

УДК 577.322.2

**ТЕХНОЛОГИЯ «МОЛЕКУЛЯРНОГО ПОРТРЕТА» В АНАЛИЗЕ БИМОЛЕКУЛЯРНЫХ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ****Р.Г. Ефремов***Институт биоорганической химии им. М.М. Шемякина и Ю.А. Овчинникова РАН, Высшая школа экономики, Москва, Россия*

Детальный анализ свойств молекулярных поверхностей играет важную роль в процессах распознавания, взаимодействия и передачи сигналов в биомолекулярных системах. Технология «молекулярного портрета» представляет собой современный подход к расчету и 3-мерной визуализации различных физико-химических характеристик поверхности биомолекул. Эффективное использование таких подходов требует создания специальных методов компьютерной обработки, анализа и представления «молекулярных портретов». В настоящей работе описано применение указанных методов в работе с белками, мембранами и их комплексами. Показано, что в результате удается повысить точность решения задач молекулярного докинга белок-лиганд [1] и белок-белок [2]. Кроме того, предложен оригинальный метод «белковой топографии» (МБТ) [3], который позволяет наглядно представить полную поверхность молекулы белка в виде двумерных карт. МБТ применяется также для выявления конформационных изменений между различными состояниями молекул, для проведения сравнительного анализа групп биообъектов, нахождения в них общих и специфических характеристик. Методы «молекулярного портрета» в значительной степени дополняют современные технологии докинга, наглядно иллюстрируют комплементарность свойств поверхностей лиганда и белка-рецептора. Использование подобных технологий совместно с экспериментальными и независимыми вычислительными методами создает надежную основу для рационального конструирования новых биологически активных соединений с заданными свойствами [4].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант 18-14-00375), в рамках Программы фундаментальных исследований НИУ ВШЭ и с использованием средств субсидии в рамках государственной поддержки ведущих университетов РФ «5-100».

Литература

1. Pyrkov T.V. et al. (2009) *Bioinformatics*. 25:1201.
2. Polyansky A.A. et al. (2014) *Bioinformatics* 30:889.
3. Koromysova A.D. et al. (2014) *J. Chem. Inf. Mod.* 54:1189.
4. Kasheverov I.E. et al. (2016) *Scientific Reports*, 6:36848.
5. Huang HC, Liu J, Baglo Y, Rizvi I, Anbil S, Pigula M, Hasan T. Mechanism-informed Repurposing of Minocycline Overcomes Resistance to Topoisomerase Inhibition for Peritoneal Carcinomatosis. *Mol. Cancer. Ther.* 2018, 17, 508-520.