

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Факультет прикладной математики и информатики

Кафедра биомедицинской информатики

Аннотация к дипломной работе

«Конструирование новых ингибиторов коронавируса SARS-CoV-2 с помощью программного пакета AutoGrow4 и методов молекулярного моделирования»

Жданов Андрей Александрович

Научный руководитель — доктор химических наук, профессор, профессор кафедры биомедицинской информатики ФПМИ Андрианов А. М.

Минск, 2024

Реферат

Дипломная работа, 73 страницы, 37 рисунков, 7 источников

Ключевые слова: МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА, ИНГИБИТОРЫ, AutoGrow4, AmberTools24, КОРОНАВИРУС SARS-CoV-2, НАВИТОКЛАКС.

Объектами исследования являются методы поиска новых ингибиторов коронавируса SARS-CoV-2

Предметом исследования является генерация и анализ новых ингибиторов коронавируса SARS-CoV-2.

Целью работы является получение нового ингибитора коронавируса SARS-CoV-2, обладающего лучшими по сравнению с Навитоклаксом свойствами.

В ходе работы были изучены и проанализированы известные алгоритмы генерации новых соединений на основе существующих, а также рассмотрены принципы их работы. Проведена генерация новых соединений и отобраны лучшие образцы. Для анализа свойств полученных соединений были использованы молекулярный докинг и молекулярная динамика. Были изучены возможные программные пакеты для моделирования молекулярной динамики и проанализированы их возможности. На основании результатов молекулярной динамики были отобраны наилучшие соединения, применимые для лабораторных опытов.

Полученные в результате работы соединения можно использовать для дальнейших лабораторных исследований с целью уточнения их свойств и использования при лечении коронавируса.

Abstract

Diploma thesis, 73 pages, 37 figures, 7 sources.

Keywords: MOLECULAR DYNAMICS, INHIBITORS, AutoGrow4, AmberTools24, SARS-CoV-2 CORONAVIRUS, NAVITOCCLAX.

The objects of research are methods of development of new SARS-CoV-2 coronavirus inhibitors.

The subject of study is generation and analysis of new SARS-CoV-2 coronavirus.

The aim of this work is to receive new SARS-CoV-2 coronavirus inhibitors with better properties than navitoclax.

In the course of the work, known algorithms for generating new compounds based on existing ones were examined and analyzed, as well as the consideration of their operational principles. New compounds were generated, and the best samples were selected. Molecular docking and molecular dynamics were employed to analyze the properties of the generated compounds. Various software packages for molecular dynamics modeling were reviewed and their capabilities were analyzed. Based on the results of the molecular dynamics, the best compounds suitable for laboratory experiments were selected.

The resulting molecules obtained from the study can be used for further laboratory research to refine their properties and explore their use in the treatment of coronavirus.