

Выводы

Таким образом, анкетирование показало, что аллергические реакции на шерсть животных и укусы насекомых представляют собой существенную проблему для многих людей. Среди наиболее часто встречающихся симптомов аллергии на шерсть отмечены: зуд, кожные высыпания и проблемы с дыхательной системой. При укусах насекомых респонденты чаще всего жаловались на возникновение отеков, покраснения и зуда в области укуса. Полученные данные могут помочь в разработке профилактических мероприятий.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Изучение зависимости активности аллергена из домашней пыли от качества сырья/ М. Э. Капитонова, В. К. Голдмид, А. В. Синегубов [и др.]. // Сравнительные проблемы аллергологии и клинической иммунологии. – Иркутск, 1984. – С. 18–19.
2. Адо, А. Д. Аллергия к комарам / А. Д. Адо, А. В. Барышева // Актуальные вопросы клинической экспериментальной аллергологии и иммунологии. – Каунас, 1986. – С. 169 – 170
3. Verstraeten, J. Clinical evaluation of hyposensitization in allergic rhinitis/ J. Verstraeten, A. Verstraeten // Ann. Allergy. – 1987. – Vol. 58. – P. 416–434.
4. Швец, С. М. Аллергические реакции на яд жалящих насекомых / С. М. Швец // Российский аллергологический журнал. – 2004. – №3. – С. 9–18.

УДК 616.98

А. О. Отраднова

*Научные руководители: к.х.н доцент Л. М. Ямпольский ¹,
зав. кафедрой, доцент, к.б.н. Е. Г. Тюлькова ²*

Учреждение образования

*«ФГБОУ ВО МЗ Курский государственный медицинский университет»
г. Курск, Российская Федерация ¹*

Учреждение образования

*«Гомельский государственный медицинский университет»
г. Гомель, Республика Беларусь ²*

ПРИМЕНЕНИЕ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ УСТОЙЧИВОСТИ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ АМИНОКИСЛОТ С ЦИНКОМ ДЛЯ ОПИСАНИЯ ПРИНЦИПИАЛЬНОЙ СХЕМЫ САЙТА СВЯЗЫВАНИЯ SARS COV2 – КЛЕТКА

Введение

Применение квантово-механического подхода позволяет моделировать молекулярные структуры, выявлять возможные пути их модернизации. Одним из наиболее перспективных методов квантовой механики является метод Хартри-Фока.

Чрезвычайно важным нам представляется разработка квантово-механического подхода для интерпретации инвазии вируса в клетку (создание первичного сайта связывания) на примере комплекса: вирус COVID19 – рецептор клетки (Sars-Cov2 – ACE2). В перспективе, рассчитываем применять данный алгоритм при описании инвазивных процессов, проходящих по сходному механизму, что позволит наметить перспективные цели для конструирования лекарственных препаратов, блокирующих первичный контакт.

Цель

Разработка системных подходов и квантово-механических принципов изучения сайтов связывания «вирус–клетка» по механизму создания комплексов цинка.

Материал и методы исследования

Для проведения работы использовали программу Gaussian 09 Revision; также были отобраны аминокислоты в составе активного участка ACE2, входящие в активный сайт связывания; способные к лигандированию с цинком, в качестве комплексообразователя; проведен квантово-механический расчет оптимальных по энергии структур комплексов аминокислот S – белка (RBM участка) Sars-Cov2 с цинком; выявлены наиболее устойчивые комплексные структуры, сформировавшие сайт связывания ACE2 – S – белок (RBM участок) Sars-Cov.

Результаты исследования и их обсуждение

Ион цинка является важным комплексообразующим микроэлементом, участвующим во многих физиологических процессах в организме человека. Он играет ключевую роль в обеспечении нормального функционирования клеточных мембран, является неотъемлемой частью основных ферментов и активно участвует в различных биохимических процессах. Цинк входит в состав более чем 7000 ферментов, из которых более 200 используются организмом для переваривания пищи и усвоения полезных питательных веществ. Также этот элемент выявлен в составе многих гормонов, например, в одной молекуле инсулина содержится два хелатированных иона цинка. Элемент является важным кофактором или структурным компонентом белков антиоксидантной защиты, например, Cu/Zn супероксид дисмутаза. Примерно 30–40% клеточного цинка находится в ядрах, где одной из распространенных структур являются домены цинкового пальца, в которых ион цинка образует петлю из 20 аминокислот, связывая 2 гистидина и 2 цистеина.

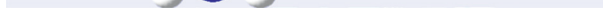
Все больше данных свидетельствует о том, что цинк функционирует как нейромедиатор для межклеточной коммуникации и как сигнальная молекула, облегчающая передачу различных сигнальных каскадов.

Точка-мишень для связывания клетки с SARS-CoV-2 – клеточный рецептор ACE2 или Ангиотензинпревращающий фермент 2 типа. Его активный центр залегает в так называемой щели, с одной стороны которой находится небольшая полость С-концевой части, а с другой – более крупная полость N-концевой части белка. Доказано, что N-терминальный домен содержит цинк-связывающий мотив, а в недавних исследованиях была установлена цинксодержащая область и С-концевой части [1]. Специфическая аминокислотная последовательность содержит аспарагиновую кислоту, глутаминовую кислоту, гистидин и аспарагиновую или глутаминовую кислоты.

В свою очередь SARS-CoV-2 при сближении с клеткой и после фуринового расщепления высвобождает на белке S1 активный блок – так называемый рецептор, связывающий домен RBD, который в свою очередь содержит рецептор, связывающий мотив RBM. Аминокислотные остатки RBM (аспарагин, глутамин, глицин, тирозин, тирозин, треонин) оказались комплементарны по формированию водородных связей к внешнему участку рецептора ACE2. Более того, между аминокислотными остатками RBM и ACE2 обнаружены ионы цинка [2, 3]. Следовательно, ион Zn может являться связующим звеном в процессе формирования сайта связывания SARS-CoV-2 с клеткой.

В связи с этими нашей задачей стало выяснить, какие из аминокислот, присутствующие в мотивах S-белка или ACE-2 имеют преимущества по связыванию цинка и, может ли цинк, за счет хелатирования обоих мотивов являться связующим элементом этого взаимодействия.

С помощью программы Gaussian 09 Revision нами построены координационные соединения некоторых аминокислот с Zn^{2+} , выявлены конформационные изменения геометрии при оптимизации структур по энергии. На рисунке 1 представлены, в качестве



вируса Sars-Cov2, что говорит об активности вирусной части сайта связывания, как целостной структуры во взаимодействии с ACE2.

В заключение, приведем, полученную нами расчетную структуру сайта связывания «RBM Sars-Cov2 – ACE2 клетки» (рисунок 2). Достаточно четко определены границы каждой из зон лигандирования.

Выводы

Применение квантово-механических расчетов для описания образования сайта связывания позволит определить наиболее уязвимые места в данном процессе и наметить наиболее вероятные структуры и механизмы, позволяющие блокировать этот процесс.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Structure of the SARS-CoV-2 spike receptor-binding domain bound to the ACE2 receptor / J. Lan, J. Ge, J. Yu [et al.]. // Nature. – 2020. – Vol. 581 (7807). – P. 215–220.
2. Borkotoky, S. Interactions of angiotensin-converting enzyme-2 (ACE2) and SARS-CoV-2 spike receptor-binding domain (RBD): a structural perspective / S. Borkotoky, D. Dey, Z. Hazarika // Mol Biol Rep. – 2023. – Vol. 50 (3). – P. 2713–2721.
3. Zn²⁺ and Cu²⁺ Interaction with the Recognition Interface of ACE2 for SARS-CoV-2 Spike Protein / A. Pelucelli, M. Peana, B. Orzel [et al.]. // Int J Mol Sci. – 2023. – Vol. 24 (11). – 9202 p.

УДК 53:[544.772:615.032.23]

М. С. Россолова, В. П. Николаенко

Научный руководитель: к. т. н, доцент В. А. Банный

Учреждение образования

«Гомельский государственный медицинский университет»

г. Гомель, Республика Беларусь

ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЕ ПРИНЦИПЫ ВВЕДЕНИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ МЕТОДОМ ИНГАЛЯЦИИ

Введение

В последние годы заболевания дыхательной системы, такие как астма и хроническая обструктивная болезнь легких, становятся все более распространенными, что подчеркивает необходимость эффективной терапии. Ингаляционная терапия – это метод лечения и профилактики, при котором лекарственные вещества вводятся в организм в виде аэрозолей или электроаэрозолей. Аэрозоль представляет собой двухфазную систему, где газообразная среда (воздух) служит дисперсионной основой для взвешенных в ней жидких или твердых частиц. В физиотерапии аэрозоли находят применение для доставки различных лечебных составов, таких как растворы лекарственных веществ, минеральные воды, фитопрепараты, масла и, в некоторых случаях, порошкообразные препараты. К другим достоинствам ингаляционной терапии по сравнению с традиционными методами фармакотерапии относятся полная безболезненность введения лекарств, сохранение их целостности при прохождении через желудочно-кишечный тракт и снижение частоты и интенсивности побочных реакций на лекарственные препараты [1].

Цель

Изучить физико-технические принципы введения лекарственных средств методом ингаляции и технологии, лежащие в основе создания различных типов ингаляторов.

Материал и методы исследования

В работе проведен сравнительный анализ и практическое опробирование различных типов ингаляторов, доступных в аптеках г. Гомеля. В качестве объектов исследования выбраны следующие типы ингаляторов: паровой ингалятор B.Well WN-118 (Швейцария),