**TITULO**

**Acoplamiento molecular para actividad trombólitica de algunos compuestos aislados de *Clausena lansium*.**

**RESUMEN**

La *Clausena lansium* (Familia- Rutaceae), comúnmente conocida como wampi o vampi, se encuentra en las tierras de barbecho o en terrenos baldíos en Bangladesh. Este estudio pretende hacer acoplamientos moleculares para identificar posibles afinidades de enlace de los fitocompuestos de Clausena lansium, específicamente Clausemarin B, Clausenaline C, Clausenaline E, Murrayanine, vanillic acid y Xanthotoxol en busca de la molecula principal de actividad trombolitica. El acoplamiento molecular realizado por Schrodinger ofreció un amplio rango de cocientes de acoplamiento que fueron para Clausemarin B , Clausenaline C , Clausenaline E, Murrayanine , vanillic acid and Xanthotoxol -6.926, -4.041, -4.889 , -4.356, -3.007 and -5.816 respectivamente. Entre todos los compuestos fue Clausemarin B el que mostró el mejor coeficiente de acoplamiento. Por tanto Clausemarin B es el más eficaz para actividad trombolitica. En el futuro serán necesarias investigaciones in vivo para identificar la actividad trombolitica de los compuestos aislados de *Clausena lansium*

**Palabras clave***: Clausena lansium,actividad trombolítica, acoplamiento molecular,* Clausemarin B.

**ABSTRACT**

*Clausena lansium* (Family- Rutaceae), commonly known as wampee, is found in fallow lands throughout Bangladesh. Our aim of the study was to perform molecular docking studies to identify potential binding affinities of the phytocompounds from *Clausena lansium*, namely Clausemarin B, Clausenaline C, Clausenaline E, Murrayanine, vanillic acid and Xanthotoxol in search of the leading molecule for thrombolytic activity.

A wide range of docking score found during molecular docking by Schrodinger. Clausemarin B , Clausenaline C , Clausenaline E, Murrayanine , vanillic acid and Xanthotoxol showed that the docking scores were -6.926, -4.041, -4.889 , -4.356, -3.007 and -5.816 respectively. Among all the compounds Clausemarin B showed the best docking score. Therefore, Clausemarin B is the best compound for thrombolytic activity. Further *in vivo* investigation is needed to identify the thrombolytic activity of isolated compounds from *Clausena lansium*.

**Key words:** *Clausena lansium,* thrombolytic activity, Molecular docking, Clausemarin B.