

Пошук потенційних інгібіторів гама-глутамілтранспептидази 1 людини

Журба Катерина Олександрівна, учениця 11 класу спеціалізованої загальноосвітньої школи І-ІІІ ступенів №14 Кіровоградської міської ради Кіровоградської області

- Учасниця олімпіади з хімії (2019 р., міський етап, ІІ місце),
- Учасниця олімпіади з української мови (2019 р., міський етап, ІІІ місце),
- Учасниця мовного конкурсу Ячика (2019р., міський, ІІ місце)

Сфера наукових інтересів: хімія, молекулярний докінг.

Підвищення рівня гама-глутамілтранспептидази людини (hGGT1) характерне для кількох ракових захворювань. Комплексний аналіз активності hGGT1 показав, що більшість пухлин продукують надмірну кількість GGT. Доведено *invitro* та *invivo*, що шлях інгібування hGGT1 впливає на ріст ракових клітин через збільшення зупинки клітинного циклу і підвищує чутливість до стандартної хіміотерапії. Проводяться інтенсивні зусилля щодо виявлення інгібіторів ферменту гама-глутамілтранспептидази 1.

В даній роботі проведено докінг моделювання сполук похідних на базі існуючого 2S-азаніл-4-[1-(2R-гідрокси-2-оксоетиламіно)-1-оксиданіліден-бутан-2-іл]оксисульфоілбутанової кислоти (DDB) в активний центр hGGT1-комплексу. Розрахована енергія утворення комплексів з hGGT1. Змодельовано похідні найефективнішого інгібітора hGGT1-комплексу за допомогою PcModel. В результаті виконання роботи нами виявлено ряд сполук потенційно більш ефективних щодо інгібування hGGT1, ніж відомі на сьогоднішній день інгібітор DDB.