

Д.К. Нилов: В Вашей презентации обсуждается возможность образования галогеновой связи между лигандом и GTP и демонстрируется с помощью AutoDock Vina. Поскольку я сам занимаюсь разработкой программы для анализа галогеновых связей между лигандом и белком, мне интересно уточнить, реализован ли в оценочной функции AutoDock отдельный учет данного типа взаимодействия, или же оно рассматривается как совокупность обычных кулоновских/ван-дер-ваальсовых. Насколько Вы доверяете результатам моделирования галогеновой связи?

Н.А. Зефирова: Спасибо большое за интерес к презентации. Относительно учета галогенового связывания - отдельного учета этого взаимодействия в AutoDock Vina нет, теоретически, в лаборатории Медицинской химии химфака МГУ в группе В.А. Палюлина занимаются модификацией AutoDock Vina для включения в оценочную функцию учета данного типа взаимодействия. Сравнение с литературными данными о параметрах галогенового связывания с нуклеотидами показывает, что в нашем случае есть все основания считать возможным образование такой связи, правда, слабой.