

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Факультет прикладной математики и информатики

Кафедра дискретной математики и алгоритмики

Аннотация к дипломной работе

**«Компьютерное моделирование и
идентификация потенциальных лекарственных
препаратов против вируса Зика»**

Шур Наталья Александровна

Научный руководитель — доктор физ.-мат. наук, профессор А. В. Тузиков

Минск, 2018

Реферат

Дипломная работа, 38 с., 13 рисунков, 6 таблиц, 13 формул, 28 источников.

ВИРУС ЗИКА, КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЛЕКАРСТВ, АНТИТЕЛО, Е-ПРОТЕИН, ФАРМАКОФОР, ВИРТУАЛЬНЫЙ СКРИНИНГ, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ.

Объект исследования — вирус Зика и химические соединения — его потенциальные ингибиторы.

Цель работы — исследовать взаимодействия в структурном комплексе Е—протеина вируса Зика и моноклонального антитела широкого защитного действия 2A10G6; идентифицировать соединения — потенциальные миметики данного антитела.

В ходе работы был проведен виртуальный скрининг базы химических соединений PubChem по модели фармакофора, построенной на основании данных о взаимодействиях в структурном комплексе ZIKV sE / 2A10G6; к полученному набору соединений был применен молекулярный докинг.

В результате были идентифицированы химические соединения, которые способны имитировать связывание антитела 2A10G6 с белком ZIKV sE.

Областью применения являются исследования по разработке лекарственных препаратов против вируса Зика.

Abstract

Graduate work, 38 p., 13 figures, 6 tables, 13 formulas 28 sources.

ZIKA VIRUS, COMPUTER AIDED DRUG DESIGN, ANTIBODY, E-PROTEIN, PHARMACOPHORE, VIRTUAL SCREENING, MOLECULAR DOCKING.

Object of research — Zika Virus and chemical compounds — its potential inhibitors.

Purpose — explore structure complex of ZIKV E-protein and Flavivirus Broadly Protective Antibody 2A10G6; identify compounds — potential mimetics of this antibody.

During the current research virtual screening of PubChem compounds database was performed with pharmacophore model based on the structure complex ZIKV sE / 2A10G6 interactions information; then molecular docking was carried out with compounds obtained by virtual screening.

As *results* set of chemical compounds were obtained and which are able to imitate bounding of 2A10G6 with ZIKV sE.

The scope is researches on antiviral drugs design.