

*Хмурчик Д. А.*

## ОЦЕНКА СТЕПЕНИ СВЯЗЫВАНИЯ ОПУХОЛЕВОГО БЕЛКА-СУПРЕССОРА PTEN С КОМПОНЕНТАМИ ЖИДКОСТИ, ИСПОЛЬЗУЕМОЙ В ЭЛЕКТРОННОЙ СИГАРЕТЕ

*Научный руководитель канд. мед. наук, доц. Глебов А. Н.*

*Кафедра патологической физиологии*

*Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск*

**Актуальность.** Вопросы безопасности электронных сигарет для человека являются актуальными с момента их появления в 2004 г. Электронная сигарета позиционируется производителями как менее вредная для здоровья человека, так как в ней содержится меньшее количество компонентов, отсутствуют продукты сгорания табака, однако соответствующие испытания ВОЗ проведены не были. В связи с этим актуальным является изучение влияния различных компонентов жидкости, используемой в электронных сигаретах на организм человека, в том числе на механизмы канцерогенеза. Фосфатидилинозитол-3-киназа/Akt/mTOR-сигнальный путь является универсальным для большинства клеток организма и обеспечивает их пролиферацию, метаболизм и дифференцировку, одним из ингибиторов его является фосфатаза PTEN. Инактивация PTEN обнаруживается во многих опухолях, поскольку приводит к неконтролируемому делению с утратой дифференцировки, сбоям в метаболизме клетки и извращённой синтезу.

**Цель:** оценка степени связывания опухолевого белка-супрессора PTEN с компонентами жидкости, используемой в электронных сигаретах – глицерином, пропиленгликолем и никотином.

**Материалы и методы.** Исследование взаимодействий белка-супрессора PTEN с компонентами жидкости для электронных сигарет производилось путем молекулярного докинга с помощью программы на сайте <https://www.dockingserver.com>. Для расчетов использовалась структурная формула лиганда (глицерин, пропиленгликоль, никотин) и структурная формула белка (фосфатазы PTEN).

**Результаты и их обсуждение.** По результатам молекулярного докинга были получены значения свободной энергии связывания и константы ингибирования наилучшей конформации для каждого взаимодействия. Молекулярный докинг показал, что величина свободной энергии связывания никотина с опухолевым белком-супрессором PTEN характеризуется увеличением этого показателя в сравнении с глицерином и пропиленгликолем, соответственно на 27% и 41%. Установлено, что константа ингибирования никотином опухолевого белка-супрессора PTEN имеет наименьшее значение в сравнении с данным показателем для глицерина и пропиленгликоля, соответственно на 81% и 90%. Полученные данные свидетельствуют о наличии высокого сродства к сайту связывания опухолевого белка-супрессора PTEN для никотина в сравнении с глицерином и пропиленгликолем.

**Выводы.** Полученные молекулярным докингом данные о свободной энергии связывания и константы ингибирования лигандов – глицерина, пропиленгликоля и никотина с опухолевым белком-супрессором PTEN, дают основание утверждать, что никотин оказывает более выраженный биологический эффект на опухолевый белок-супрессор PTEN, чем глицерин и пропиленгликоль.