

Скоробогатый М. В., Деменчук Е. А.

ВОЗДЕЙСТВИЕ МЕТАБОЛИТОВ ЭТАНОЛА НА МЕДИАТОРНЫЕ СИСТЕМЫ ОРГАНИЗМА

Научный руководитель канд. биол. наук, ассист. Хрусталёв В. В.

Кафедра общей химии

Белорусский государственный медицинский университет, г. Минск

Актуальность. Результаты работы позволят установить взаимосвязь между употреблением алкоголя и возникновением эффекта привыкания, открыть возможности для коррекции данного явления.

Цель: установить, взаимодействуют ли метаболиты этанола на нейромедиаторы, установить продукты взаимодействия и их фармакологические свойства.

Задачи:

1 Произвести молекулярный докинг нейромедиаторов и продуктов взаимодействия метаболитов этанола и нейромедиаторов с μ -морфиновым рецептором.

2 Сравнить полученные результаты по критериям «константа ингибирования», «свободная энергия связывания» и «сайты взаимодействия», на основании результатов сравнения сделать выводы.

Материал и методы. Молекулярный докинг проводился с помощью сайта dockingserver.com. В качестве исследуемых образцов были взяты следующие нейромедиаторы: морфин, дофамин, серотонин, триптофан, триптамин, их ацетилированные, метилированные и дегидрогенированные производные. Для установления механизма нормального взаимодействия с μ -морфиновым рецептором был также взят налоксон. Также был взят синтетический каннабиномиметик JWH-018.

Результаты и их обсуждение. Все взятые образцы взаимодействовали с одними и теми же сайтами в рецепторе, из чего можно сделать вывод о идеентичности механизмов взаимодействия. Для производных серотонина заметно незначительный рост энергии связывания и падение константы ингибирования, из чего можно сделать вывод, что связываются данные производные сильнее и в меньших дозах по сравнению с серотонином. Также установлено, что JWH-018 может взаимодействовать не только с СВ-рецепторами, но и с морфиновыми рецепторами, причём взаимодействие довольно сильное.

Выводы:

1 Ацетилированные, метилированные и дегидрогенированные производные серотонина взаимодействуют сильнее и в меньших дозах по сравнению с серотонином.

2 Фармакологическое действие JWH-018 может быть обусловлено не только взаимодействием с эндоканнабиноидной системой, но и взаимодействием с морфиновыми рецепторами.