

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФАКУЛЬТЕТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ
Кафедра биомедицинской информатики

Аннотация к дипломной работе

«Построение молекулярно-динамической модели пространственной структуры теломеразы человека – перспективной мишени для конструирования новых противоопухолевых препаратов»

Тев Никита Михайлович

Научный руководитель – доктор химических наук, профессор кафедры БМИ
Андрианов А. М.

Минск, 2021

РЕФЕРАТ

Дипломная работа, 45 страниц, 13 рисунков, 2 таблицы, 12 формул, 24 источника.

ТЕЛОМЕРАЗА, АМВЕР, МОРАС, КЛАСТЕРИЗАЦИЯ, ГОМОЛОГИЧНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА, КВАНТОВАЯ ХИМИЯ.

Объект исследования – теломераза человека, ее отдельные структурные домены, а также родственные соединения.

Цель работы – построение молекулярно-динамической модели пространственной структуры теломеразы человека на основе структурных данных родственных шаблонов.

Методы исследования: изучение тематической литературы и научных исследований, связанных с холоферментным комплексом теломеразы, гомологичное моделирование, молекулярно-динамические расчеты, оптимизация энергии квантово-химическими методами.

Результатом работы является модель пространственной структуры фрагмента (TERT) теломеразы человека, осуществляющего обратную транскрипцию. Было проведено гомологичное моделирование пространственной структуры данного фрагмента, построена и проанализирована молекулярно-динамическая траектория, моделирующая поведение данной структуры во времени. На основе построенной траектории была проведена дополнительная оптимизация модели с помощью методов квантовой химии.

Области применения: исходная точка для анализа в других исследованиях; поиск ингибиторов теломеразы, как потенциальных лекарственных препаратов с широким спектром противоопухолевого действия.

ABSTRACT

Diploma thesis, 45 pages, 13 pictures, 2 tables, 12 formulas, 24 sources.

TELOMERASE, HOMOLOGY MODELING, MOLECULAR DYNAMICS, CLUSTERING, QUANTUM CHEMISTRY AMBER, MOPAC.

The object of research is human telomerase, its individual structural domains and related compounds.

Purpose of the work is to build a molecular dynamic model of the spatial structure of human telomerase based on the structural data of related templates.

Research methods: study of thematic literature and research related to the telomerase holoenzyme complex, homology modeling, molecular dynamics calculations, energy optimization by the methods of quantum chemistry.

The result of the work is a model of the spatial structure of a fragment (TERT) of human telomerase, which performs reverse transcription. Homology modeling of the spatial structure of this fragment was carried out, a molecular dynamic trajectory was constructed and analyzed, which simulates the behavior of this structure in time. On the basis of the constructed trajectory, additional optimization of the model was carried out using the methods of quantum chemistry.

The scopes are: starting point for further analysis in other studies; search for telomerase inhibitors as potential drugs with a wide spectrum of antitumor action.