

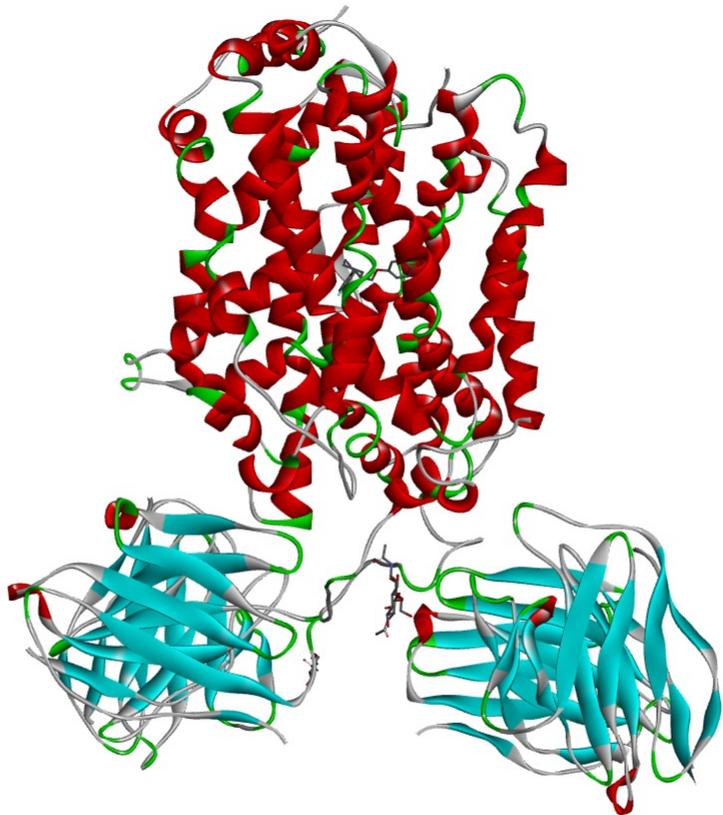


ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРАЗОЛА НА БЕЛКИ ГОЛОВНОГО МОЗГА *IN SILICO*

Уразбаев Максат Азатович



РЕЦЕПТОРЫ И ФЕРМЕНТЫ ЦНС



Caspase 3 (3KJF)

Tyrosine protein kinase (4at3)

Serotonin transporter (6dzw, 6dzz,
6dzy, 6dzv)

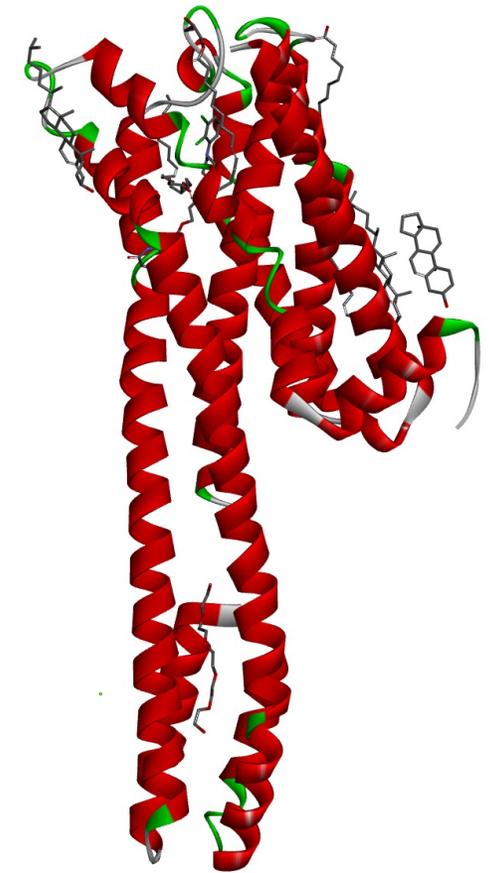
Alpha2A adrenergic receptor
(6kux)

5-HT2A Serotonin Receptor
(6wha, 7voe)

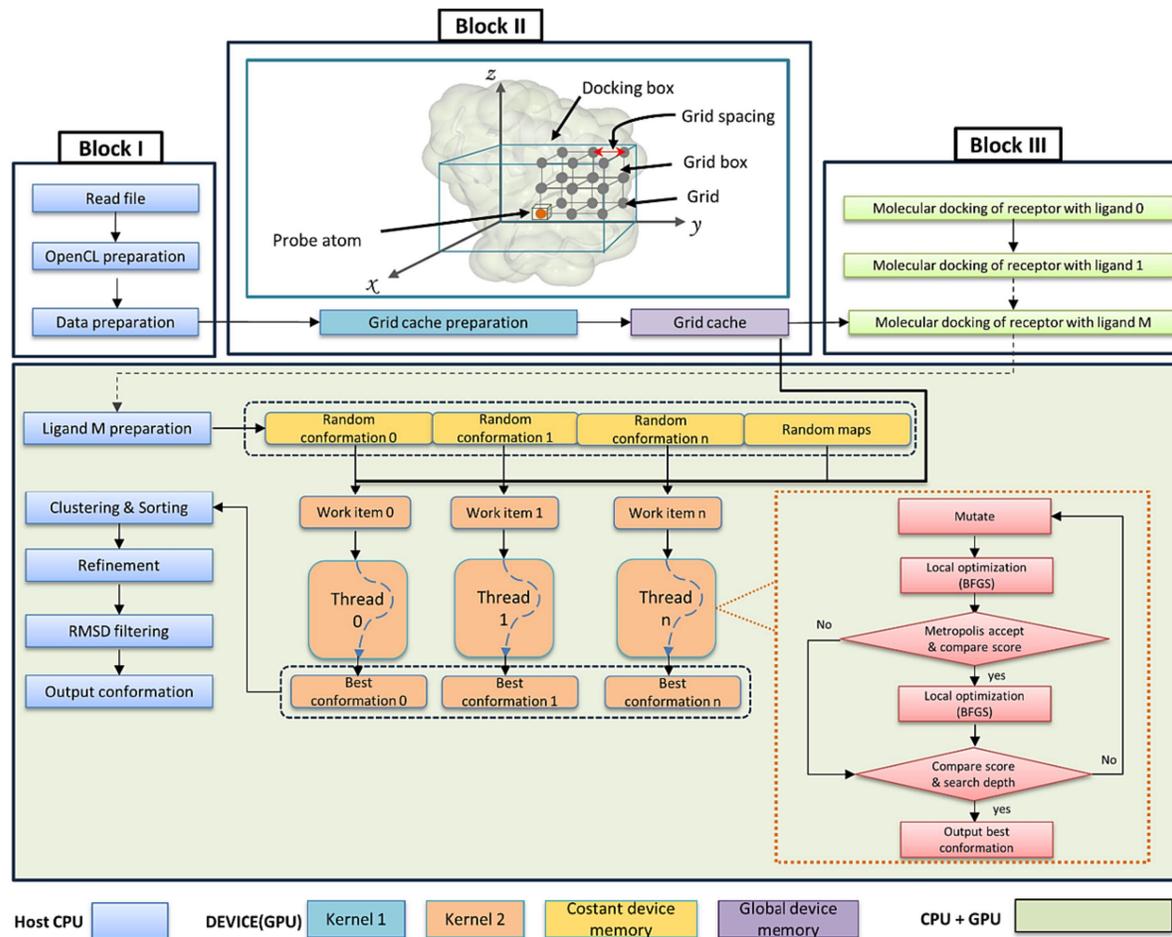
5-HT1A (7e2z)

Calcium-sensing receptor (7dd5)

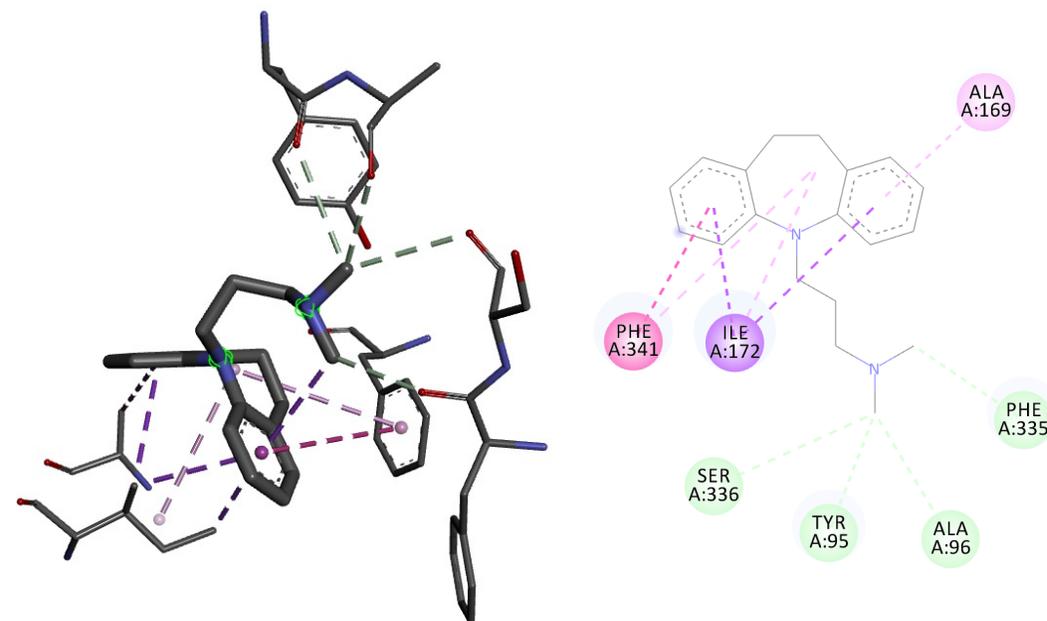
NMDA-receptor (7eoq)



Метод исследования



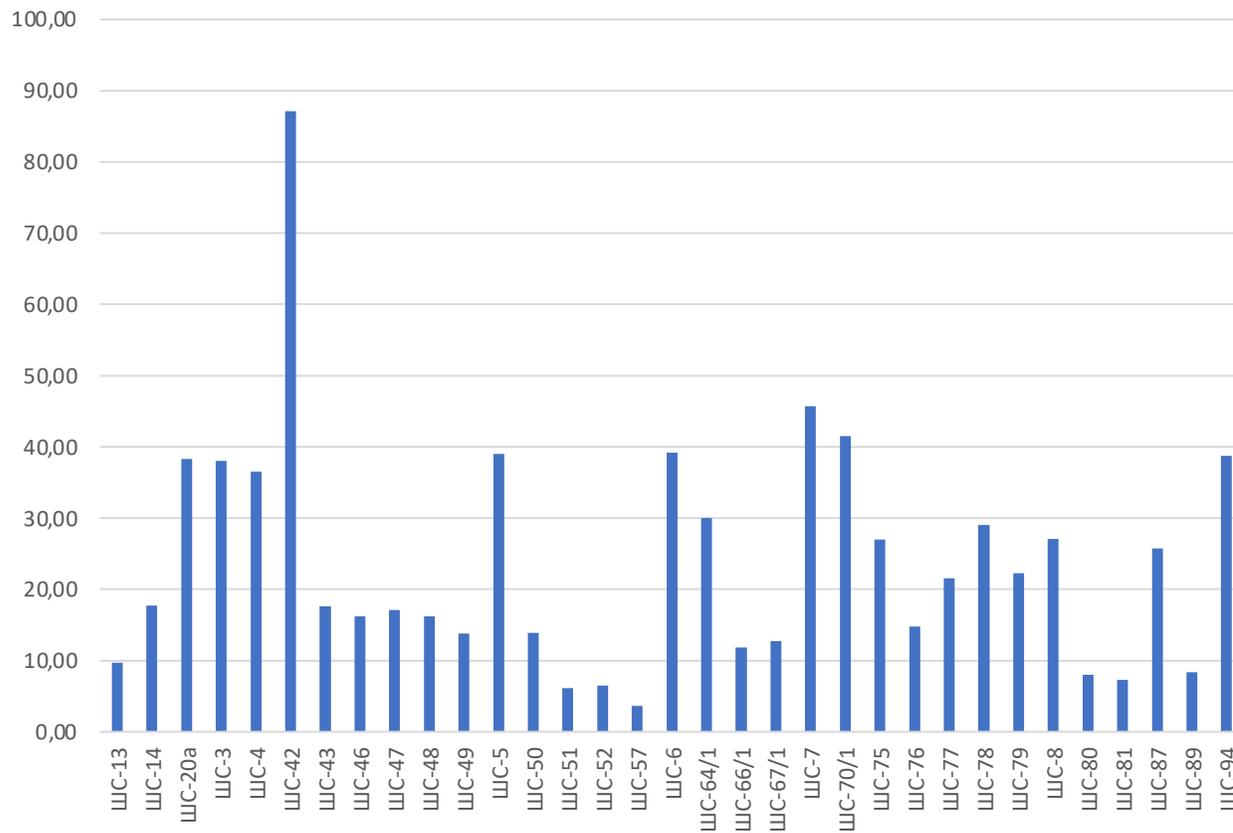
Скрининг проводился в программе Autodock Vina
Оценивались энергии связывания и поза связывания.



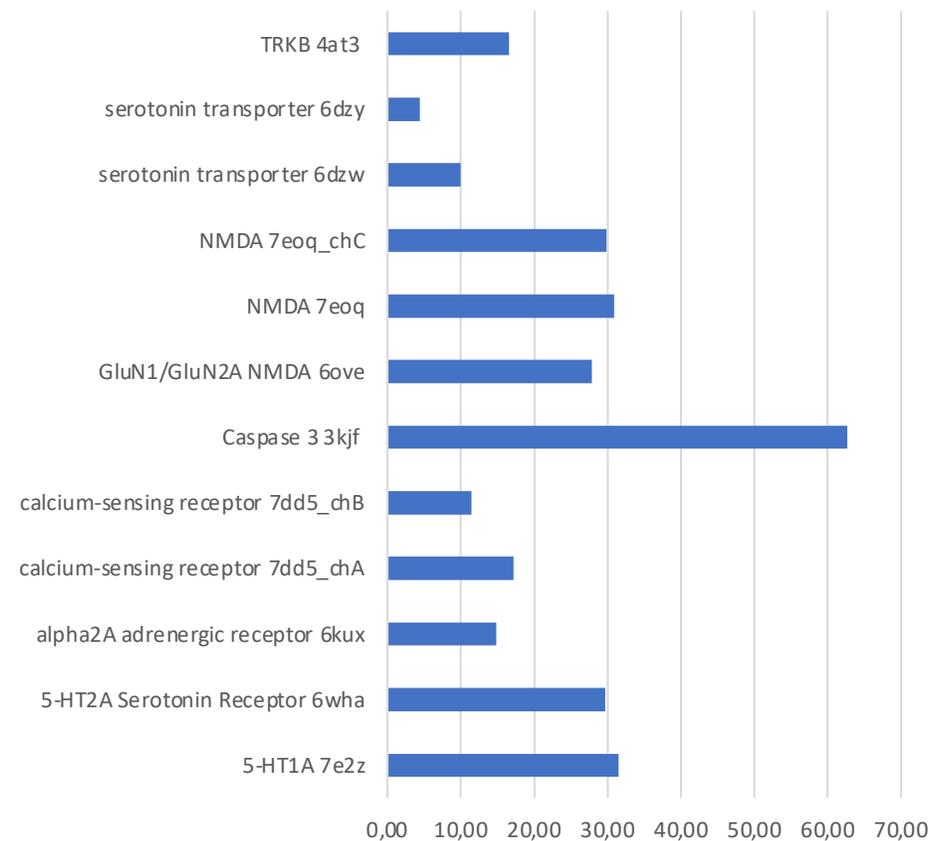
СКРИНИНГ *IN SILICO*



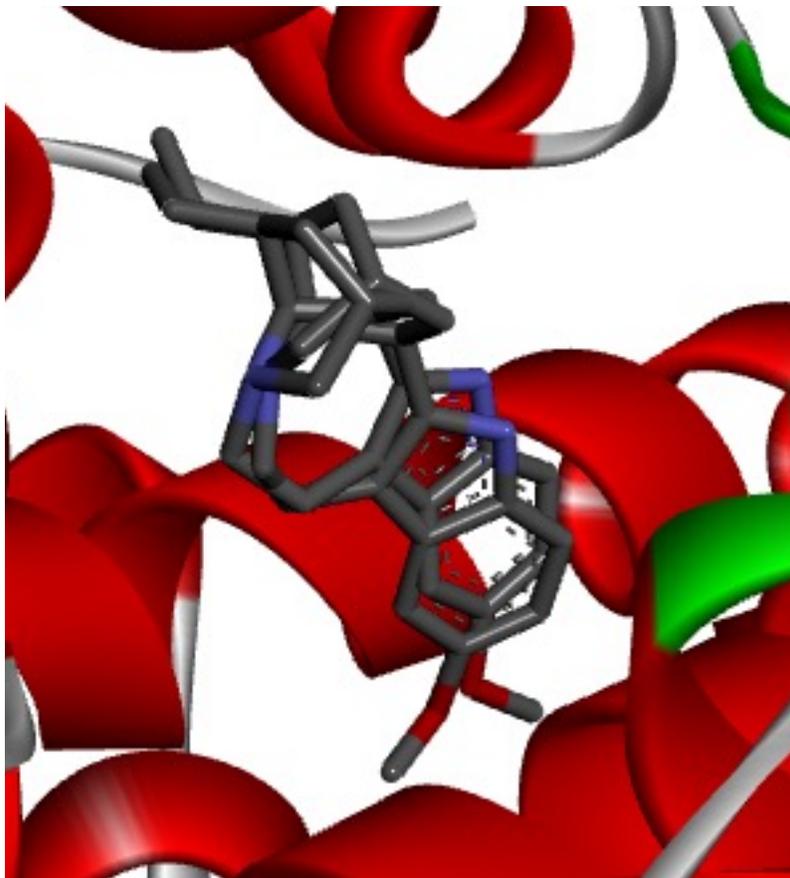
средняя КИ



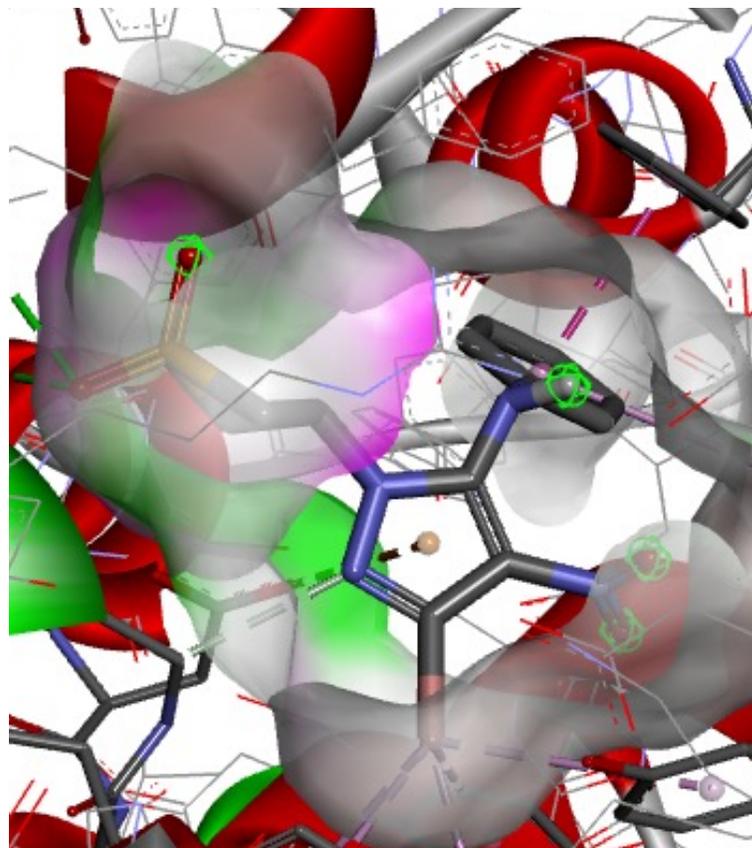
средняя КИ



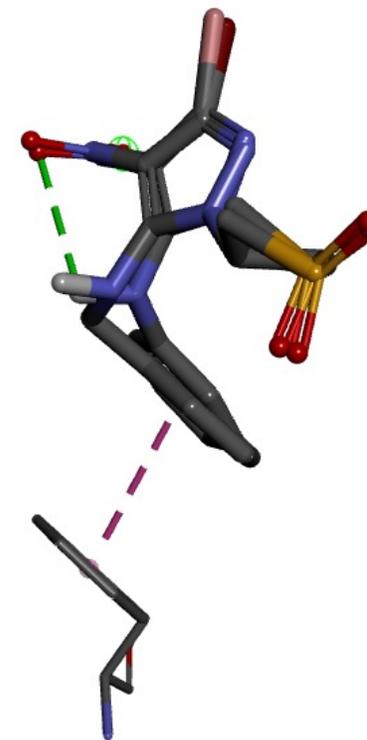
Результаты скрининга



Расчетное и фактическое
положения ибогаина в
активном сайте SERT

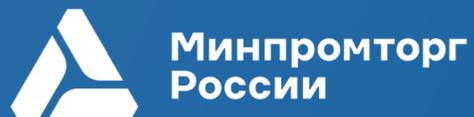


Взаимодействие ШС-57 с АК активного сайта SERT, В.
Положения ШС-52, ШС-57 и PHE341.



СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ

ОРГАНИЗАТОРЫ



S GROUP

ГЕНЕРАЛЬНЫЙ ПАРТНЕР



СТРАТЕГИЧЕСКИЙ ПАРТНЕР



ГЕНЕРАЛЬНЫЙ
ИНФОРМАЦИОННЫЙ ПАРТНЕР



ГЕНЕРАЛЬНЫЙ ИНФОРМАЦИОННО-
АНАЛИТИЧЕСКИЙ ПАРТНЕР

Фармацевтический
ВЕСТНИК

СТРАТЕГИЧЕСКИЙ
ИНФОРМАЦИОННЫЙ ПАРТНЕР

ФАРММЕДПРОМ