

## **Оценка степени связывания никотина с печеночной киназой V1 (LKB1)**

*Хмурчик Диана Александровна*

*Белорусский государственный медицинский университет, Минск*

*Научный(-е) руководитель(-и) Прудников Георгий Александрович, Белорусский государственный медицинский университет, Минск*

### **Введение**

Механизмы, контролирующие клеточную пролиферацию, зависят от комплекса процессов которые, изменяясь или повреждаясь, могут привести к росту риска канцерогенеза. Система инсулиноподобного фактора роста (IGF) имеет важную роль в росте клеток и метаболических процессах. Жидкость для электронных сигарет, получивших сейчас широкое распространение, содержит мало компонентов и лишена продуктов сгорания табака и поэтому считается, что она имеет менее вредный эффект. Поэтому является актуальным исследование возможного влияния компонентов электронных сигарет на организм, в том числе на прогрессирование злокачественных опухолей основного компонента – никотина.

### **Цель исследования**

Оценка влияния никотина на молекулярные механизмы регулирования роста раковых клеток на примере его взаимодействия с одним из компонентов системы инсулиноподобного фактора роста (IGF) – печеночной киназой V1 (LKB1).

### **Материалы и методы**

Исследование взаимодействия печеночная киназа V1 – никотин производилось путем молекулярного докинга с помощью программы на сайте docking server. Для расчетов использовалась структурная формула никотина (лиганда – вещества, которое «присоединяется» к рецепторному комплексу) и структурная формула самого рецептора (печеночная киназа V1). По результатам молекулярного докинга были получены значения свободной энергии связывания никотина с печеночной киназой V1 и константы ингибирования.

### **Результаты**

При проведении молекулярного докинга с помощью программы docking server были получены значения свободной энергии связывания и константы ингибирования в связывании печеночной киназы V1 (белка) с компонентом электронных сигарет никотином. По результатам молекулярного докинга были получены следующие значения свободной энергии связывания никотина с печеночной киназой V1 – -4,97 ккал/моль. Константа ингибирования – 227μМ. Связывание никотина с печеночной киназой V1 происходит не по активному центру, что, вероятно может нарушать его функцию. Поэтому даже никотин без других компонентов в жидкости для электронных сигарет способен связываться с белками-супрессорами опухоли, что может, вероятно, способствовать онкогенезу.

### **Выводы**

Связывание никотина с печеночной киназой V1 происходит не по активному центру, что, вероятно может нарушать его функцию. Поэтому даже никотин без других компонентов в жидкости для электронных сигарет способен связываться с белками-супрессорами опухоли, что может, вероятно, способствовать онкогенезу.