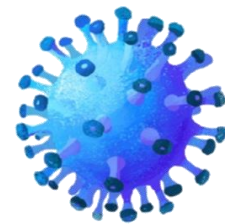


«Компьютерное моделирование аптамеров к спайк белку SARS-CoV-2 и перспективы их использования для диагностики и терапии новой коронавирусной инфекции»



Кичкайло Анна Сергеевна, д.б.н.

Артюшенко Полина Владимировна к.ф-м.н.

Лаборатория Биомолекулярных и медицинских технологий

Красноярский Государственный Медицинский Университет им. проф. В.Ф. Войно-Ясенецкого

Лаборатория Цифровых управляемых лекарств и тераностики

Федеральный Исследовательский Центр "КНЦ" СО РАН

**The Good Hope
Net**

[Главная](#)

[О](#)

проекте

[Команда](#)

[Участники](#)

[Дизайн](#)

[СуперКомпьютер](#)

[Фото&Видео](#)

[Пресса](#)

[Блог](#)



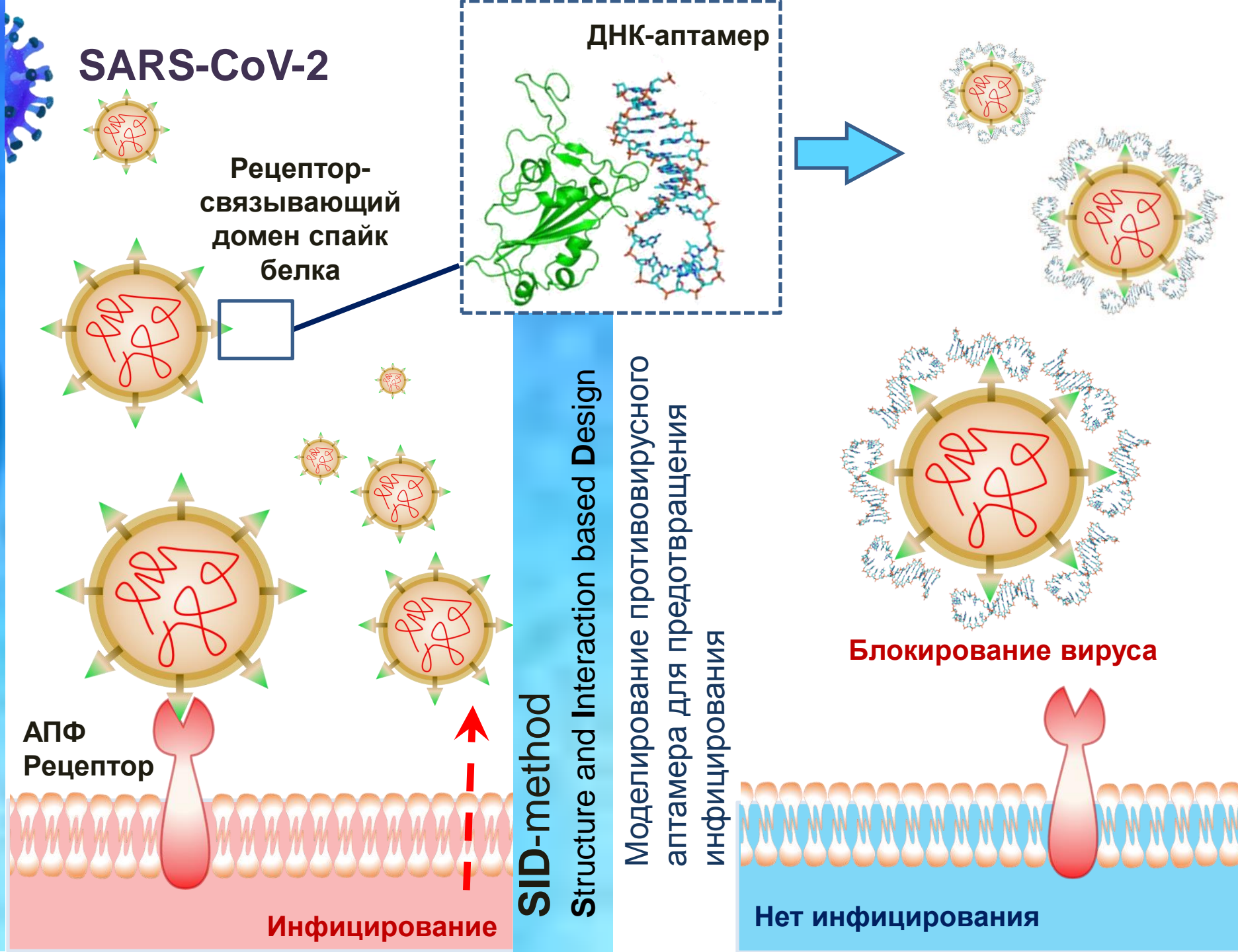
Russian supercomputer at JSCC RAS
employed to combat COVID-19

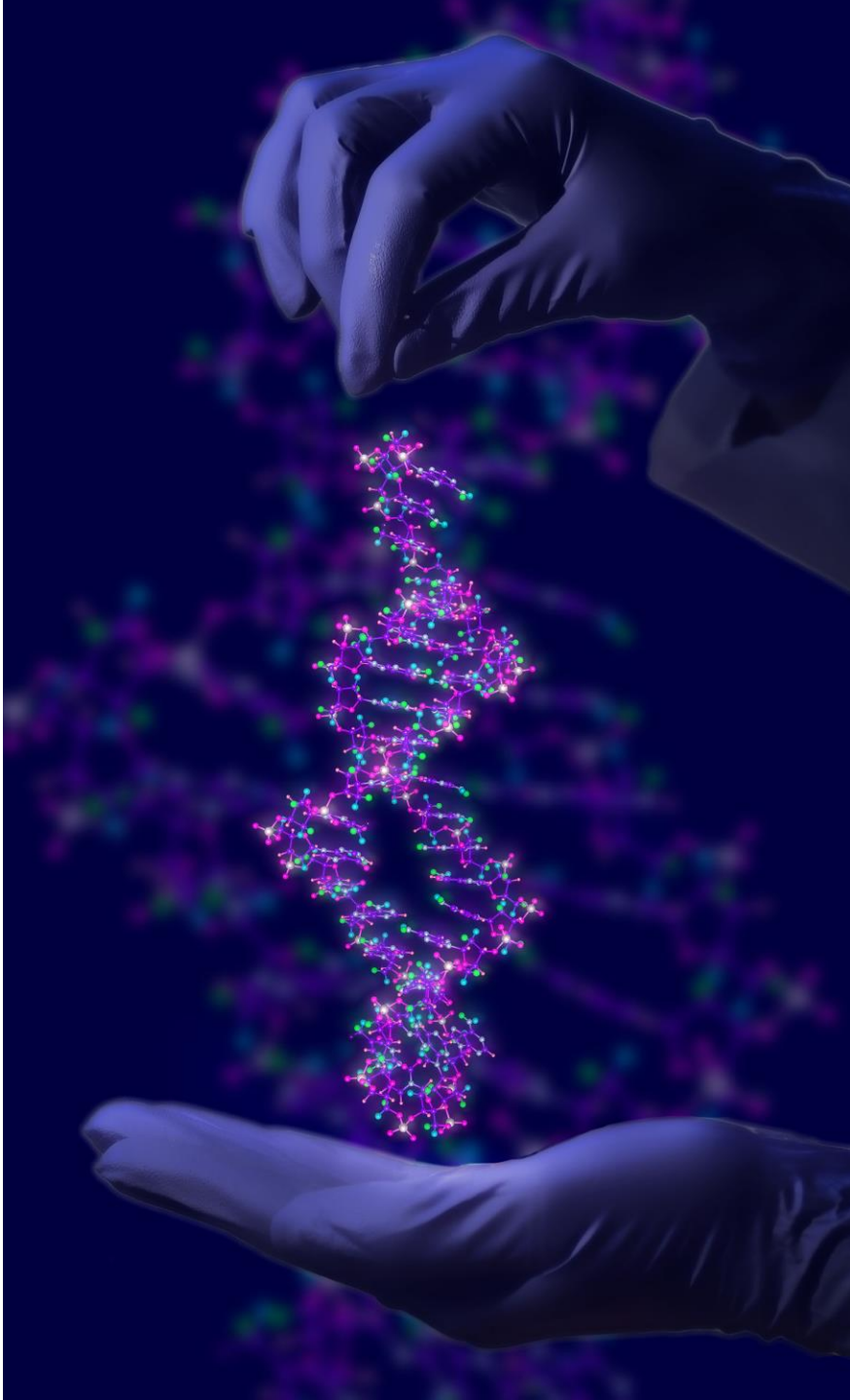


Организации - участники некоммерческого проекта

1. МГУ им. М.В. Ломоносова
2. КрасГМУ им. проф. ВФ Войно-Ясенецкого
3. Федеральный Исследовательский Центр "КНЦ" СО РАН, Красноярск
4. Институт биохимической физики имени Н. М. Эмануэля РАН, Москва
5. Сибирский физико-технический институт
6. Институт физики им Киренского СО РАН
7. ФБУН ГНЦ ВБ «Вектор» Роспотребнадзора
8. Национальный исследовательский центр "Курчатовский институт«
9. Алтайский государственный университет
10. ФГБУН Институт химической биологии и фундаментальной медицины Сибирского отделения Российской академии наук (ИХБФМ СО РАН)
11. University of Jyväskylä, Jyväskylä, Finland
12. Research Center for Computational Design of Advanced Functional Materials, National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, Tsukuba, Japan
13. Computational Science Division, Argonne National Laboratory, Lemont, IL, USA
14. University of Naples Federico II, Naples, Italy
15. Institute of Experimental Endocrinology and Oncology National Research Council of Italy , Naples, Italy
16. University of Ottawa, Ottawa, Canada
17. Xiamen University, Xiamen, China
18. Institute of Molecular Medicine, Renji Hospital, Shanghai Jiao Tong University School of Medicine, Shanghai, China
19. Hunan University, Changsha, China

SARS-CoV-2





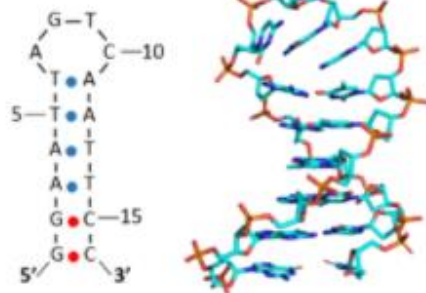
В исследованиях принимали участие 49 ученых из 9 стран и 28 организаций

По результатам расчетов подготовлена статья к отправке в журнал Nature Communications.

Разработана схема селекции аптамеров *in silico*

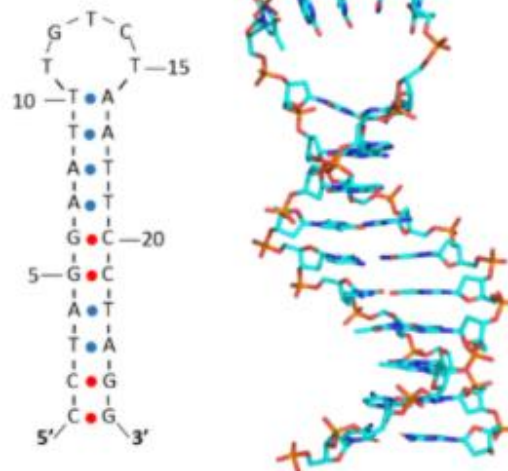


(a) Apt16



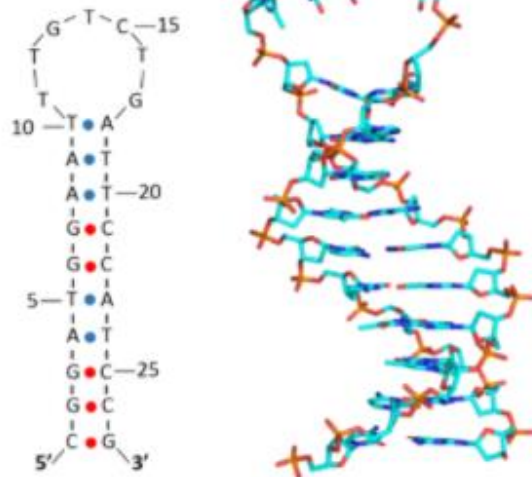
5'-GGAATT **AGTC** AATTCC-3'

(b) Apt25



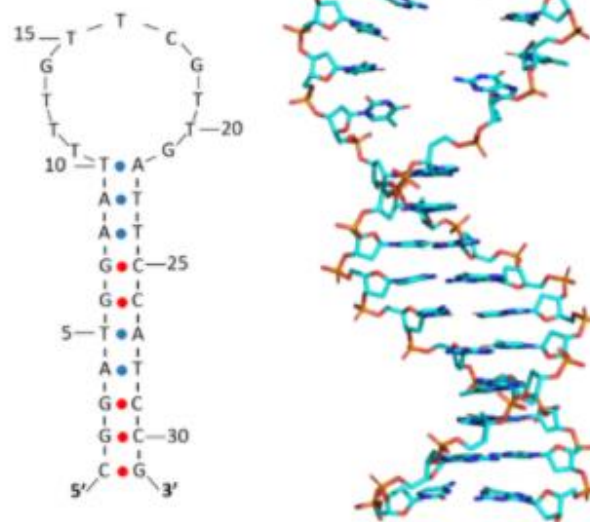
5'-CCTAGGAATT **TGTCT** AATTCCTAGG-3'

(c) Apt27

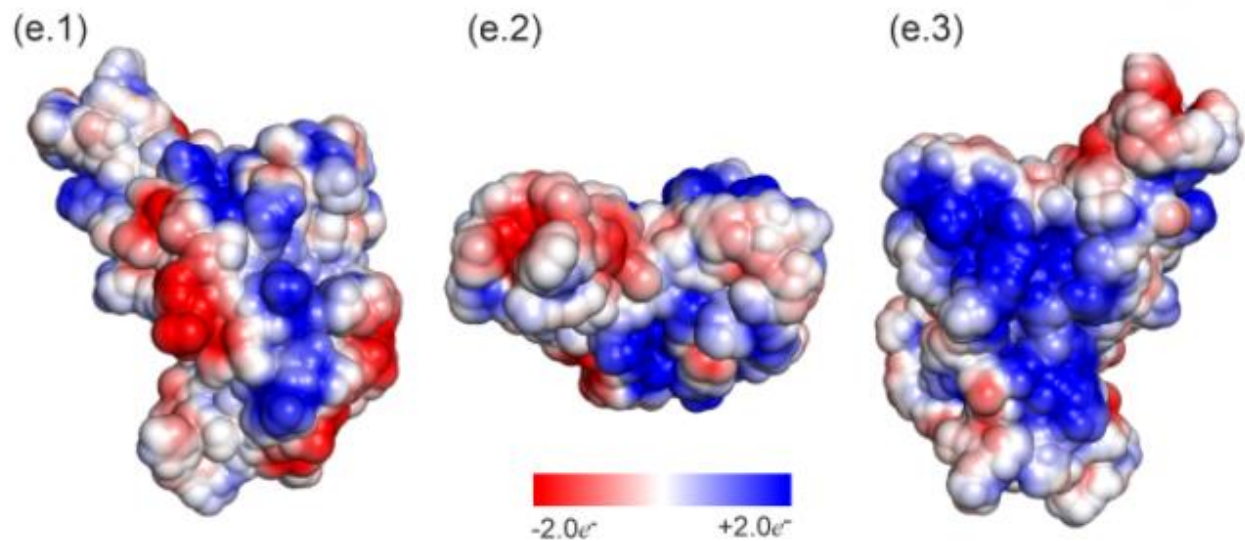
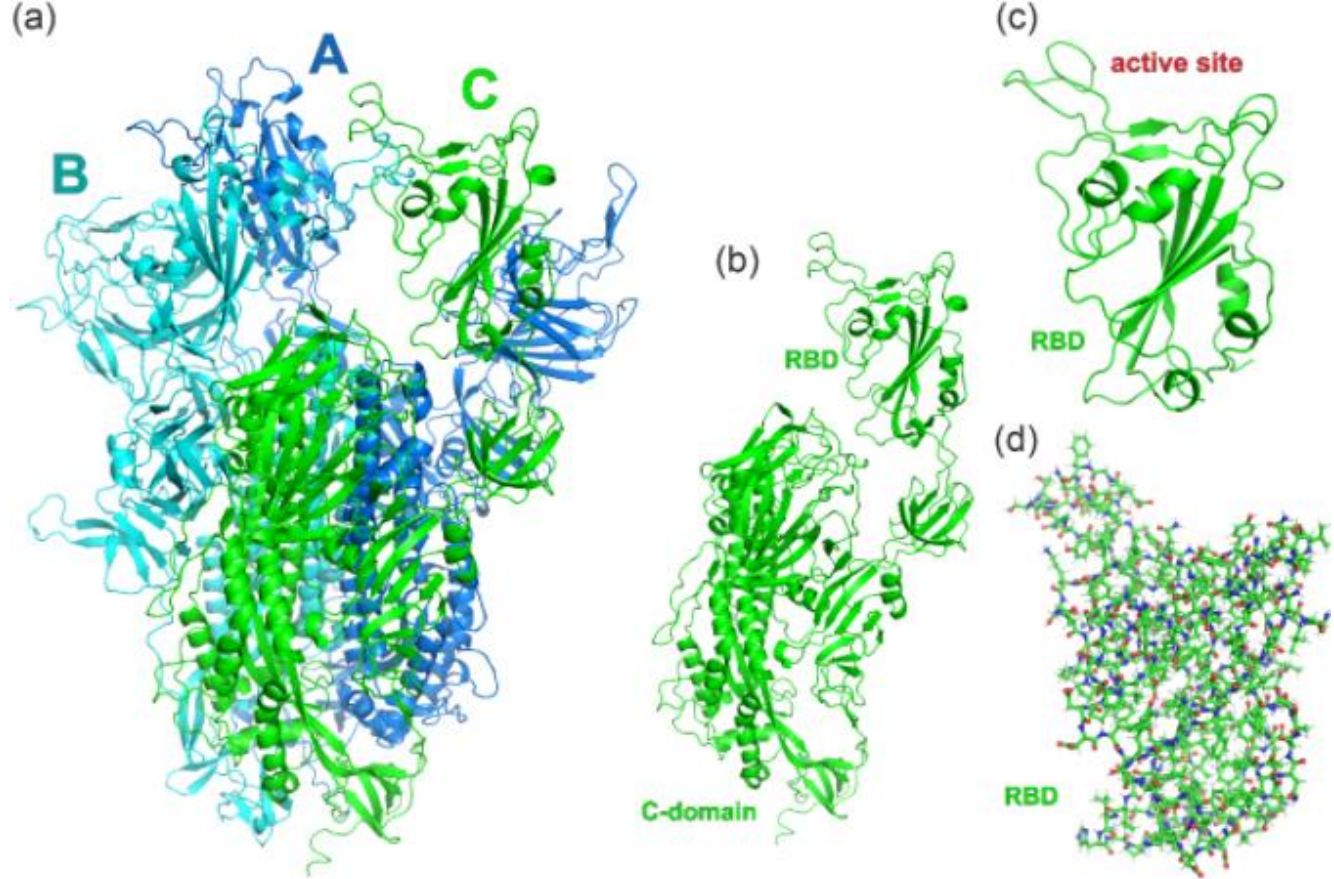


5'-CGGATGGAAT **TTGTCTG** ATTCCATCCG-3'

(d) Apt31



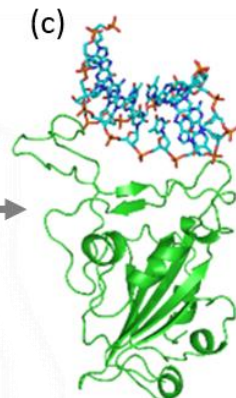
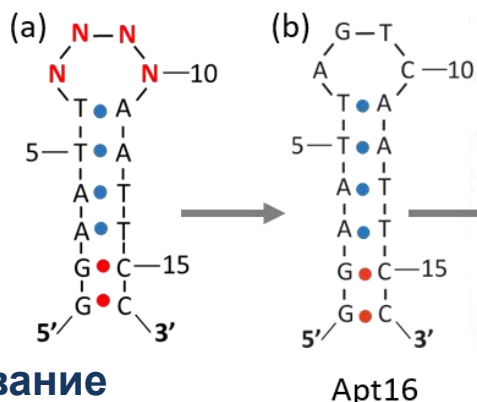
5'-CGGATGGAAT **TTTG TTC GTTG** ATTCCATCCG-3'



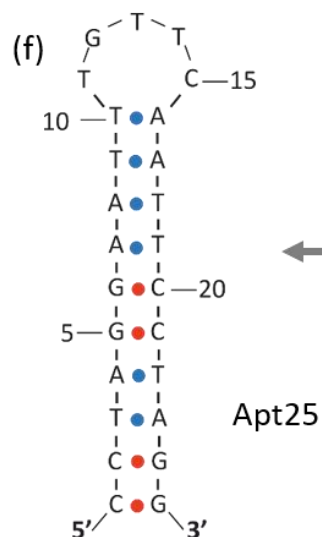
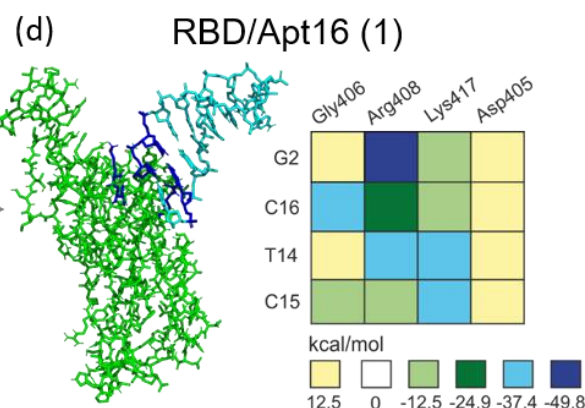


С использованием вычислительных мощностей МСЦ РАН, Argon National Laboratories, University of Jyväskylä, Research Center for Computational Design of Advanced Functional Materials методами молекулярного конструирования на основе структуры молекул и энергий взаимодействий смоделированы аптамеры к коронавирусу

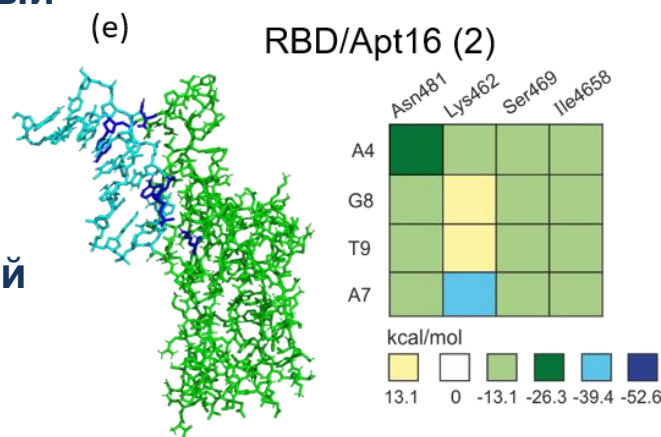
**Моделирование
Аптамера**



**Молекулярный
Докинг**



**Направленный
Дизайн
Аптамера**



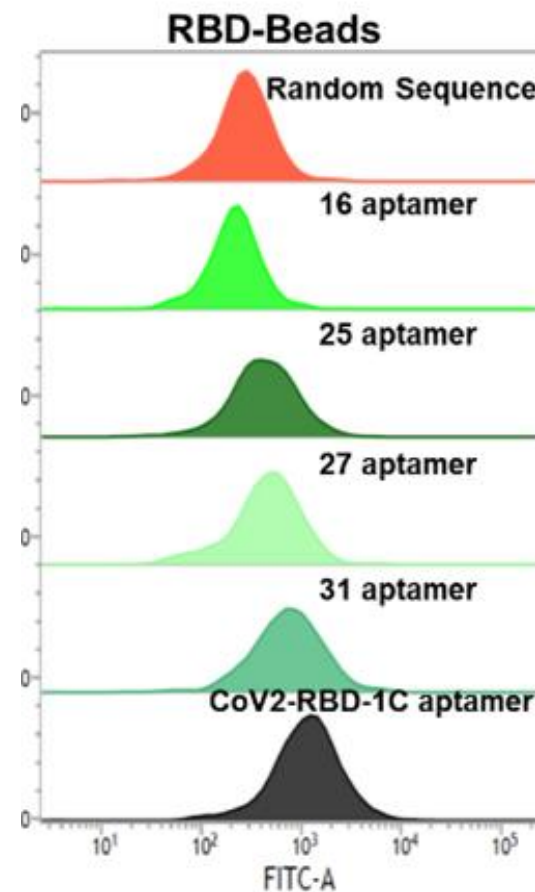
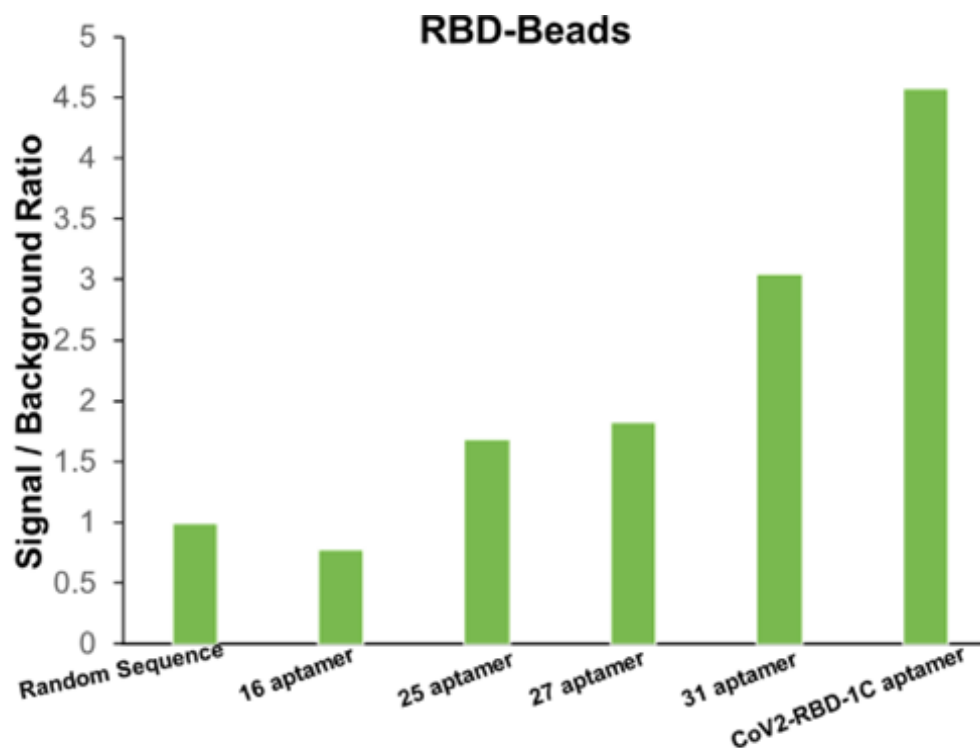
Молекулярная Динамика

Анализ Энергий Парных Взаимодействий



Получены экспериментальные доказательства связывания теоретически сконструированных аптамеров с рецептор-связывающим доменом спайк-белка коронавируса

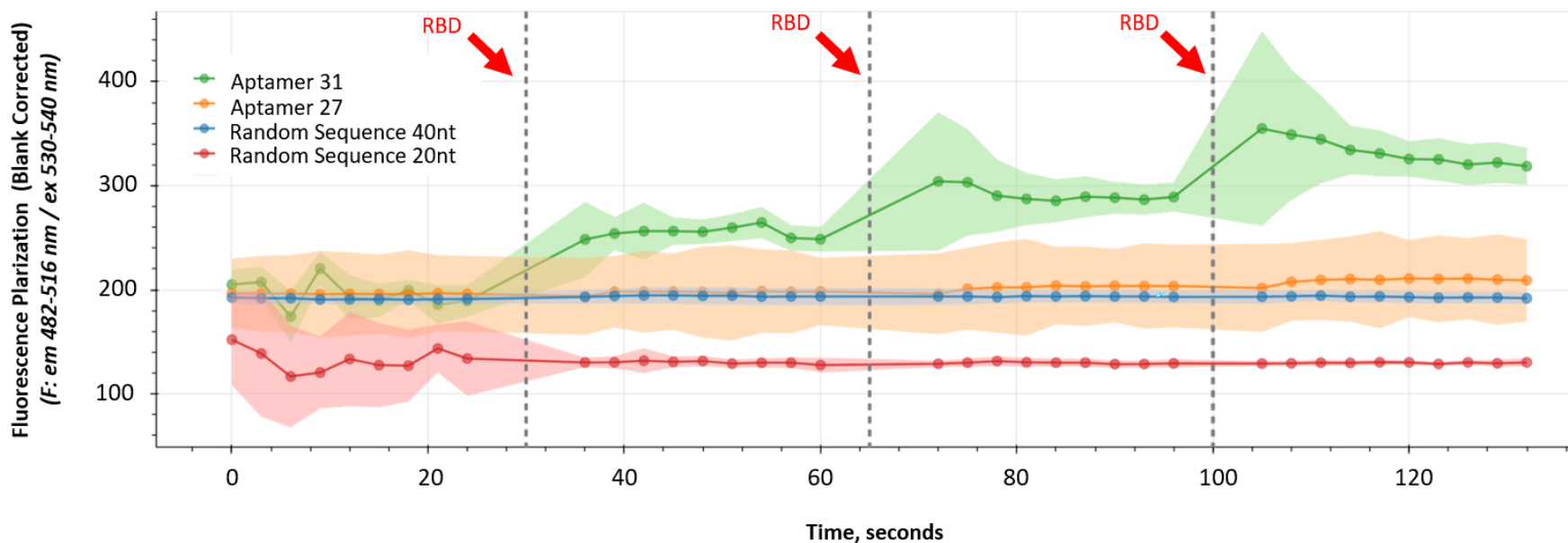
Проточная цитометрия





Получены экспериментальные доказательства связывания теоретически сконструированных аптамеров с рецептор-связывающим доменом спайк-белка коронавируса

Поляризация флуоресценции





Получены экспериментальные доказательства связывания теоретически сконструированных аптамеров с рецептор-связывающим доменом спайк-белка коронавируса

Синхротронное малоугловое рентгеновское рассеяние

