АНОТАЦІЯ

За допомогою методів комп'ютерного моделювання було здійснено скринінг колекції сполук, що налічує більше 200 тисяч лігандів, для пошуку нових потенційних інгібіторів протеїнкінази PknB *Staphylococcus aureus.*

Для віртуального скринінгу колекції сполук було використано комбінацію двох методів молекулярного докінгу – пакети програм DOCK і AutoDock Vina. У результаті візуального аналізу результатів докінгу за допомогою програми Discovery Studio Visualizer було відібрано 30 сполук для дослідження інгібувальної активності щодо PknB *S. aureus in vitro*. Відібрані сполуки переважно належали до похідних 2-метилхінолін-4-карбонової кислоти, 4-анілінохінолін-3,6-дикарбонової кислоти, 5-нітро-2-N,4-N-дифенілпіримідин-2,4,6-тріаміну, N-[(3-аміно-2H-ізоіндол-1-іл)іміно]-2-феноксіацетаміду, бензойної кислоти, пропанаміду, карбоксаміду та інших хімічних класів. Було проведено детальний аналіз комплексів цих сполук з активним центром PknB та встановлено, що спільними рисами є утворення ними водневих зв'язків з амінокислотними залишками Ile90, Tyr89 та Glu88, а також формування гідрофобних взаємодій з амінокислотними залишками Ala37, Val24, Met87, Leu140 і Leu16.

Отже, за допомогою методів комп'ютерного моделювання було відібрано 30 сполук серед різних хімічних класів, що є перспективними інгібіторами протеїнкінази PknB *S. aureus*, для біохімічного тестування інгібувальної активності *in vitro*.

Кваліфікаційна робота викладена на 48 сторінках, ілюстрована 21 рисунком. Список використаних джерел включає 50 робіт.

Ключові слова: *Staphylococcus aureus*, протеїнкінази, PknB, інгібітори PknB, молекулярне моделювання.