

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФАКУЛЬТЕТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ
Кафедра биомедицинской информатики

Аннотация к дипломной работе

**«Поиск потенциальных ингибиторов
Bcr-Abl тирозинкиназы методами виртуального
скрининга и молекулярного моделирования для
разработки новых лекарственных препаратов»**

Гончар Анна Викторовна

Научный руководитель – старший преподаватель кафедры БМИ Николаев Г. И.

Минск, 2021

Реферат

Дипломная работа, 46 страниц, 7 рисунков, 10 таблиц, 31 источник, 1 приложение

ТИРОЗИНКИНАЗА (ТК), BCR-ABL, МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ (ММ), ВИРТУАЛЬНЫЙ СКРИНИНГ (ВС), МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ, МОЛЕКУЛЯРНАЯ ДИНАМИКА, ФАРМАКОФОРНАЯ МОДЕЛЬ, МИШЕНЬ, ИНГИБИТОР.

Объект исследования – нативная и мутантная формы Bcr-Abl тирозинкиназы, а также их ингибиторы.

Цель работы – поиск потенциальных ингибиторов Bcr-Abl тирозинкиназы и его мутантной формы T315I.

Методы исследования: изучение тематической литературы и научных исследований, виртуальный скрининг, молекулярный докинг, молекулярно-динамическое моделирование, анализ сайта связывания.

Результаты: В ходе работы методами молекулярного моделирования выявлены соединения, потенциально ингибирующие обе формы тирозинкиназы. Выполнено их описание и оценка взаимодействий с белком.

Области применения: медицинская химия, вычислительная биология, биоинформатика.

Abstract

Thesis, 46 pages, 7 figures, 10 tables, 31 sources, 1 appendix

TYROSINE KINASE (TK), BCR-ABL, MOLECULAR MODELING (MM), VIRTUAL SCREENING (VS), MOLECULAR DOCKING, MOLECULAR DYNAMICS, PHARMACOPHORAL MODEL, TARGET, INHIBITOR.

The object of the research is native and mutant forms of Bcr-Abl tyrosine kinase, as well as their inhibitors.

The purpose of the work is search for potential inhibitors of Bcr-Abl tyrosine kinase and its mutant form T315I.

Research methods: study of case literature and research, virtual screening, molecular docking, molecular dynamics simulations, binding site analysis.

Results: Compounds that potentially inhibit both forms of tyrosine kinase were identified using molecular modeling methods. Their description and assessment of interactions with the protein have been performed.

Scopes of application: medicinal chemistry, computational biology, bioinformatics.