

In silico исследование рибосомального белка апикопласта L4 и трех доменов из 23S рРНК из *Plasmodium falciparum* и сравнение с существующими сокристаллическими структурами

Биляна Аршич^{1,2}, Джилл Барбер²

1- *Университет Ниш, Факультет наук и математики, математический факультет, Вишеградская 33, 18000 Ниш, Республика Сербия*

2- *Манчестерский университет, Школа медицинских наук, Отдел фармации и оптометрии, Оксфорд-роуд, M13 9PT, Манчестер, Великобритания*

Резюме

Мы провели предварительные вычислительные исследования по построению сегмента рибосомного белка L4 из рибосомы апикопласта *Plasmodium falciparum*. С Z-баллом -3.404 это, пожалуй, лучшая модель этой мишени для лекарств на данный момент. Три домена из 23S пРНК были созданы с нуля с использованием программного обеспечения RNA2D3D: домены II, IV и V. Они не были подтверждены, но демонстрируют разумное сходство с бактериальной 23S рРНК. Эта модель имеет технические ограничения, но является отправной точкой; Ожидается, что изысканные модели найдут применение в разработке противмалярийных препаратов.

Ключевые слова: in silico, Plasmodium falciparum, рибосома