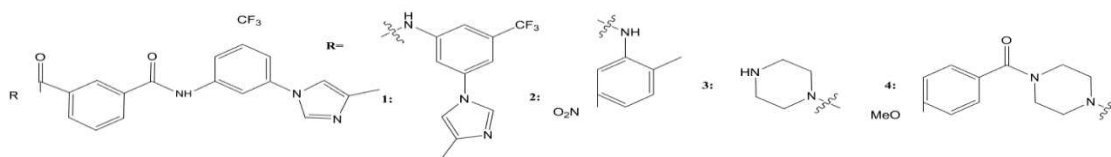


УДК 574.853+544.

Студ. В.В. Синявский, Я.Д. Капустин  
Науч. рук.: зав. кафедрой В.Н. Леонтьев (кафедра биотехнологии, БГТУ);  
науч. сотр. А.В. Фарина (НПЦ «ХимФармСинтез»)

## НОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ФТАЛЕВЫХ КИСЛОТ, СОДЕРЖАЩИЕ ФРАГМЕНТ 5-ТРИФТОРМЕТИЛАНИЛИНА, КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ИНГИБИТОРЫ ПРОТЕИНКИНА 3

Цель исследования – изучение потенциальной противокиназной активности производных изофталевой кислоты методом молекулярного докинга. Структуры соединений представлены на схеме.



В качестве рецептора для докинга использовали трехмерная структура тирозинкиназы Abl-человека, полученная из базы данных PDB (PDB: 3CS9). По результатам докинга с использованием программы AutoDock Vina для каждого соединения получены значения оценки эффективности связывания (таблица).

Таблица–Результаты докинга изучаемых соединений

Номер соединения	Оценка связывания, ккал/моль	Наличие водородных связей		
		Glu286	Met318	Asp381
Соединение1	-11,0	+	-	+
Соединение2	-12,0	+	+	+
Соединение3	-11,2	+	-	+
Соединение4	-10,0	+	-	+

Результаты докинга для соединений, обладающих наибольшей энергией связывания, визуализированы и проанализированы на предмет наличия водородных связей на рисунке.



Рисунок– Размещение молекул в активном центре Abl тирозинкиназы

Таким образом, соединение 2 размещается в активном центре тирозинкиназы, образуя три водородные связи, обладает хорошей энергией связывания, следовательно, оно может быть потенциальным ингибитором протеинкиназ и обладать противоопухолевой активностью.