

Специализированный учебно-научный центр МГУ им. Ломоносова
Факультет биоинженерии и биоинформатики МГУ им. Ломоносова

Руководители: Владимир Константинович Аржаник
Геннадий Иванович Макаров

Выполнила: Дарья Александровна Бахарева

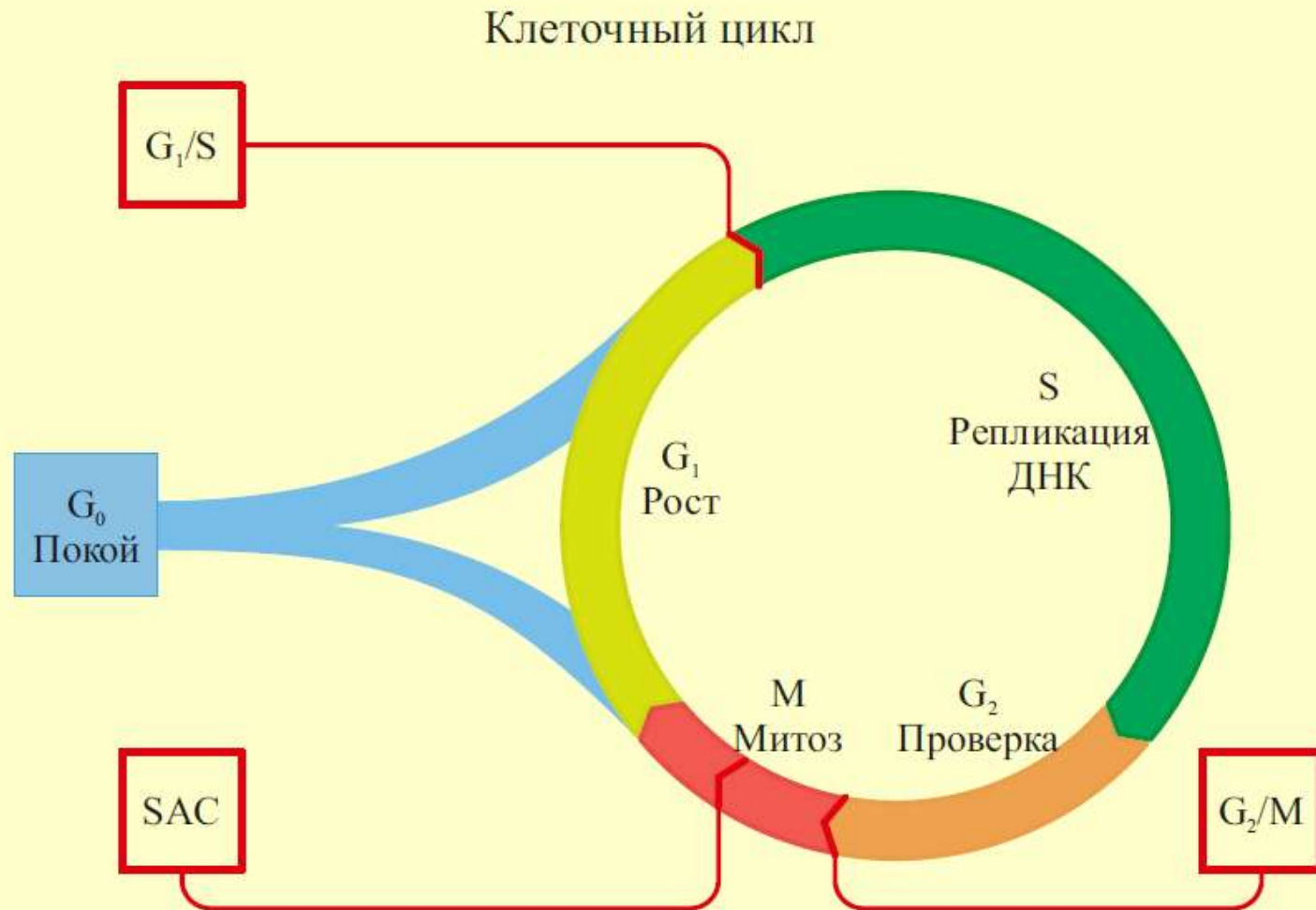
Поиск потенциальных ингибиторов к кинетохорному белку Ndc80.



Актуальность

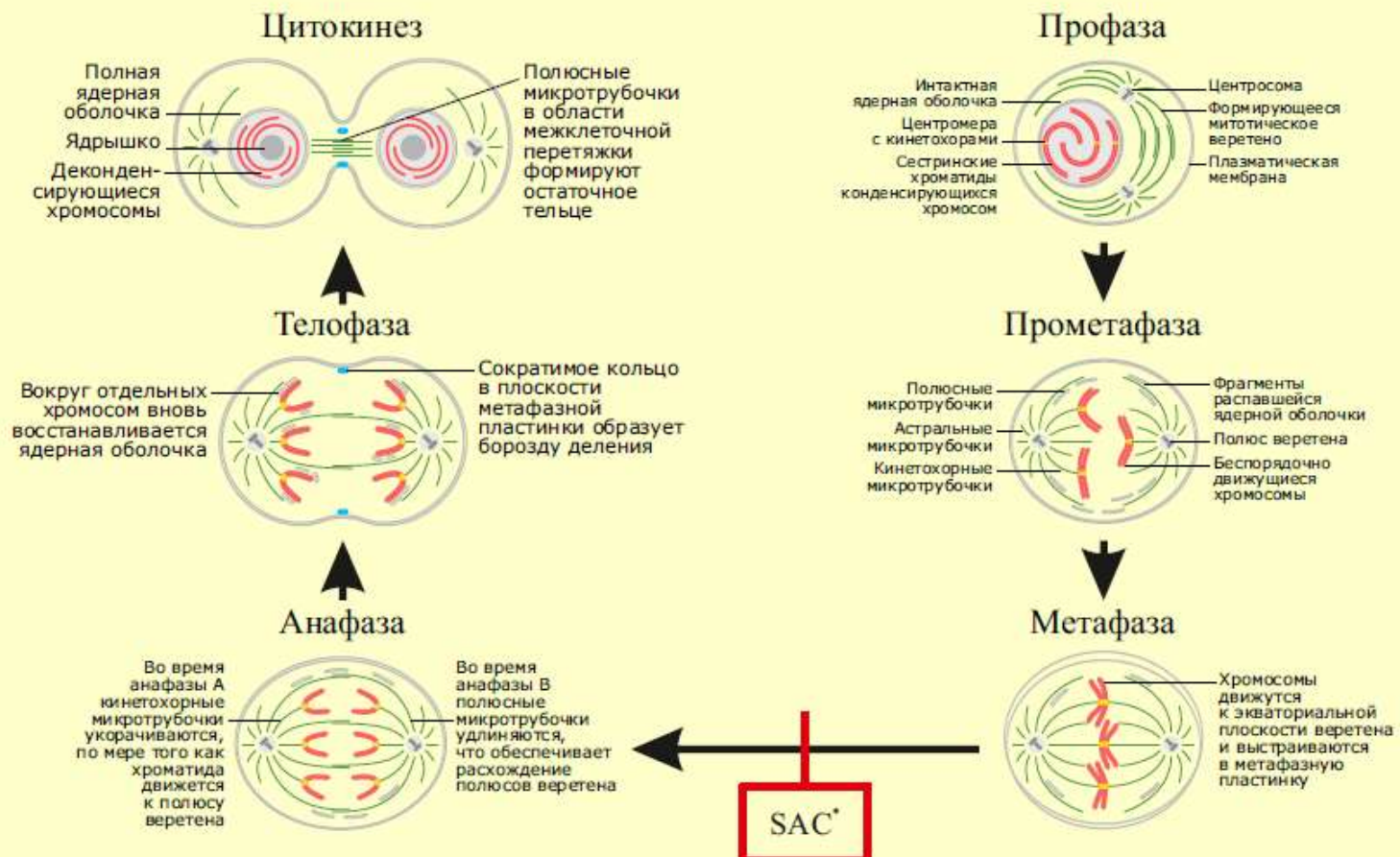
Данная работа направлена на поиск низкомолекулярного соединения, которое остановит деление клетки, что позволит в дальнейшем создать противораковые препараты нового типа для эффективной борьбы с онкологическими заболеваниями.

Фазы клеточного цикла



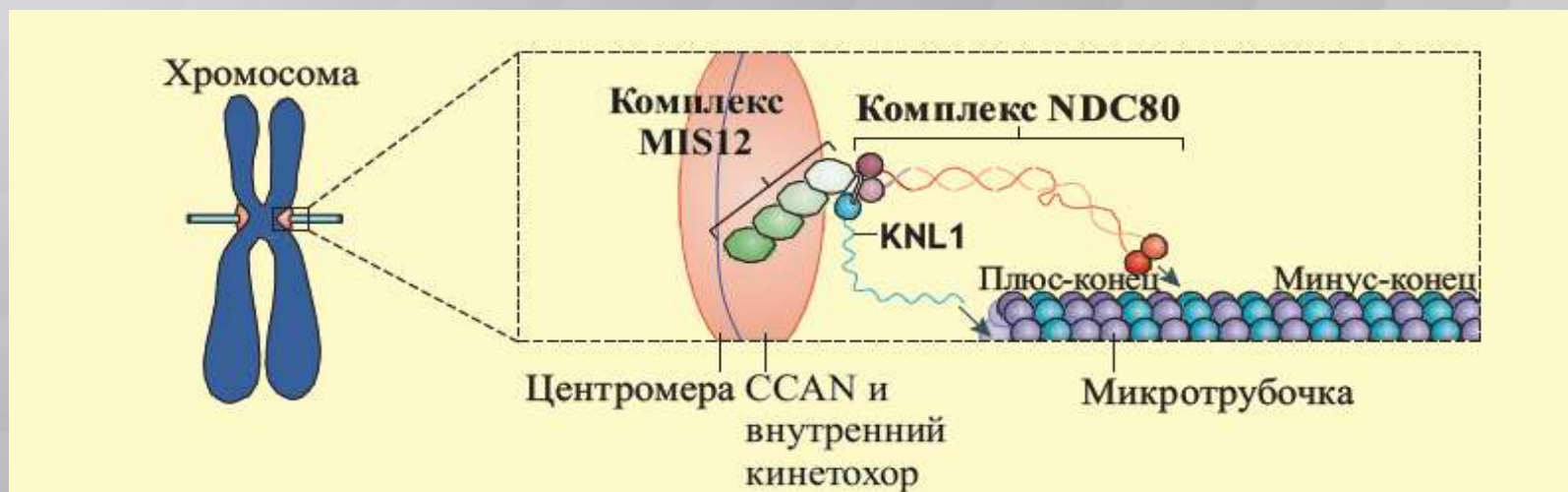
Процесс деления клеточного ядра

Митоз



Цели и методы исследования

- **Цель:** Поиск потенциальных ингибиторов к кинетохорному белку Ndc 80 для нарушения связывания микротрубочки с кинетохором митотической хромосомы.



Методы:

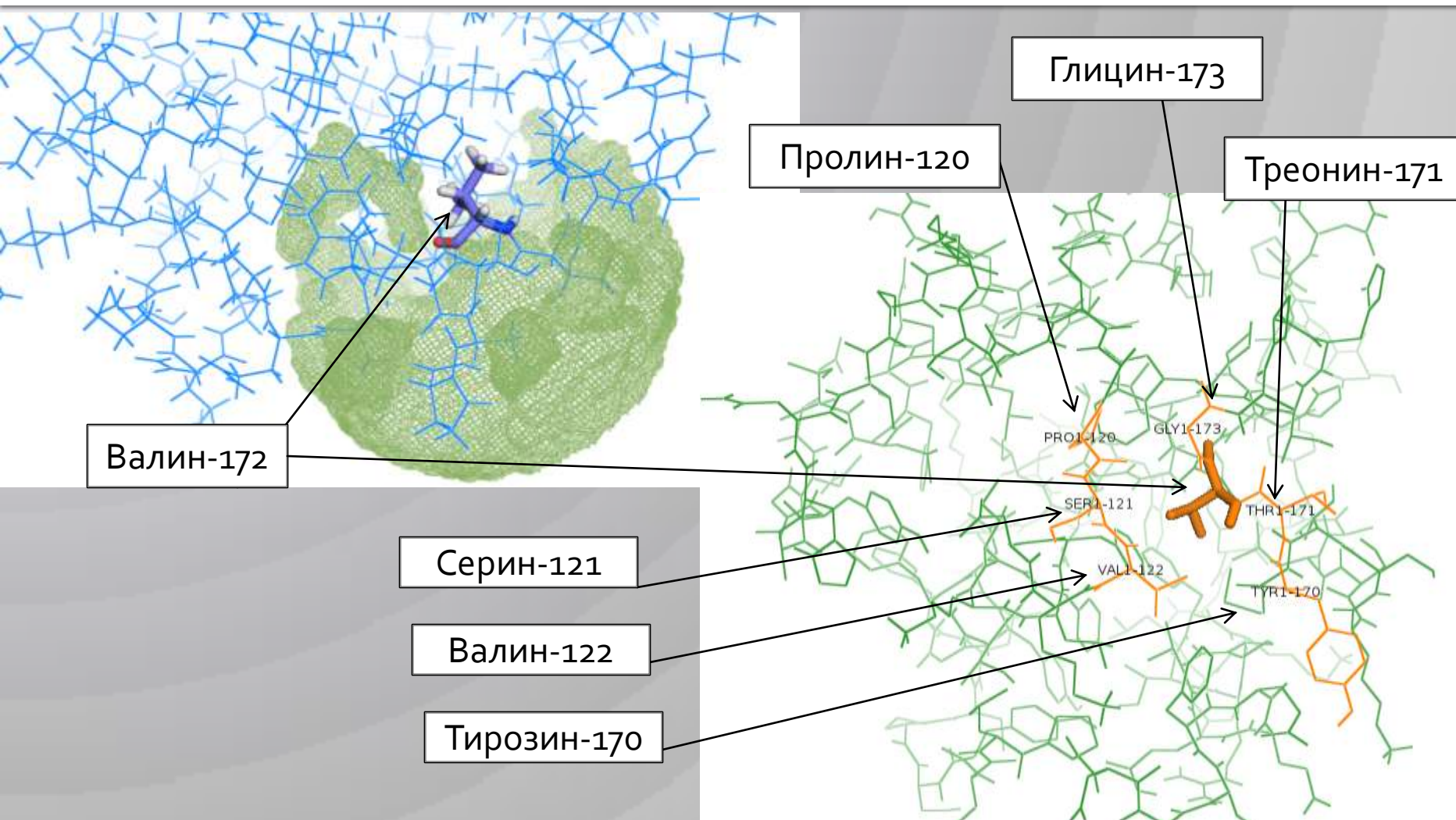
- Метод виртуальной эволюции низкомолекулярных лигандов
- Докинг потенциального ингибитора

Результаты

- Исследование структуры комплекса Ndc80 и выбор сайта для связывания потенциального ингибитора.
- Предсказание структурной формулы потенциального ингибитора методом эволюции низкомолекулярных лигандов.
- Рациональная доработка полученного соединения и проверка докингем.

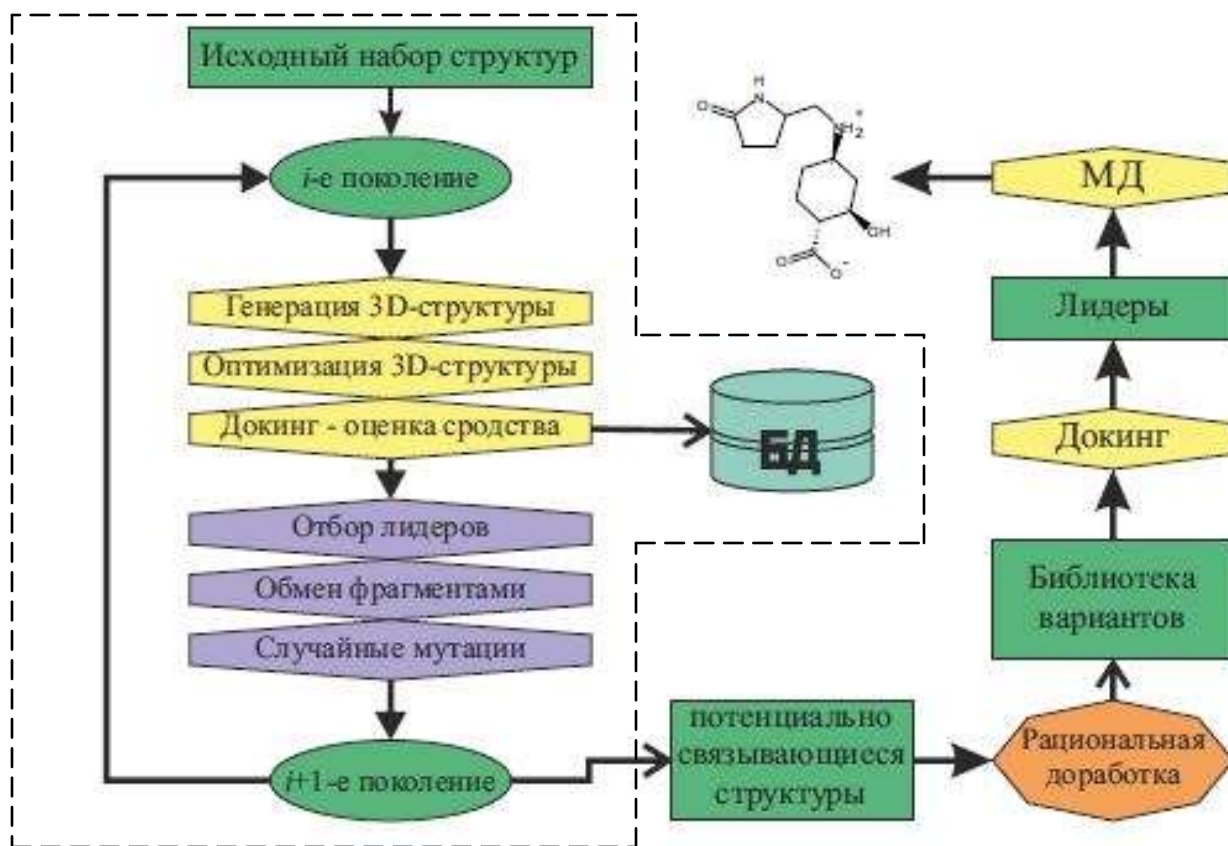
Исследование структуры комплекса Ndc80 и выбор сайта для связывания потенциального ингибитора.

7



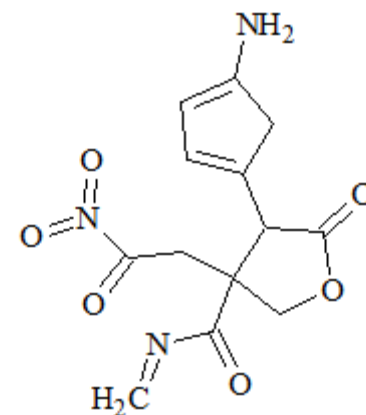
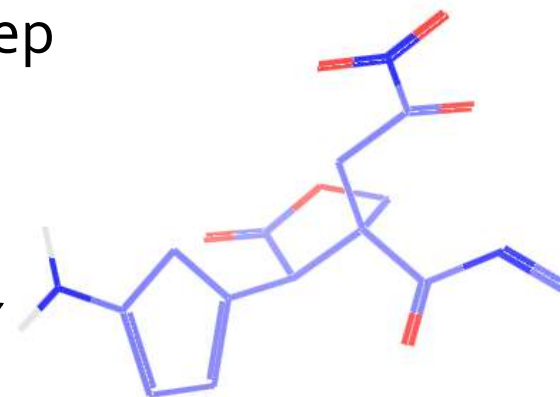
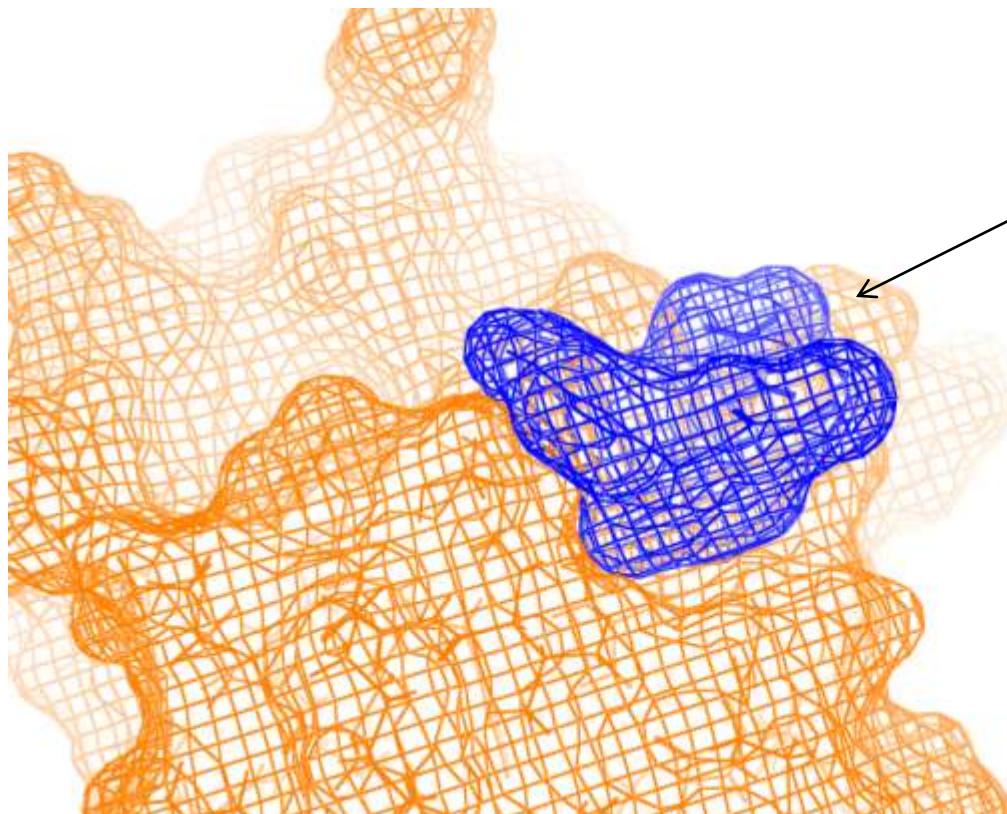
Предсказание структурной формулы потенциального ингибитора методом эволюции низкомолекулярных лигандов.

8

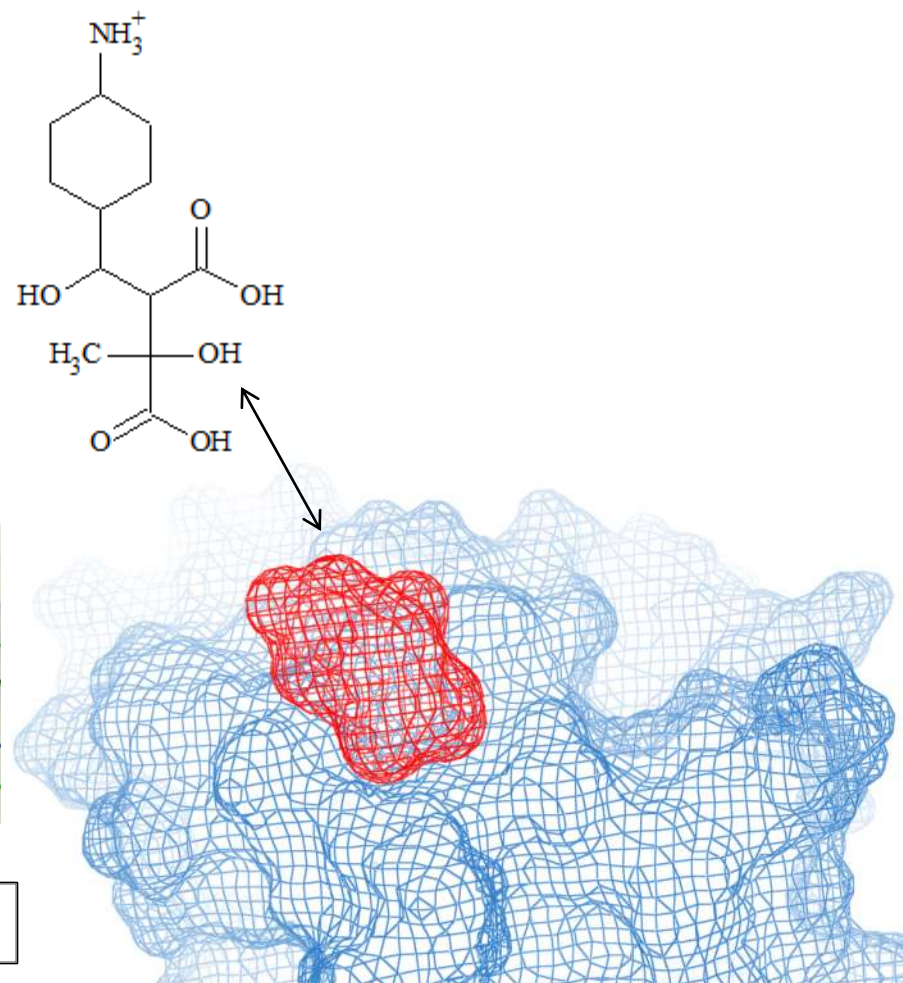
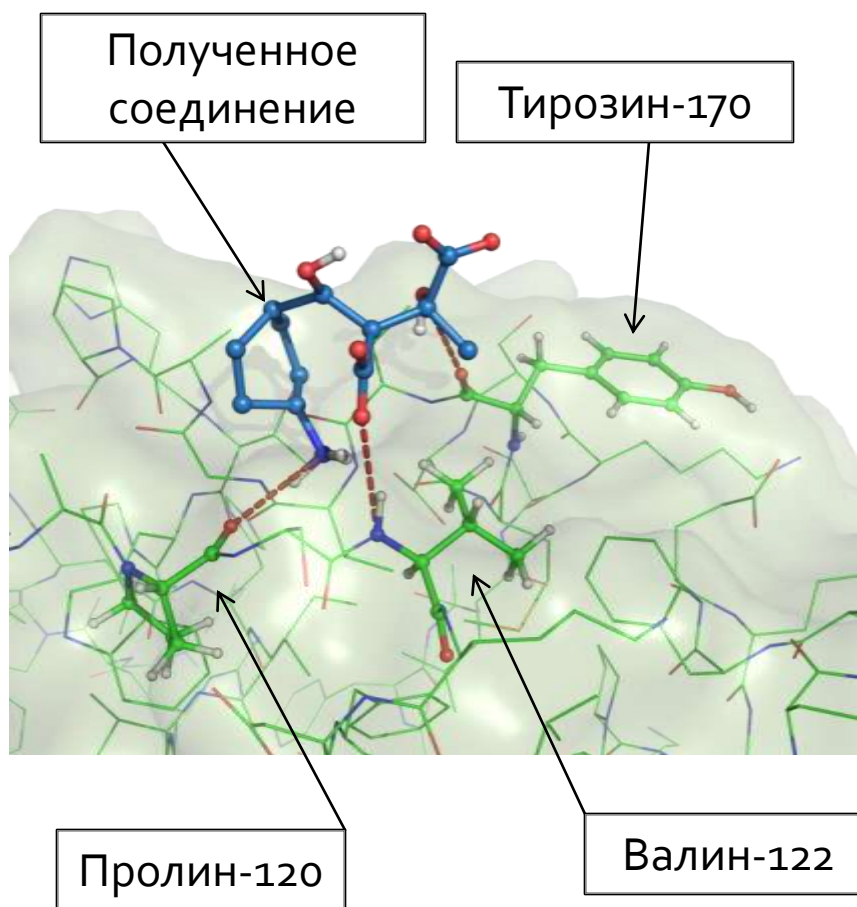


Предсказание структурной формулы потенциального ингибитора методом эволюции низкомолекулярных лигандов.

Соединение-лидер



Рациональная доработка полученного соединения и проверка докинггом.



Выводы.

- Выбран потенциальный сайт связывания ингибитора образования комплекса Ndc80 с тубулином.
- Методами виртуальной эволюции низкомолекулярных лигандов и докинга получена возможная структура ингибитора кинетохорного белка Ndc80.

Спасибо за внимание!

Руководители:

Аржаник Владимир Константинович
Аспирант Факультета биоинженерии и
биоинформатики МГУ



Макаров Геннадий Иванович
Аспирант Химического факультета МГУ



Исполнитель: Бахарева Дарья Александровна
Учащаяся Специализированного учебно-научного
центра МГУ



Контакты: +7(925)9084456
snow.winter99909@gmail.com