

Домашнее задание 6

Докинг лекарственных молекул

Юрий Викторович Вяткин

E-mail: vyatkin@gmail.com

Факультет информационных технологий
Новосибирский государственный университет
Осенний семестр 2023

Домашнее задание 6

- Решение необходимо оформить в репозитории на github.com и выслать преподавателю на почту vyatkin@gmail.com с обязательным указанием ФИО слушателя, [ссылку на репозиторий](#)
- Срок выполнения задания – [1 неделя](#) (22.12.23)
- Наличие выполненного задания и срок сдачи влияет на допуск к экзамену и оценку

Домашнее задание 6

1. Для указанного коммерческого наименования препарата **найти и описать:**
 - а. Действующее вещество,
 - б. Область применения,
 - с. Молекулярный механизм действия (кратко, по-русски)

Внимание! Запрещено использовать полученную информацию для самолечения. Посоветуйтесь со специалистом.

2. Запустить указанный ноутбук с пайплайном для молекулярного докинга в Google Colab и/или Jupyter Notebooks
3. Выполнить докинг указанного соединения на указанную мишень (раздел Native Ligand можно пропустить)

Домашнее задание 6

Необходимо получить и **выложить в репозиторий** результаты:

1. Полученную информацию о препарате (лиганде) из первого задания
2. Полученный ноутбук с выполненным докингом (формат *.ipynb)
3. Полученный результат докинга в формате PDB
4. Изображения (можно снимки экрана, PNG/JPG/...):
 - a. Трехмерной структуры подготовленного таргета
 - b. Трехмерной структуры исходного лиганда
 - c. Полученного бокса
 - d. Полученного докинга