

Т.И. Маджидов: Не очень понятно выделение фармакофоров на последних слайдах. На слайде 15 в подофиллотоксине синим выделен центр D1, а бордовым – Р-акцептор. В то же время на остальных молекулах выделенный синим центр не имеет Н-донорных атомов, а бордовые – не имеют Н-акцепторов. Аналогично на следующем слайде. Это ошибка? Потому что соответствие центров абсолютно непонятно.

А.А. Малеев: Совершенно верно, в некоторых молекулах некоторые фармакофорные центры (например, D1) заняты совершенно другими группами атомов лигандов. Однако, нами сравнены энергии связывания сходных по расположению в колхициновом сайте молекул, в том числе с учетом «неправильно» занятых фармакофорных центров.

Т.И. Маджидов: Каким образом выделяли фармакофоры на молекулах, слайды 14-17? Это было сделано на основе докинга или иных соображений?

А.А. Малеев: При помощи оболочки AutoDockTools были визуализированы комплексы белок-лиганд, и для каждого из них построено аминокислотное окружение. Исходя из аминокислотных остатков тубулина, с которыми связаны молекулы лигандов, и определялись занятые молекулой фармакофорные центры.