

## АНОТАЦІЯ

В даній роботі методами молекулярної динаміки та МТТ проводився пошук потенційних інгібіторів протиапоптотичної активності білка BHRF1 вірусу Епштейна-Барр.

Спершу методом високопродуктивного HTVS скринінгу у кілька послідовних етапів було отримано 11 найбільш придатних для подальших досліджень сполук. Надалі для кожної із цих сполук методом МТТ диференційно був визначений параметр IC50 відносно двох культур клітин – вірус-позитивної (B95-8) та вірус негативної (Wish). Після чого, для розуміння ймовірних механізмів дії відібраних речовин та визначення найбільш важливих взаємодій, які можуть формуватись в комплексі BHRF1-ліганд, було проведене молекулярно динамічне дослідження. Де вищезгадані комплекси моделювались протягом 50нс в явному розчиннику та за фізіологічної концентрації NaCl.

Таким чином було підтверджено інгібуючий ефект 7 із 11 відібраних речовин. Та шляхом порівняння результатів отриманих *in vitro* та *in silico* було визначено основні структурні мотиви необхідні для стабільної взаємодії ліганду з BHRF1. До них відносяться мотиви направлені на стекінг з BHRF1-W104/107 і BHRF1-R71, на водневі зв'язки з BHRF1-D82 і BHRF1-S85 та на іонні взаємодії з BHRF1-R100. Крім того супутньо підтверджено важливість BHRF1 як перспективної цілі для фармакологічних досліджень.

Кваліфікаційна робота викладена на 45 сторінках, проілюстрована 7 фотографіями та 2 таблицями, основна частина яких винесені в додатки. Список використаних джерел включає 63 роботи.

**Ключові слова:** вірус Епштейна-Барр, білок BHRF1, метод молекулярної динаміки, молекулярний докінг, HTVS скринінг.