

## Streszczenie pracy doktorskiej Anny Heleny Mazurek

Praca: A study of selected endocrine disrupting chemicals and their binding to host molecules with molecular modelling

Substancje zaburzające funkcjonowanie układu hormonalnego ( tzw. Endocrine Disrupting Chemicals, EDC) to substancje, które wykazują niekorzystny wpływ na funkcjonowanie układu hormonalnego. Często spowodowane jest to interakcją EDC z receptorami w taki sam sposób, w jaki wiążą się z nim naturalne ligandy receptora. Wśród EDC znajdują się aktywne substancje farmaceutyczne (Active Pharmaceutical Ingredients, API), takie jak hormony steroidowe.

Cyklodekstryny (CD) to cykliczne oligosacharydy stosowane jako nośniki dla API o niskiej rozpuszczalności w wodzie oraz jako substancje usuwające toksyny. Celem tego badania było opracowanie różnych technik modelowania molekularnego w celu analizy interakcji pomiędzy wybranymi EDC a receptorem estrogenowym lub CD.

Zastosowano następujące metody badawcze: parametryzację wybranych EDC (estradiol, progesteron, bisfenol A) i CD w polaryzowanym polu siłowym AMOEBA, a następnie symulację dynamiki molekularnej układu Receptor Estrogenu + EDC; testy porównawcze różnych podejść obliczeniowych opartych na mechanice kwantowej (DFT, podejścia półempiryczne) i mechanice molekularnej (MD/MMGBSA) jak i testowanie wybranych parametrów obliczeń, na przykładzie układu estradiol +  $\beta$ CD.

