

Оценка степени связывания никотина с гамартин-тубериновым комплексом (TSC1/TSC2)

Хмурчик Диана Александровна

Белорусский государственный медицинский университет, Минск

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

Введение

Первая электронная сигарета появилась в начале 2000-х годов и сразу вызвала интерес у всех слоев населения, включая клиницистов. В жидкости для электронных сигарет мало компонентов, она не содержит 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) – гамартин-тубериновым комплексом (TSC1/TSC2).

Материалы и методы

Исследование взаимодействия гамартин-тубериновый комплекс (TSC1/TSC2) – 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 (гамартин-тубериновый комплекс). По результатам молекулярного докинга были получены значения свободной энергии связывания никотина с гамартином и туберином и константы ингибирования.

Результаты

При проведении молекулярного докинга с помощью программы docking server были получены значения свободной энергии связывания и константы ингибирования в связывании гамартин-туберинового комплекса (белка) с компонентом электронных сигарет никотином. По результатам молекулярного докинга были получены следующие значения свободной энергии связывания никотина с гамартином и туберином – -3,65 ккал/моль и -4,00 ккал/моль соответственно. Константа ингибирования – 2,12 mM и 1,17 mM соответственно. Связывание никотина с гамартин-тубериновым комплексом 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 гамартин-тубериновым комплексом 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.