

**Прокопеня Я.О.**

## **СОЗДАНИЕ ПРОГРАММЫ МНОЖЕСТВЕННОГО МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКИНГА ЛИГАНДОВ**

**Научный руководитель: канд. хим. наук, доц. Лахвич Ф.Ф.**

*Кафедра общей химии*

*Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск*

**Актуальность.** В последнее время молекулярный докинг стал незаменимым инструментом в области вычислительной биологии и поиска лекарств. Возможность с высокой точностью предсказывать режимы связывания и сродство малых молекул к белковым мишеням произвела революцию в процессе рационального дизайна лекарств. Молекулярный докинг позволяет быстро и эффективно сканировать большие библиотеки химических соединений для поиска потенциальных лекарственных молекул. Это позволяет существенно сократить время и ресурсы, затрачиваемые на открытие новых препаратов.

Молекулярный докинг — это вычислительный метод, играющий ключевую роль в процессе поиска новых лекарственных средств и структурной биологии. Моделируя взаимодействие между малыми молекулами (лигандами) и макромолекулярными мишенями (рецепторами), молекулярный докинг позволяет предсказать наиболее энергетически выгодные конформации связывания. Ускорение процесса исследования *in silico* позволяет быстрее оценить потенциальную эффективность и безопасность кандидатов лекарственных средств в рамках рационального драг-дизайна

**Цель:** создать программу для проведения множественного молекулярного докинга лигандов с применением структуры Autodock Vina и выполнить сопоставление полученных данных с ранее имеющимися решениями.

**Материалы и методы.** Разработка программы проведена на базе Autodock Vina, работа с химическими структурами, визуализация, сравнение и анализ полученных данных осуществлены в UCSF Chimera, PyMol.

**Результаты и их обсуждение.** Разработанная программа была проверена путем докинга известных лигандов к соответствующим рецепторам и сравнения результатов с экспериментальным сродством связывания. Программа точно воспроизвела экспериментальные режимы связывания и сродство известных комплексов лиганд-рецептор.

Валидационные испытания продемонстрировали надежность и точность разработанной программы молекулярного докинга. Оценка производительности программы проводилась путем измерения ее вычислительной эффективности и скорости. Сравнение этих данных с существующими программами для молекулярного докинга показало конкурентоспособную производительность по скорости и точности.

**Выводы.** Разработана программа, которая ускоряет и упрощает процесс молекулярного докинга. Эта открывает новые возможности для исследователей и студентов, так как позволяет приступать к выполнению собственных докинговых экспериментов, необходимых для обучения и получения практических навыков в области компьютерного моделирования взаимодействий между белками и потенциальными лекарственными молекулами.

Особенностью программы является ее способность работать с большими библиотеками лигандов, что обычно представляет собой трудоемкий процесс, требующий значительных вычислительных ресурсов и времени.