

Докинг гибридов стероидных эстрогенов с бетулиновой кислотой

Ширяев В.А., Корнилов В.Э., Закирова А.И.

Университет ИТМО, г. Санкт-Петербург  
Научный руководитель: к.х.н. Морозкина С.Н.  
Университет ИТМО, г. Санкт-Петербург

Молекулярный докинг – это метод молекулярного моделирования, который позволяет предсказать связывание лиганда в лиганд-связывающем участке рецептора эстрогена (ER) и устойчивость образующегося лиганд-рецепторного комплекса.

Полученные данные могут быть использованы для предсказания свойств новых молекул, а также для объяснения их биологического действия.

Известны гибриды эстрогенов с различными биологически активными соединениями, цель которых – получение молекул с заданными свойствами, которые могут быть использованы в качестве лекарственных препаратов, но лишены гормонального эффекта. Рецепторы эстрогенов находятся во многих органах и тканях человека и опосредуют различные функции, как: поддержание сосудистого тонуса, ингибирование остеокластов, выработка серотонина, регуляция апоптоза, защиту от остеопороза, защищают от сердечно-сосудистых заболеваний и многие другие. Ингибиторы рецептора эстрогенов (антиэстрогены) и селективные модуляторы рецепторов эстрогенов широко используются в клинической практике для лечения гормоно-зависимых заболеваний, таких как рак молочной железы и рак простаты.

Целью работы является связывания гибридов природного  $17\beta$ -эстрадиола и модифицированных аналогов эстрогенов с бетулиновой кислотой с рецепторами эстрогенов и изучение конформации лиганда с целью предсказания их биологических свойств. Ожидается получение гибридов с минимальным гормональным эффектом.