



Conformational Analysis and Docking Study of PPAR- γ Agonists Having Substituted Pyrrolidine Containing Thiazolidine-2,4-Dione Moiety

Lalit V. SONAWANE ^{1*}, Bhagwat N. POUL ¹ & Sanjaykumar B. BARI ²

¹ Maharashtra College of Pharmacy, Nilanga, Dist- Latur, Maharashtra 413 521, India

² H. R. Patel Institute of Pharmaceutical Education and Research,
Shirpur, Dist-Dhule, Maharashtra 425 405 India

SUMMARY. Molecular docking is a key tool in structural molecular biology and computer-assisted drug design. Conformational analysis and docking study of erythrose, ribose and substituted pyrrolidine having thiazolidine-2,4-dione moiety against peroxisome proliferator-activated receptor γ (PPAR- γ) was carried out in an attempt to analyze stable conformer. Next, a docking study of these agonists into the ligand binding domain (LBD) of PPAR- γ was performed, which reveal hydrogen bond formation to Ser289, Hie323 and Tyr473. This study will bring useful information for further development in the area of design and development of novel PPAR- γ agonists.

RESUMEN. El acoplamiento molecular es una herramienta clave en la biología molecular estructural y en el diseño de fármacos asistido por computación. Se realizó el análisis conformacional y el estudio de acoplamiento de eritrosa, ribosa y pirrolidina sustituida que tiene un resto tiazolidina-2,4-diona contra el receptor activados γ del proliferador de peroxisoma (PPAR- γ) en un intento de analizar un conformero estable. A continuación, se realizó un estudio de acoplamiento de estos agonistas en el dominio de unión al ligando (LBD) de PPAR- γ , que revelan la formación de enlaces de hidrógeno a Ser289, Hie323 y Tyr473. Este estudio aportará información útil para un mayor desarrollo en el área de diseño y desarrollo de nuevos agonistas de PPAR- γ .

KEY WORDS: Antidiabetic agents, LBD, Molecular docking, PPAR- γ , Thiazolidinedione.

* Author to whom correspondence should be addressed. *E-mail:* la1303@rediffmail.com