



Лаборатория структурного моделирования

Факультет биоинженерии и биоинформатики МГУ

Тьюторы: Решетников Роман r.reshetnikov@gmail.com
Головин А. В. golovin.andrey@gmail.com

Лабораторный корпус Б, комната 512

Оценка кандидатов лекарственных препаратов с помощью компьютерного моделирования

В нашей лаборатории проводится разработка препарата-антикоагулянта на основе нуклеиновых кислот. Работа разделена на несколько этапов, один из которых – дизайн кандидатов на основе данных, полученных с помощью как расчетных, так и экспериментальных методов. Этот этап включает в себя создание пространственной модели препарата и расчет ее оптимальной геометрии и конформационного пространства. На основании результатов этого этапа будет приниматься решение о синтезе кандидата и запуске его в дальнейшее тестирование, как *in vitro*, так и *in vivo*.

Предполагается работа с пакетом программ для симуляции молекулярной динамики GROMACS. Расчет оптимальной геометрии моделей будет проводиться с использованием полуэмпирических QM/MM методов, что является на сегодняшний день наиболее передовым методом вычислительной биологии.

В кандидате приветствуется усидчивость и стремление разобраться в чрезвычайно сложных на первый взгляд вещах. Поскольку фактически вся работа будет вестись на ЭВМ в ОС Linux, преимуществом кандидата будет компьютерная грамотность.