

П.Г. Полищук: Как определялся сайт связывания, в котором проводился докинг, в случае эндорибонуклеазы и S-белка, для которых нет данных о комплексах с низкомолекулярными ингибиторами?

А.Х. Тальдаев: Действительно, при проведении исследования возникли трудности с определением активных сайтов.

1) NSP15
Эндорибонуклеаза
(<https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2020.03.02.968388v1.full.pdf>). Мы выбрали уридилат-специфичный активный сайт, и центр GRID-box 25*25*25 Å был установлен в центре этого сайта среди этих аминокислот:

2) Межбелковый интерфейс S-белка и АПФ2
(<https://www.biorxiv.org/content/10.1101/2020.02.19.956946v1.full.pdf>). Первой попыткой установить активный сайт это был слепой докинг эриодиктиола в программе BetaDock. Но результат был отрицательным-биологически нерелевантная позиция лиганда. Далее, в литературе нашёл информацию про ключевые аминокислоты, которые участвуют в узнавании S-белком АПФ2. И центр выбрал по Гистидину 34 по цепи АПФ2.