

Домашнее задание 6

Препарат: кофеин.

Действующее вещество в кофеине — это сам кофеин (химическое название: 1,3,7-триметилксантин). Кофеин относится к группе алкалоидов и действует как стимулятор центральной нервной системы. Он блокирует аденозиновые рецепторы в мозге, что приводит к уменьшению сонливости и повышению бодрости.

Кофеин обладает возбуждающим свойством. Он содержится, например, в кофе, который чаще всего пьют утром для быстрого восстановления бодрости после сна. Кофеин также содержится в чайных листьях.

В медицине кофеин (и кофеин-бензоат натрия) применяют при инфекционных и других заболеваниях, сопровождающихся угнетением функций ЦНС и сердечно-сосудистой системы, при отравлениях наркотиками и другими ядами, угнетающими ЦНС, при спазмах сосудов головного мозга (при мигрени и др.), для повышения психической и физической работоспособности, для устранения сонливости.

Кофеин также используется как мочегонное средство.

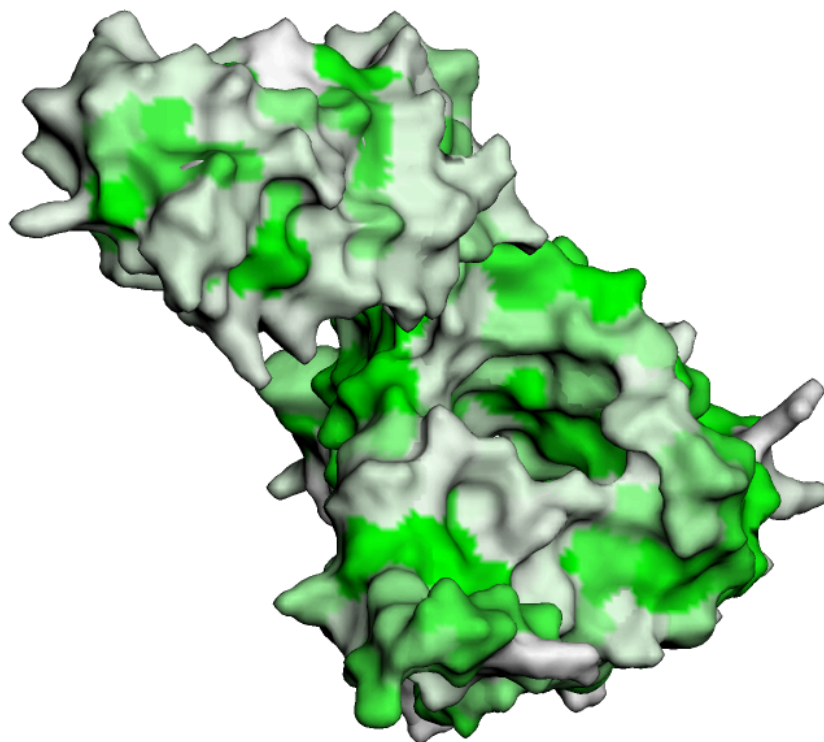
Кофеин является действующим компонентом большинства энергетических напитков и энергетических жевательных резинок.

Молекулярный механизм действия кофеина заключается в его способности блокировать аденозиновые рецепторы в коре и подкорковых структурах мозга. По химической структуре кофеин сильно напоминает молекулу аденозина (нейромедиатора, вызывающего чувство усталости). Поэтому он имеет возможность соединяться с его рецепторами, закрепляясь в них и имитируя все особенности взаимодействия. Разница заключается лишь в том, что у кофеина не хватает двух связей, которые активируют передачу импульса. То есть он занимает место аденозина и таким образом «обманывает» организм, «притворяясь» медиатором, но не выполняя его функций. В результате этого не наступает усталость, и организм продолжает активно работать. Клинически это выглядит как увеличение мыслительной и физической трудоспособности.

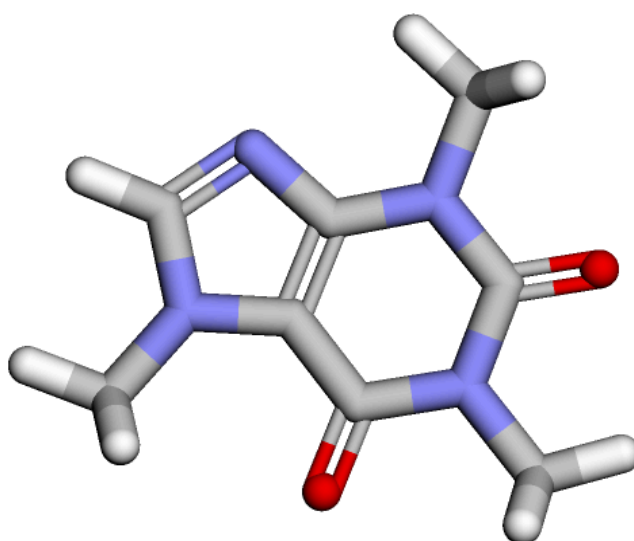
Также кофеин блокирует фермент фосфодиэстеразу (который разрушает цАМФ), что ведёт к внутриклеточному накоплению циклического аденозинмонофосфата (цАМФ). цАМФ — вторичный медиатор, через который осуществляются эффекты различных физиологически активных веществ,

прежде всего, адреналина. Таким образом, накопление цАМФ приводит к адреналино-подобным эффектам.

Трёхмерная структура таргета:



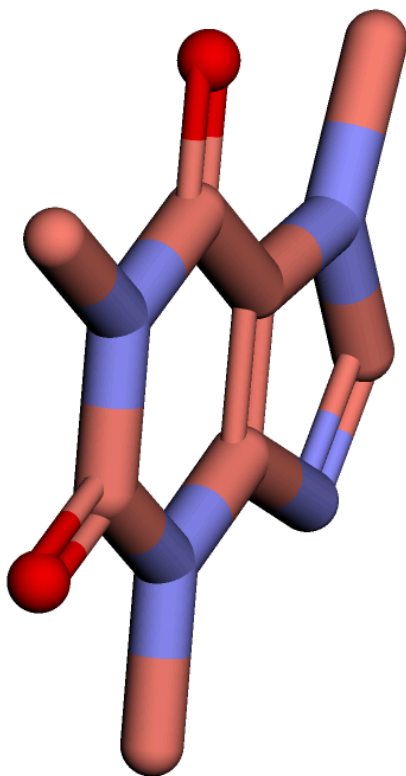
Трёхмерная структура исходного лиганда:



Полученный бокс:



Полученный докинг:



A 3D stick model of a chemical structure, rendered in red and blue. The structure is a complex, branched molecule with several oxygen atoms (red) and nitrogen atoms (blue). The model shows the spatial arrangement of atoms and bonds, highlighting the molecular geometry.