

*Большюсов И. А., Холупко О. Е.*

## **ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МОЛЕКУЛЯРНОГО ДОКИНГА В AUTODOCK VINA ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ b2-АДРЕНОРЕЦЕПТОРОВ С ЛИГАНДАМИ**

*Научный руководитель канд.мед.наук, доц. Волчек А. В.*

*Кафедра фармакологии*

*Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск*

**Актуальность.** Молекулярный докинг — метод молекулярного моделирования, позволяющий предсказать наиболее выгодную для образования устойчивого комплекса ориентацию и конформацию одной молекулы (лиганда) в сайте связывания другой (рецептора). В последние годы подход виртуального скрининга для стыковки небольших молекул с известной белковой структурой стал мощным инструментом разработки лекарственных средств. Одним из ведущих программных обеспечений, позволяющих провести такое взаимодействие является Autodock. Однако нет исследований о соответствии результатов молекулярного докинга *in silico*, полученных посредством этой программы, данным других методов, в частности, кристаллографии. Вместе с тем существуют сведения о необходимости для некоторых пар лиганд-рецептор дополнительных условий взаимодействия, таких как наличие молекул воды.

**Цель:** оценить возможность использования программы Autodock vina для прогнозирования взаимодействия пары рецептор-лиганд на примере молекулярного докинга b2 – адренорецептора с салбутамолом, эпинефрином и добутамином.

**Материалы и методы.** Проведен сравнительный анализ результатов взаимодействия b2-адренергического рецептора с салбутамолом, эпинефрином и добутамином методом молекулярного докинга с использованием программы Autodock vina, данных современной научной литературы и Национального центра биотехнологической информации (NCBI). В качестве эталона была принята кристаллическая структура человеческого b2-адренергического рецептора, связанного с салметеролом и нанотелом Nb71. Критериями для анализа были энергия связывания и особенности топографии активного центра b2-рецептора в соединении с молекулами салбутамола, эпинефрина и добутамином. Для проведения молекулярной стыковки использовалась структура стабилизированного нанотелами активного состояния b2-адренорецептора и 3D структуры молекул салбутамола, эпинефрина и добутамином. Молекулы белков были взяты из единого реестра Protein Data Bank (PDB). Оценка результатов докинга была проведена в программе молекулярной визуализации PyMOL.

**Результаты и их обсуждение.** Исследование показало, что активный центр молекулы b2-рецептора образован следующими аминокислотными остатками: серин 1203, серин 1207, валин 1114, аспартат 1113, аспарагин 1293 и фенилаланин 1289 и 1290. Сведения Национального центра биотехнологической информации о взаимодействии человеческого b2-адренергического рецептора с салметеролом полностью совпадают с результатами молекулярного докинга.

**Выводы.** В отношении взаимодействия b2-адренергического рецептора с лигандами салбутамолом, эпинефрином и добутамином молекулярный докинг в Autodock vina достаточным для предсказания результатов взаимодействия и пригодным как для применения в демонстрационных и обучающих целях на занятиях по фармакологии, так и для скрининга потенциальных лекарственных веществ.