**Поиск новых пептидных лигандов для гемосорбентов, обладающих селективностью к фактору некроза опухоли альфа и интерлейкинам семейства интерлейкин-1**

***Семков И.Д., Грибовская О.В.***

*Аспирант, 1 год обучения*

*Институт биоорганической химии НАН Беларуси, 220084, г. Минск, ул. Академика В.Ф. Купревича 5/2, Беларусь*

*Е-mail:* *semkov\_i@mail.ru*

**Введение.** Интерлейкины (ИЛ) – это обширная (более 11 семейств) группа сигнальных молекул белковой природы, выполняющих различные функции иммунного характера в организме человека (развитие воспаления, высвобождение гистамина и т.д.) [1, 2]. В некоторых случаях в работе иммунной системы могут происходить сбои, которые приводят к гиперпродукции ИЛ, провоцирующей развитие различных патологий, таких как цитокиновый шторм, ревматоидный артрит и т.д. Тогда для улучшения общего состояния пациента необходимо удалять из плазмы крови избыток ряда ИЛ, что может достигнуто применением гемосорбции с использованием специфических гемосорбентов. Так, к примеру, в лаборатории прикладной биохимии ИБОХ НАН Беларуси были получены пептидные лиганды Glp-His-Trp-OMe, Asp-D-Tyr-Ala-Pro, Asp-D-Tyr-D-Ala-Pro и образцы гемосорбентов на их основе, обладающие различной селективностью к одному из типов интерлейкинов – ИЛ-8 [3]. С целью поиска новых пептидных соединений как потенциальных лигандов для гемосорбентов, способных связывать другие классы ИЛ, было решено провести компьютерное моделирование.

**Материалы и методы.** Молекулярное моделирование осуществляли с применением программного пакета Molecular Operating Environment; трехмерные модели интерлейкинов и их рецепторов были взяты с базы данных Protein Data Bank.

**Результаты и обсуждение.** По результатам молекулярного моделирования были сформированы перечни, а затем отобраны потенциальные биологически активные пептидные лиганды, обладающих специфичностью к различным типам интерлейкинов, таблица 1.

Таблица 1. Пептиды, обладающие наибольшим сродством к изучаемым интерлейкинам

|  |  |  |
| --- | --- | --- |
| Аминокислотная последовательность | Класс интерлейкина | Значение свободной энергии, *ккал/моль* |
| Glu-Glu-Phe | ИЛ-1α | -6.8 |
| Leu-Ser-Asp-Ile | ИЛ-1β | -7.5 |
| Asp-Tyr-Gly-Ser | ФНО-α | -7.4 |

Таким образом, был получен набор потенциально биологически активных пептидов, способных специфически связываться с ИЛ разных типов. Следующим этапом исследования станет синтез отобранных пептидов, получение экспериментальных образцов сорбентов на их основе и оценка эффективности связывания в рамках стендового эксперимента.

*Данная работа выполнена в рамках гранта БРФФИ №Х24МП-016.*

**Литература**

1. Brocker, C. Evolutionary divergence and functions of the human interleukin (IL) gene family/ C. Brocker, [et al.]//. Human Genomics. – 2010. – Vol. 5, №1. – P. 30–55.

2. Cytokine tutorial, The University of Arizona [электронный ресурс]. – Режим доступа: http://microvet.arizona.edu/Courses/MIC419/Tutorials/cytokines.html. – Дата доступа: 21.02.2025.

3. Грибовская, О. В. Модификация олигопептидов с целью повышения эффективности их взаимодействия с интерлейкином-8 в плазме крови человека/ О. В. Грибовская [и др.] //Биоорганическая химия. – 2020. – Т. 46. – №. 2. – С. 133-139.