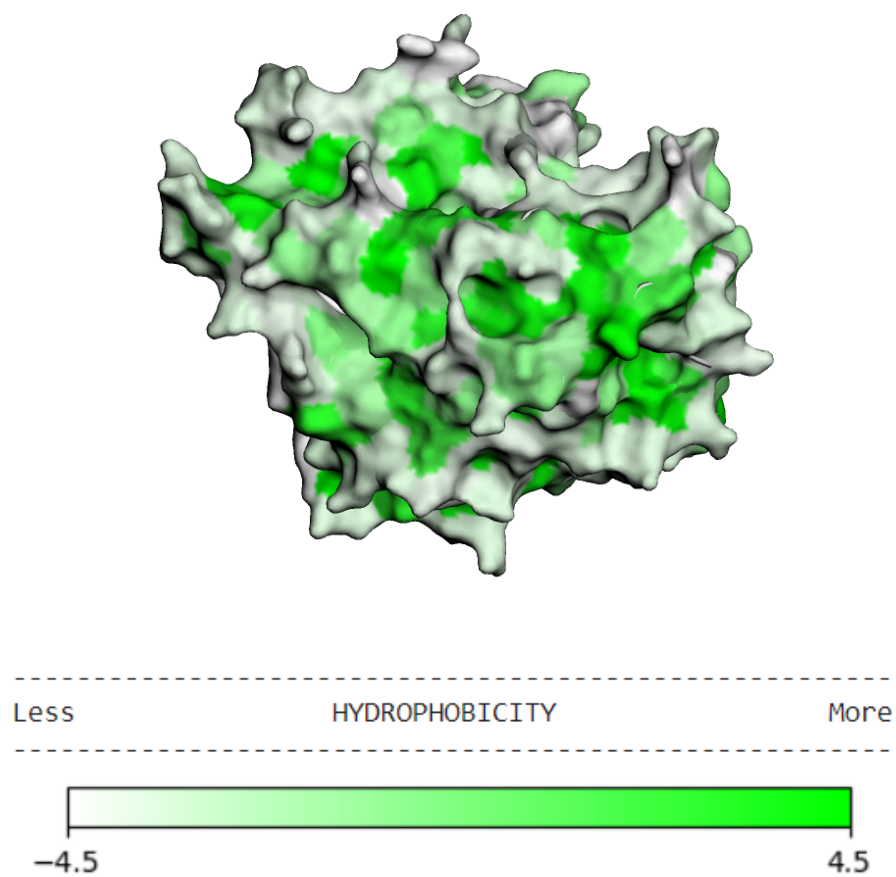
Механизм действия:

Реализация физиологического механизма эрекции связана с высвобождением оксида азота (NO) в кавернозном теле во время сексуальной стимуляции. Это, в свою очередь, приводит к увеличению уровня цГМФ, последующему расслаблению гладкомышечной ткани кавернозного тела и увеличению притока крови.

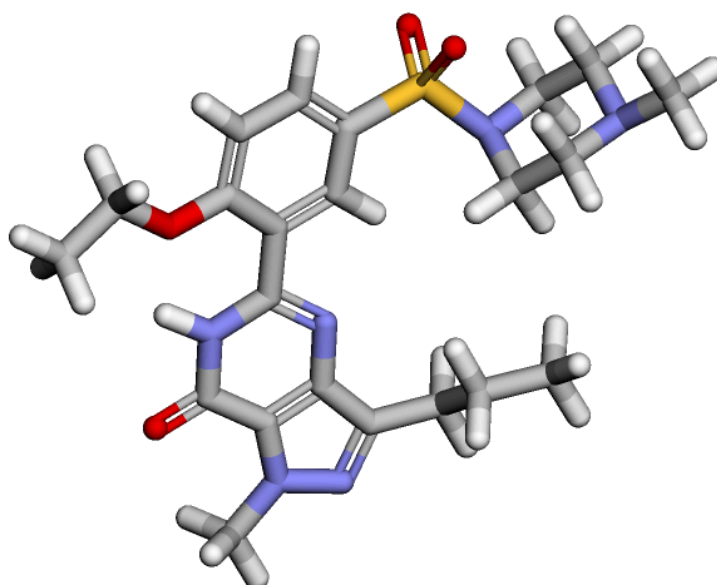
Силденафил не оказывает прямого расслабляющего действия на изолированное кавернозное тело человека, но усиливает эффект оксида азота посредством ингибирования ФДЭ-5, которая ответственна за распад цГМФ. Обязательным условием эффективности силденафила является сексуальная стимуляция.

- 2) Воспользуемся ноутбуком
https://github.com/RyanZR/labodock/blob/main/notebooks/basic_molecular_docking.ipynb.

3) Подготовленный таргет:

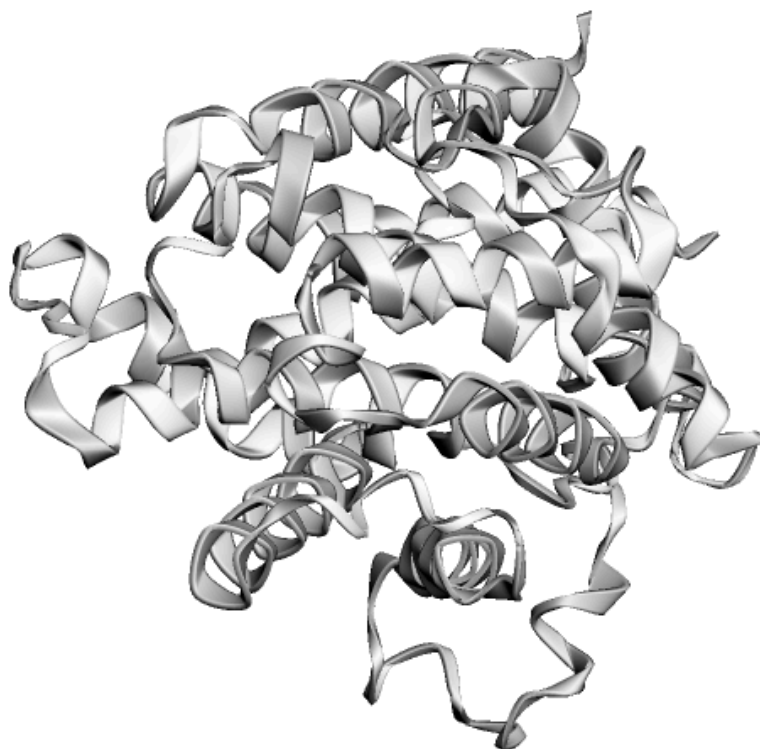


4) Исходный лиганд:



5) Полученный бокс:

center: 0, 0, 0
bysize: 10, 10, 10



6) Полученный докинг:

