

## ДОКИНГ СТЕРОИДОВ НА ЭКДИЗОНОВЫЙ РЕЦЕПТОР НАСЕКОМЫХ

Кондратьев М.С., Самченко А.А., Комаров В.М.

Институт биофизики клетки Российской академии наук - обособленное подразделение  
Федерального государственного бюджетного учреждения науки «Федеральный  
исследовательский центр «Пушкинский научный центр биологических исследований  
Российской академии наук»

Создание экологически чистых инсектицидов остается актуальной задачей для биотехнологии и агрокультуры. В выборе мишеней для избирательного действия на организмы насекомых-вредителей, таких как белокрылки (*Aleyrodidae*), особо привлекательными выглядят экдизоновые рецепторы членистоногих. Это белки, которые взаимодействуют с экдизоном, стероидным гормоном, отвечающим за линьку и метаморфоз насекомых [1]. Ингибирование этого процесса представляется достаточным для подавления активности вредителей.

Стоит также отметить, что стероидные соединения с активностью экдизона вырабатывается и самими растениями – предполагается, что они синтезируют экдизоны для защиты от насекомых, поскольку в большом количестве эти соединения для членистоногих токсичны [2]. Считаясь БАДами (экстракт левзеи, *Rhaponticum*), фитоэкдизоны в настоящее время входят в практику, хотя недавно было показано, что эти стероиды связаны с процессом старения и могут, отчасти, контролировать различия в продолжительности жизни у насекомых, и вероятно у млекопитающих [3]. Изучение возможных механизмов действия экдизонсодержащих препаратов обуславливает актуальность нашей работы.

Объектами данного исследования были выбраны стероидные лиганды, которые связывались с экдизоновым рецептором насекомых (*Aleyrodidae*), взятый из банка белковых структур (1Z5X). Вещества с тетрациклической системой гонана (стероиды) были выбраны по данным обзора литературы: альфа-экдизон, экдизон, андростендиол, понастерон-А, тестостерон-А и дигидротестостерон. Расчеты были выполнены в пакете Autodock VINA 1.1.2 на 32-ядерном XEON-сервере с 64 гигабайтами памяти. Предварительная подготовка моделей структур была выполнена в пакете MGLTools 1.5.6.

Нами было воспроизведено экспериментально известное связывание понастерона-А в соответствующем кармане экдизонового рецептора, и обнаружено, что там же (аффинность  $10$  ккал/моль) связывается андростендиол, тестостерон, дигидротестостерон и, конечно, сам экдизон, тогда как его замещенное производное, альфа-экдизон связывается в другой части глобулы с гораздо меньшей аффинностью ( $7$  ккал/моль).

1. Ахрем А. А., Левина И. С., Титов Ю. А., Экдизоны — стероидные гормоны насекомых, Минск, 1973

2. Хефтман Э., Биохимия стероидов, пер. с англ., М., 1972.

3. Tatar M. The neuroendocrine regulation of *Drosophila* aging // *Experim. Gerontol.*—2004.—Vol. 39.—P. 1745–1750.