

Subject: Synthetic Biology and Chemoinformatics

Students' projects

You have been assigned a drug known to exhibit notable side effects. Due to its adverse effects, the objective of this project is to design a safer alternative that enhances the quality of life for individuals affected by the corresponding condition.

Instructions:

Drug Similarity Search

Utilize the provided Python script hosted on Google Colab:

<https://colab.research.google.com/github/Ash100/DaS>

to identify 20 structurally similar drug candidates from the PubChem database.

Docking Protocol Validation

Re-dock the co-crystallized ligand of your assigned protein target to validate your molecular docking protocol.

Virtual Screening

Perform batch molecular docking of the 20 identified compounds using appropriate docking software (e.g., AutoDock, PyRx, or MOE etc).

Hit Identification

Analyze the docking results to identify the top hit compound based on binding affinity and interaction profile.

Molecular Dynamics (MD) Simulation

Generate the topology files required for MD simulation of the hit compound using a suitable force field (e.g., AMBER, or GROMAS).

Simulation Setup

Prepare your Python script to execute the molecular dynamics simulation using the generated topology and system files.

Note:

The specific drug and target protein assigned to you can be found alongside your name in the list provided below.

Таб. номер	ФИО		
	Name	Anticancer drug	PDB ID
367449	Овчинников Петр Александрович	5-fluorouracil	1TSN
367528	Санников Максим Витальевич	Tamoxifen	3ERT
367926	Бриденко Любовь Андреевна	Herceptin	1N8Z
371173	Королев Илья Сергеевич	Paclitaxel	1JFF
371715	Силин Данил Валерьевич	Doxorubicin	1Z31

367195	Джиблани Хадижа Билаловна	Cisplatin	1AIO
	Name	Antibiotic drug	PDB ID
367541	Смирнов Василий Артурович	Ciprofloxacin	2XCT
368824	Соколов Андрей Сергеевич	Sulfamethoxazole	3TZF
368949	Устинов Георгий Эдуардович	Bactrim	3TZF
368131	Дударь Илья Алексеевич	Doxycycline	2Y9W
368313	Ковалева Дарья Алексеевна	Amoxicillin	3UDI
370623	Балашова Юлия Евгеньевна	Cephalexin	3UDI
	Name	Diabetes Drug	PDB ID
367921	Ботова Софья Александровна	Sitagliptin	1X70
368489	Марков Артём Николаевич	Glyburide	6BAA
367292	Кожин Павел Сергеевич	Pioglitazone	2PRG
368769	Сафронова Татьяна Михайловна	Canagliflozin	7VSI
368118	Домахина Арина Андреевна	Dulaglutide	5VAI
368036	Голубев Семен Романович	Empagliflozin	7VSI
	Name	Anti-depressant	PDB ID
368828	Соколова Анастасия Павловна	Fluoxetine	5I6X
334430	Абдуллаев Артур Азизович	Sertraline	5I6X
369038	Шакирова Дина Дамировна	Mirtazapine	6K41
367357	Лопаткина Анастасия Алексеевна	Baclofen	7C7Q
367508	Радченко Максим Евгеньевич	Bupropion	4XP1
368081	Давиденко Юлия Алексеевна	Duloxetine	5I6X
368814	Смирнов Игорь Сергеевич	Trazodone	6A93
	Name	Tuberculosis drug	PDB ID
368483	Мальцева Юлия Витальевна	Isoniazid	2X22
367240	Иванов Илья Денисович	Rifampicin	5UHB
369096	Юнусов Марат Айратович	Ethambutol	7BVF
369016	Чапаева Ангелина Игоревна	Pyrazinamide	4V3H
368025	Глазкова Дарья Александровна	Streptomycin	1FJG
368917	Топалов Эдуард Васильевич	Moxifloxacin	6RKS
367217	Жарков Никита Витальевич	Bedaquiline	4V1F

To be submitted on or before May 5, 2025.