

Федеральное государственное автономное
образовательное учреждение
высшего образования
«СИБИРСКИЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ»

Институт фундаментальной биологии и билтехнологии

Базовая кафедра медико-биологических систем и комплексов

УТВЕРЖДАЮ
Заведующий кафедрой
_____ А.Н. Шуваев

« ____ » _____ 20 __ г.

МАГИСТЕРСКАЯ ДИССЕРТАЦИЯ

03.04.02 Физика

03.04.02.08 Управление медико-биологических систем и комплексов

**Конструирование структуры аптамера G235 с помощью
компьютерного моделирования**

Научный руководитель _____ доцент, канд. хим. наук Ф.Н. Томили

Магистрант _____ Т.И. Лукина

Рецензент _____ доктор физ.мат. наук А.С. Федоров

Красноярск 2017

РЕФЕРАТ

Магистерская диссертация по теме «Конструирование структуры аптамера Gli 235 с помощью компьютерного моделирования» содержит 60 страниц текстового документа, 29 рисунков, 6 таблиц, ссылки на 54 литературных источников.

МОДЕЛИРОВАНИЕ, МОЛЕКУЛЯРНАЯ МЕХАНИКА, СТРУКТУРА, СИЛОВЫЕ ПОЛЯ MM+, AMBER, BIO+(CHARMM), OPLS, ДНК, РНК, АПТАМЕР, БЕЛОК, ДОКИНГ

Цель работы – конструировать структуры аптамера Gli 235 с помощью компьютерного моделирования.

В результате работы был проведен молекулярный дизайн аптамера Gli 235. Оптимизацию геометрии структуры аптамера Gli 235, рассчитывали методом молекулярной механика силовыми полями (MM+, AMBER, BIO+(CHARMM) и OPLS). На основании вторичной структуры и на основе данных эксперимента малоуглового рассеяния была выбрана самая оптимальная структура аптамера Gli 235 рассчитанная силовым полем BIO+(CHARMM), проведен молекулярный докинг, аптамера Gli 235 к тубулину альфа – 1С.