

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
БИОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра молекулярной биологии

Аннотация к дипломной работе

ДУДКО
Анна Викторовна

**МОДЕЛИРОВАНИЕ СИММЕТРИЗАЦИИ GIP-КОМПЛЕКСА И ЕГО
ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С РЕЦЕПТОРНЫМИ БЕЛКАМИ ТОМ20 И
ТОМ70 СРЕДСТВАМИ КОМПЬЮТЕРНОЙ СТРУКТУРНОЙ
БИОЛОГИИ**

Научный руководитель:
доктор биологических наук
В. Г. Вересов

Минск, 2017

РЕФЕРАТ

Дипломная работа 68 страницы, 25 рисунков, 4 таблицы, 1 приложение, 60 источников литературы, из них 1 русскоязычный и 59 англоязычных.

ОПРЕДЕЛЕНИЕ: МОДЕЛИРОВАНИЕ 3D-СТРУКТУРЫ GIP-КОМПЛЕКСОВ ДРОЖЖЕЙ И ЧЕЛОВЕКА, КАК ГЛАВНЫХ КОМПОНЕНТОВ ТОМ-КОМПЛЕКСА, И ИХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ С РЕЦЕПТОРАМИ, ТОМ70 И ТОМ20, КАК С ПЕРЕФИРИЧЕСКИМИ КОМПОНЕНТАМИ ТОМ-КОМПЛЕКСА.

В данной работе, для установления структуры дрожжевого и человеческого ТОМ-комплексов были использованы инструменты компьютерной структурной биологии и недавно полученные экспериментальные данные электронной микроскопии и кросс-линкинга.

3D-структуры компонентов комплекса (ТОМ40, ТОМ22, ТОМ5, ТОМ6, ТОМ7, ТОМ20 and ТОМ70) были получены, используя комбинацию протоколов программ I-TASSER, ROSETTA 3.6 Loop и алгоритма уточнения структуры атомного разрешения, ModRefiner.

Предсказание 3D-структур белок-белковых комплексов проводили поэтапно с использованием сначала глобального поиска комплексов в твердотельном приближении, используя программу Piper, с последующими шагами, уточняющие данные жесткие структуры, с помощью программ FlexPerDock, HADDOCK, и ROSETTADOCK.

Ключевые слова: 3D-структура, ТОМ-комплекс, белок-белковые взаимодействия, молекулярный докинг.

РЭФЕРАТ

Дыпломная работа 68 старонкі, 4 табліцы, 25 малюнкаў, 1 дадатак, 60 літаратурных даведнікаў, з іх 1 рускамоўны і 42 англамоўныя.

МЭТА: МАДЭЛЯВАННЕ 3D-СТРУКТУРЫ GIP-КОМПЛЕКСАЎ ДРАЖДЖЭЙ І ЧАЛАВЕКА ЯК ГАЛОЎНЫХ КАМПАНЕНТАЎ ТОМ-КОМПЛЕКСАЎ І ІХ УЗАЕМАДЗЕЯННЯЎ З РЭЦЭПТАРАМІ ТОМ70 І ТОМ20 ЯК З ПЕРЫФЕРЫЙНЫМІ КАМПАНЕНТАМІ ТОМ-КОМПЛЕКСАЎ.

У дадзенай працы для ўстанаўлення структурнай мадэлі высокай дакладнасці дражджавога і чалавечага ТОМ-комплексаў былі выкарыстаны прылады кампутарнай структурнай біялогіі і нядаўна атрыманыя эксперыментальныя дадзеныя электроннай мікраскапіі і крос-лінкінгу. 3D-структуры кампанентаў комплексу (ТОМ40, ТОМ22, ТОМ5, ТОМ6, ТОМ7, ТОМ20 і ТОМ70) былі атрыманы з выкарыстаннем камбінацыі пратаколаў праграм I-TASSER, ROSETTA 3.6 Loop і алгарытму ўдакладнення структуры атамнай дакладнасці ModRefiner.

Прадказанне 3D-структур бялок-бялковых комплексаў праводзілася паэтапна з дапамогай спачатку глабальнага пошуку у цвёрдацельным набліжэнні з выкарыстаннем праграмы Piper з наступнымі крокамі, якія ўдакладняюць дадзеныя цвёрдыя структуры з дапамогай праграм FlexPerDock, HADDOCK, і ROSETTADOCK.

Ключавыя словы: 3D-структур, ТОМ-комплекс, бялок-бялковыя узаемадзеяння, малекулярны докінг.

SUMMARY

Thesis 68 pages, 25 figures, 4 tabs, 1 supplement, 60 references, including 1 in Russian and 59 in English.

AIM: THE MODELING OF 3D-STRUCTURE OF YEAST AND HUMAN GIP-COMPLEXES, AS CORE COMPONENTES OF TOM-COMPLEX, AND THEIR INTERACIONS WITH RECEPTORS TOM70 AND TOM20, AS PERIPHERAL COMPONENTS OF TOM-COMPLEX.

In this study, computational structural biology tools and the most recent structural information that was obtained through electron-microscopy and cross-linking experiments were used to define the atomic-resolution structural model of the yeast and human TOM-complexes.

The 3D-structures of their components (TOM40, TOM22, TOM5, TOM6, TOM7, TOM20 and TOM70) were derived using the combination of the I-TASSER protocol, ROSETTA 3.6 Loop Closure approach and atomic-resolution refinement by ModRefiner algorithm.

The prediction of the 3D-structures of protein-protein complexes was performed in a stepwise fashion with an initial rigid-body global search using the program Piper and subsequent steps using the FlexPepDock, HADDOCK, and ROSETTADOCK programs to refine the rigid-body stage predictions.

Key words: 3D-structure, TOM-complex, protein-protein interactions, molecular docking.