

Библиотеки с противовирусной активностью  
к 50 видам вирусов (в т.ч. HIV, HCV, вирусам  
гриппа, коронавирусам и др)

# AntiViral Targets

## Virus

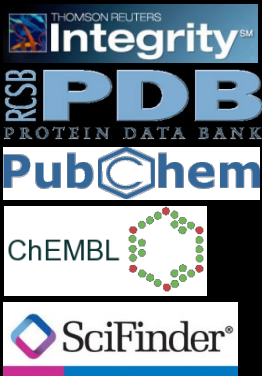
## Viral Targets

Coronavirus	Mpro, PLpro, RdRp & other
HIV	Revertase, NL4-3, Fusion, Integrases, Capsid Protein p24, Nucleocapsid, CCR5 & other
Influenza	Neuraminidase, NS1, NS1A
HCV	NS3 Helicase, NS3/4A protease, NS5A, NS5B & other
Other viral targets	Over 50 targets evaluated



# Core strategy

## Reference Antiviral set



## Combined annotated pool

### Analysis of:

- isosteric & bioisosteric transformations
- hot-spots & crucial binding points
- scaffold hopping
- 2D/3D topological similarity
- 2D/3D fingerprints
- scaffold priority/profiling

## Final reference set for library preparation

## CADD

- 2D/3D Similarity
- 2D/3D Topological analogues
- 3D Pharmacophore modeling

## Approach

- Focus on novel chemistry
- Scaffold prioritization

MCFs

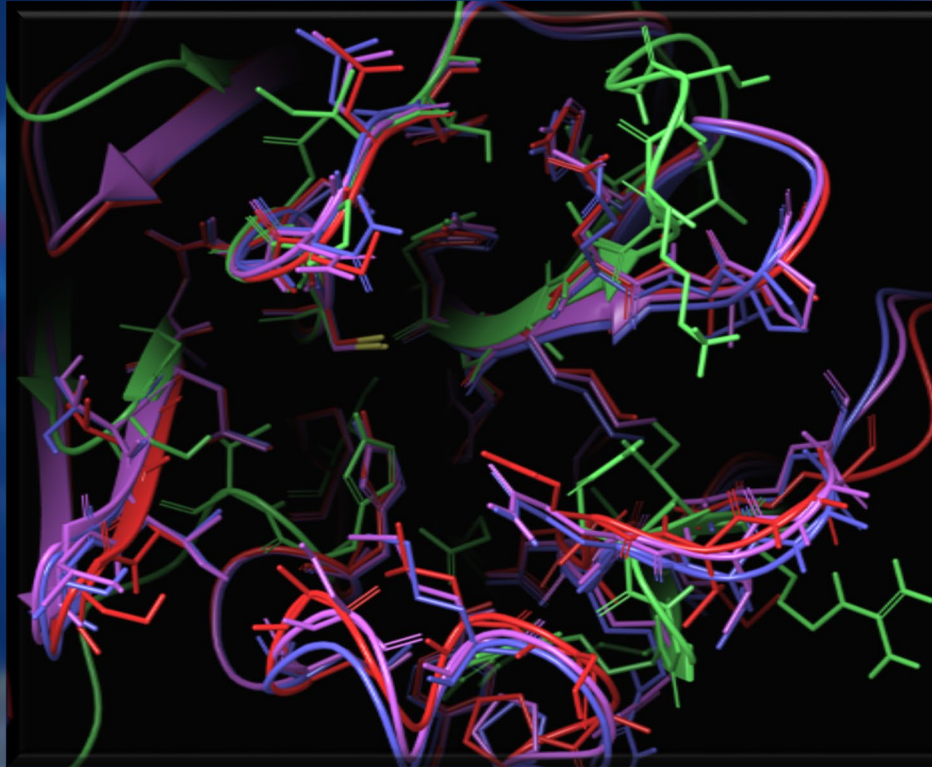
**Final library  
(21K Cmpds)**



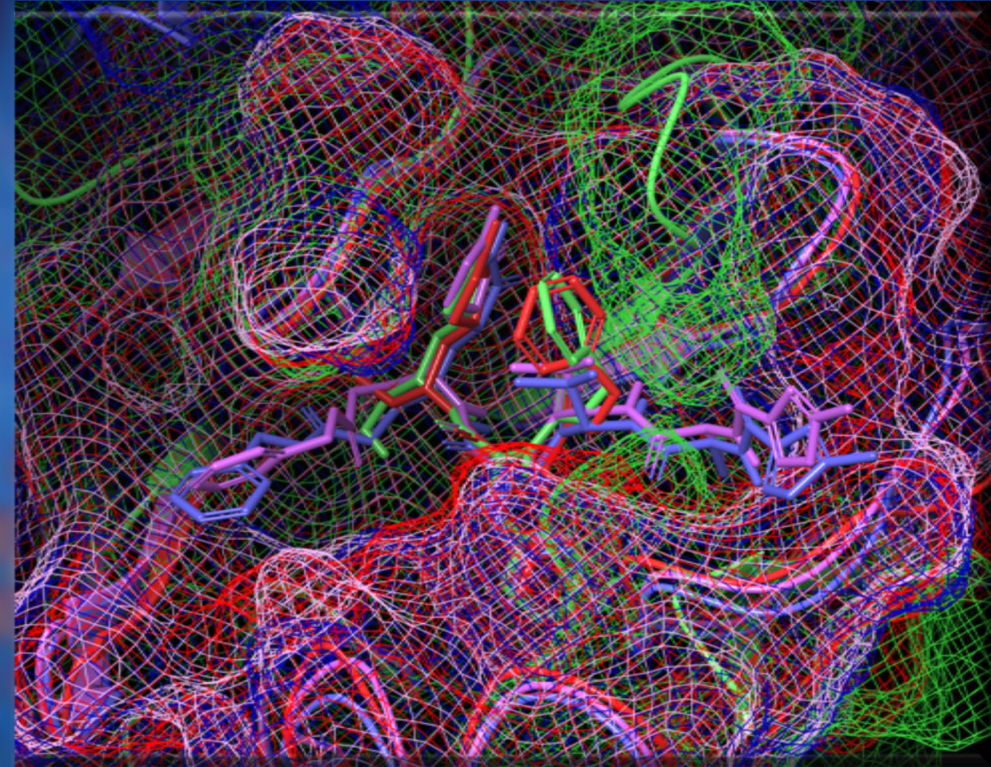
# Examples of *In Silico* modeling

## Alignment active sites for 3CLpro activity with covalent inhibitors

Ribbons



Surface sites with Ligands



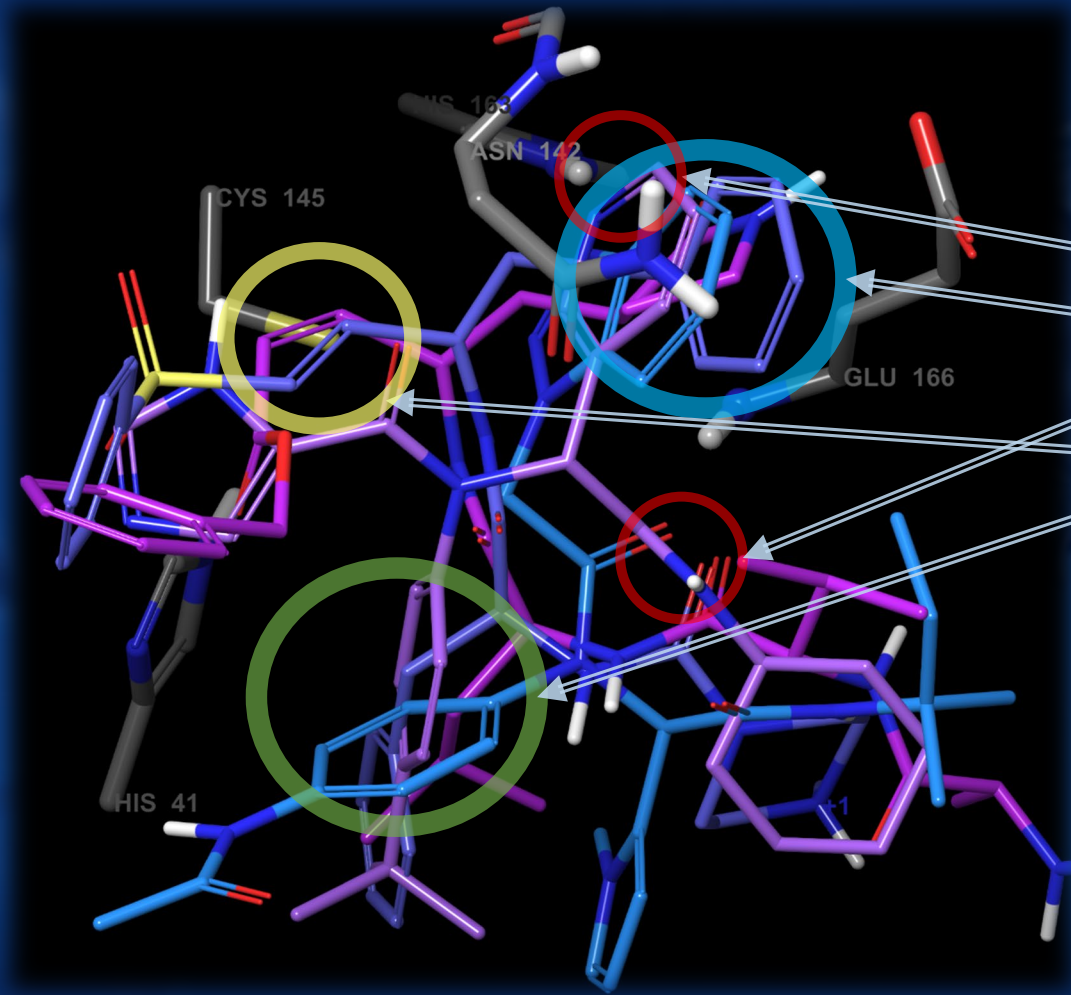
PDB code - virus

4XBC:Norovirus, 5WKJ:MERS-CoV, 2AMQ:SARS-CoV, 6LU7:SARS-CoV-2



# Examples of *In Silico* modeling

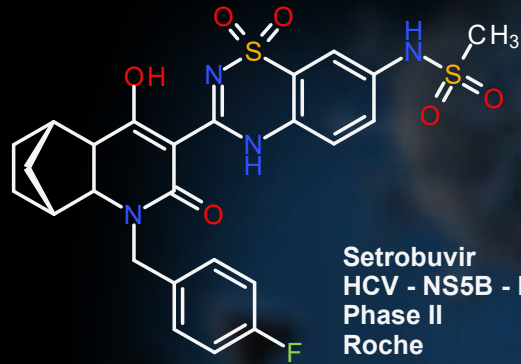
## 3D Pharmacophore modeling 3CLpro inhibitors



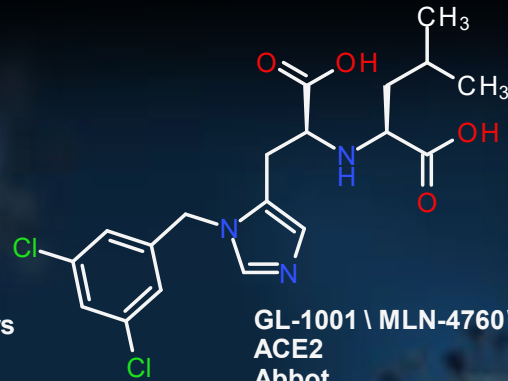
Acc  
Arom  
Arom/Lipo  
\*Cov fragment

PDB/Ligand code - virus  
4MDS/23H:SARS-CoV,  
-/APC-3316:viral proteases,  
6W63/X77:SARS-CoV-2,  
6LU7/N3:SARS-CoV-2

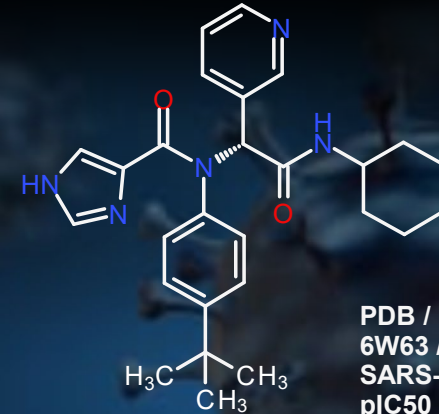
# Examples of Compounds



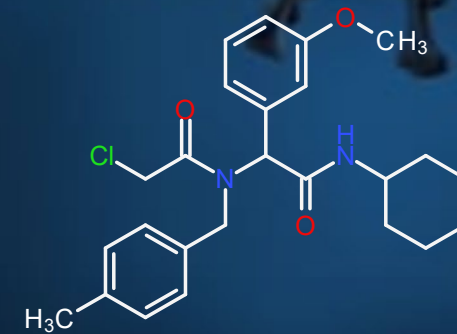
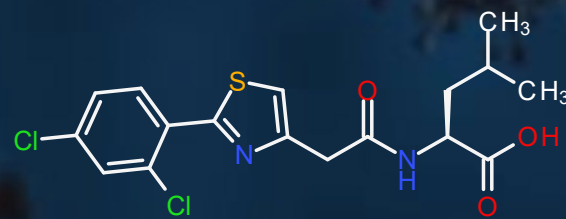
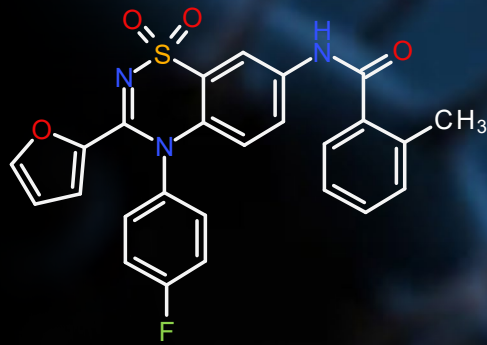
Setrobuvir  
HCV - NS5B - RdRp inhibitors  
Phase II  
Roche



GL-1001 \ MLN-4760 \ ORE-1001  
ACE2  
Abbot  
Phase I/II  
pIC50 - 8.03



PDB / Ligand  
6W63 / X77 - DOI: 10.2210/pdb6W63/pdb  
SARS-CoVs  
pIC50 - 5.2-5.8  
non-covalent





# Благодарим за внимание

Инструкция по заказу соединений из библиотеки «ХимРар»:

Наш сайт: <https://chemrar.ru/library-full-list/>

Направьте список интересующих соединений на email: [vvk@chemrar.ru](mailto:vvk@chemrar.ru)

В соответствии с вашим запросом менеджер выполнит подборку соединений и направит информацию о наличии. Имеется возможность сделать поиск по структуре/буквенному идентификатору (ID, CAS, MFCD), а также импортировать файл в различных форматах: SMILE, sdf, txt.