блением алкоголя было несколько иной – 52,0 (53,3) – 41,3 (36,5) и 39,0 (37,4), заболеваемость АЗТБ – 7,2/100000 и 3,2/100000.

Совершенно очевидно, что основными причинами снижения заболеваемости АЗТБ были те же, что обуславливали снижение заболеваемости и СЗБТБ в целом по региону. Однако анализ влияния АЗ как фактора риска развития коморбидного варианта заболевания (ФР/АЗТБ) показал, что это влияние в ЭксУ было неоднозначным. Прежде всего оно было различным – в целом влияло у 5,35 % впервые заболевших и было различным для мужчин и женщин вследствие не одинаковой заболеваемости при 4,80 % у больных женщин и 6,65 % у мужчин. В ЭксУ среди женщин оно снизилось с 7,08 % до 3,63 %, а среди мужчин достоверно возросло с 5,90 % до 6,65 % ($p < 0.05$).

Выводы. Значение АЗ как ФР/АЗТБ в ЭксУ повышается, варианты клинического течения АЗТБ становятся неблагоприятными с наличием деструктивных изменений в 8,93 % случаем и в 5,54 % развитием у больных фиброзно-кавернозной формы туберкулеза легких.

ИЗУЧЕНИЕ *IN SILICO* БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ СПИРОНОЛАКТОНА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ В ОТНОШЕНИИ ГЛЮКОКОРТИКОСТЕРОИДНЫХ РЕЦЕПОРОВ У ПАЦИЕНТОВ С АЛКОГОЛЬНОЙ ЗАВИСИМОСТЬЮ

О. Ф. Краецкая, Г. П. Фандо
Кафедра общей химии Белорусского государственного медицинского университета, г. Минск, Республика Беларусь

Актуальность. Спиронолактон (7α- ацетилтио-17α- гидрокси-3-оксо-14α прегн-4-ен-21γ-лактон) – специфический фармакологический антагонист альдостерона, действующим главным образом за счет конкуренции с альдостероном за связывание с его рецептором, регулирующим обмен натрия и калия в дистальных извитых почечных канальцах. В последние несколько лет начинают публиковаться данные об исследованиях, в ходе которых был зафиксирован эффект снижения употребления алкоголя у людей с генетической алкогольной предрасположенностью (AUD), проявляющейся на фоне приёма спиронолактона. Поскольку спиронолактон (7α-ацетилтио-17α-гидрокси-3-оксо-14α-прегн-4-ен-21γ-лактон) имеет структуру химически подобную альдостерону (11β,21-дигидрокси-3,20-диоксо-14α-прегн-4-ен-18-аль), который в свою очередь является предшественником кортизола, есть вероятность того, что спиронолактон проявляет также аффинность и к ГР-рецепторам и их активации и может представлять собой новую фармакотерапию расстройств, вызванных употреблением алкоголя (AUD).

Цель. Изучить с помощью программы молекулярного докинга возможность связывания спиронолактона глюкокортикостероидными рецепторами (ГР), аналогично кортизолу; выявить функционализированное производное спиронолактона с наименьшим значением свободной энергии связывания.

Материалы и методы. Выбор белков-рецепторов проведен из банка данных 3D структур белков и нуклеиновых кислот Protein Data Bank (PDB). 3D-модели спиронолактона и его производных созданы с помощью специализированных программ пакета Chemoffice. Молекулярный докинг осуществлён с помощью сайта https://www.dockingserver.com/web.

Результаты. В ходе проведения молекулярного докинга установлена возможность связывания спиронолактона и его производных с глюкокортикостероидными рецепторами (Gi = –7.29 ккал/моль). Было определено, что наименьшим значением свободной энергии связывания с ГР аналогично кортизолу, обладает производное спиронолактона, содержащее атомы фтора (Gi = –10.95 kcal/mol), энергия связывания которого соизмерима со значениями характерными для кортизола.

Выводы. Спиронолактон и новое смоделированное на его основе производное могут рассматриваться как возможные препараты для лечения расстройств, связанных с употреблением алкоголя (AUD).

Республиканское научно-исследовательское унитарное предприятие
«Институт биохимии биологически активных соединений
Национальной академии наук Беларуси»

Republican Scientific Research Unitary Enterprise
“Institute of Biochemistry of Biologically Active Compounds
of the National Academy of Sciences of Belarus”

МЕДИКО-БИОЛОГИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ АЛКОГОЛЬНОЙ И ДРУГИХ ХИМИЧЕСКИХ ЗАВИСИМОСТЕЙ

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ
IV МЕЖДУНАРОДНОЙ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКОЙ
КОНФЕРЕНЦИИ, ПОСВЯЩЕННОЙ 100-ЛЕТИЮ
СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ АКАДЕМИКА Ю. М. ОСТРОВСКОГО
(26–27 ИЮНЯ 2025, ГРОДНО)

Приложение к журналу
«Биохимия и молекулярная биология» № 1(6) 2025

MEDICAL AND BIOLOGICAL PROBLEMS OF ALCOHOL AND OTHER CHEMICAL ADDICTIONS

THE REPORTS OF THE IV INTERNATIONAL SCIENTIFIC
AND PRACTICAL CONFERENCE, ANNEX, DEDICATED
TO THE 100TH ANNIVERSARY OF THE BIRTH OF ACADEMICIAN
YU. M. OSTROVSKY (JUNE 26–27, 2025, GRODNO)

Annex to the journal
"Biochemistry and molecular biology" no. 1(6) 2025

Минск
«ИВЦ Минфина»
2025