

Городко Е.В., Терлецкая В.А.

МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ АКТИВНОСТИ ВЕЩЕСТВ РОДА LAMIIUM

Научный руководитель: канд. фарм. наук, доц. Лукашов Р.И.

*Кафедра фармацевтической химии с курсом повышения квалификации и переподготовки
Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск*

Актуальность. Поиск противоопухолевых соединений среди природных источников, в частности среди растений рода *Lamium* (ламальбид, хлорогеновая кислота, вербаскозид), является перспективным направлением. В связи с этим целесообразно выполнить молекулярный докинг данных веществ с ароматазой — ферментом, который играет ключевую роль в развитии рака яичников.

Цель: провести молекулярный докинг вербаскозида, ламальбида и хлорогеновой кислоты с ароматазой и определить ее роль в механизме противоопухолевого действия.

Материалы и методы. Для проведения молекулярного докинга использовали программу AutoDock Vina. Трехмерная структура ароматазы была получена из базы Protein Data Bank. Визуализацию результатов выполняли в программе PyMOL. Подготовку белка-мишени к докингу проводили с помощью AutoDock Tools (ADT). Количественный и качественный анализ контактов между лигандом и белком осуществляли в программе LigPlot+.

Результаты и их обсуждение. В результате проведенного компьютерного моделирования установлено, что ламальбид, вербаскозид и хлорогеновая кислота обладают сродством к ароматазе, однако реализуют его посредством различных механизмов связывания. На основании анализа энергетических и геометрических характеристик комплексообразования наиболее перспективным ингибитором следует считать ламальбид, который демонстрирует прямые контакты с каталитическими остатками активного центра.

Выводы. Полученные данные предоставляют теоретическую основу для последующих экспериментов *in vitro* и *in vivo*, направленных на оценку цитостатического потенциала соединений из рода *Lamium* и создание на их основе новых противоопухолевых препаратов.