

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
БИОЛОГИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра микробиологии

КОНСТАНТИНОВ
Франц Олегович

САЙТ-СПЕЦИФИЧЕСКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРИ АДРЕСНОЙ
ДОСТАВКЕ ЛИПОСОМАЛЬНЫХ ФОРМ БИОЛОГИЧЕСКИ
АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Аннотация к магистерской диссертации
специальность 1-31 80 23 Биоинформатика

Научный руководитель
Герловский Денис Олегович
к.х.н, доцент

Минск, 2023

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Магистерская работа: 66 стр., 21 рис., 1 табл., 41 источников.

ЛИПОСОМЫ, ПРОТЕОЛИПОСОМЫ, САЙТ-СПЕЦИФИЧЕСКИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ, МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ, ТОЛЛ-ПОДОБНЫЕ РЕЦЕПТОРЫ, НЕЗАВЕРШЁННЫЙ ФАГОЦИТОЗ, МОЛЕКУЛЯРНОЕ РАСПОЗНАВАНИЕ, *BACILLUS SUBTILIS*, ИММУНОБИОИНФОРМАТИКА, НАНОКОНТЕЙНЕРЫ.

Объектом исследования служили компьютерные модели комплексов толл-подобных рецепторов и компонентов пептидогликана, липосомы и протеолипосомы, содержащие фосфолипиды и компоненты клеточных оболочек бактерий, лейкоцитарная фракция крови человека.

Цель работы – исследование роли сайт-специфических взаимодействий в адресной доставке липосомальных форм биологически активных веществ.

Основными методами исследования являлись: биоинформатические (молекулярный докинг рецептора и лигандов), микробиологические (культивирование), биохимические (получение клеточных теней, выделение и очистка фосфолипидов), спектральные методы (спектрофотометрия, определение спектров поглощения), хроматографические методы (тонкослойная хроматография, гель-фильтрация, flash-хроматография).

В результате работы выявлены путём молекулярного докинга наиболее эффективные сайт-специфические взаимодействия толл-подобных рецепторов и молекулярных паттернов *Bacillus subtilis*, получены тени бактерий и на их основе выделены и очищены протеолипосомы, изучены транспортные свойства протеолипосом на лейкоцитарной фракции крови человека.

АГУЛЬНАЯ ХАРАКТАРЫСТЫКА РАБОТЫ

Магістарская работа: 66 стар., 21 мал., 1 табл., 41 крыніц.

ЛІПАСОМЫ, ПРТЕАЛІПОСОМЫ, САЙТ-СПЕЦЫФІЧНЫЯ ЎЗАЕМАДЗЕЯННЯ, МАЛЕКУЛЯРНЫ ДОКІНГ, ТОЛ-ПАДОБНЫЯ РЭЦЭПТАРЫ, НЕЗАВЕРШАНЫ ФАГАЦЫТОЗ, МАЛЕКУЛЯРНАЕ РАСПАЗНАВАННЕ, ІМУНАБІЯІНФАРМАТЫКА, НАНАКАНТЭЙНЕРЫ.

Аб'ектам даследавання служылі камп'ютарныя мадэлі комплексаў тол-падобных рэцэптараў і кампанентаў пептыдаглікану, ліпасомы і пратэяліпасомы, якія змяшчаюць фасфаліпіды і кампаненты клеткавых абалонак бактэрыяў, лейкоцитарная фракцыя крыві чалавека.

Асноўнымі метадамі даследавання з'яўляліся: біяінфарматычныя (малекулярны докінг рэцэптара і лігандаў), мікрабіялагічныя (культываванне), біяхімічныя (атрыманне клеткавых ценяў, вылучэнне і ачыстка фасфаліпідаў) спектральныя метады (спектрафатаметрыя, вызначэнне спектраў паглынання), храматаграфічныя метады flash-храматаграфія).

У выніку працы выяўлены шляхам малекулярнага докінгу найбольш эфектыўныя сайт-спецыфічныя ўзаемадзеянні толл-падобных рэцэптараў і малекулярных патэрнаў *Bacillus subtilis*, атрыманы цені бактэрыяў і на іх аснове выдзелены і вычышчаны пратэяліпасомы, вывучаны транспартныя ўласцівасці пратэяліпасом на лейкоцитарнай фракцыі крыві.

GENERAL CHARACTERISTIC OF THE THESIS

Master's thesis: 66 pages, 21 figures, 1 table, 41 sources.

LIPOSOMES, PROTEOLIPOSOMES, SITE-SPECIFIC INTERACTIONS, MOLECULAR DOCKING, TOLL-LIKE RECEPTORS, INCOMPLETE PHAGOCYTOSIS, MOLECULAR RECOGNITION, BACILLUS SUBTILIS, IMMUNOBIOINFORMATICS, NANOCONTAINERS.

Computer models of toll-like receptor complexes and peptidoglycan components, liposomes and proteoliposomes containing phospholipids and components of bacterial cell membranes, and human leukocyte blood fractions were the objects of study.

The aim of the work was to investigate the role of site-specific interactions in the targeted delivery of liposomal forms of biologically active substances.

The main methods were bioinformatical (molecular docking of receptor and ligands), microbiological (culturing), biochemical (obtaining cell shadows, isolation and purification of phospholipids) spectral methods (spectrophotometry, determination of absorption spectra), chromatographic methods (thin layer chromatography, gel filtration, flash-chromatography).

As a result, the most effective site-specific interactions of toll-like receptors and molecular patterns of *Bacillus subtilis* were identified by molecular docking, bacterial shadows were obtained and used to isolate and purify proteoliposomes, transport properties of proteoliposomes on human leukocyte blood fractions were studied.