

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «СЕВЕРО-ОСЕТИНСКАЯ
ГОСУДАРСТВЕННАЯ МЕДИЦИНСКАЯ АКАДЕМИЯ» МИНИСТЕРСТВА
ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**

СОВЕТ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ И СПЕЦИАЛИСТОВ СОГМА

**ИНСТИТУТ БИОМЕДИЦИНСКИХ ИССЛЕДОВАНИЙ ВЛАДИКАВКАЗСКОГО
НАУЧНОГО ЦЕНТРА РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК**



МОЛОДЫЕ УЧЕНЫЕ – МЕДИЦИНЕ

**МАТЕРИАЛЫ XVII НАУЧНОЙ КОНФЕРЕНЦИИ
МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ И СПЕЦИАЛИСТОВ
С МЕЖДУНАРОДНЫМ УЧАСТИЕМ**

25 мая 2018 года

Владикавказ 2018

ББК 5
М 75

Печатается в соответствии с решением научного координационного совета
ФГБОУ ВО СОГМА Минздрава России

М 75 **Молодые ученые – медицине:** Материалы XVII научной конференции молодых ученых и специалистов ФГБОУ ВО СОГМА Минздрава России с международным участием: [Текст] – Владикавказ: ФГБОУ ВО СОГМА Минздрава России : ИПЦ ИП Цопанова А.Ю., 2018. – 360 с.

ISBN 978-5-4358-0038-6

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ:

Доцент, к.м.н. А. Е. Г у р и н а

Ответственный редактор – Р. И. К о к а е в

Исполнительный редактор – Д. В. К а б а л о е в а, М. Т. К и с и е в а

В сборник материалов XVII научной конференции молодых ученых и специалистов СОГМА с международным участием «Молодые ученые – медицине» вошли работы молодых исследователей разных регионов России и ближнего зарубежья: Северо-Осетинская государственная медицинская академия, Россия, г. Владикавказ; Северо-Осетинский государственный университет им. К.Л. Хетагурова, Россия, г. Владикавказ; Пятигорский медико-фармацевтический институт – филиал Волгоградского государственного медицинского университета, Россия, г. Пятигорск; Кабардино-Балкарский государственный университет, Россия, г. Нальчик; Ставропольский государственный медицинский университет, Россия, г. Ставрополь; Краснодарский краевой базовый медицинский колледж, Россия, г. Краснодар; Санкт-Петербургский государственный педиатрический медицинский университет, Россия, г. Санкт-Петербург; ФГБУ «НМИЦ онкологии им. Н.Н. Блохина» Минздрава России, Россия, г. Москва; Казанский (Приволжский) федеральный университет, Россия, г. Казань; Башкирский государственный медицинский университет, Россия, г. Уфа; ФГАОУ ВО «Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королёва», Россия, г. Самара; СФ ГАОУ Московский городской педагогический университет, Россия, г. Самара; Воронежский государственный университет, Россия, г. Воронеж; Воронежский государственный медицинский университет им. Н.Н. Бурденко, Россия, г. Воронеж; Ярославский государственный медицинский университет, Россия, г. Ярославль; Оренбургская государственная медицинская академия, Россия, г. Оренбург; Сибирский государственный медицинский университет, Россия, г. Томск; Пермский государственный медицинский университет им. акад. Е.А. Вагнера, Россия, г. Пермь; Северный государственный медицинский университет, Россия, г. Архангельск; Новосибирский государственный университет, Россия, г. Новосибирск; Ханты-Мансийская государственная медицинская академия, Россия, г. Ханты-Мансийск; ФГБУН «Ордена Трудового Красного Знамени Никитский ботанический сад – Национальный научный центр РАН», Никитского ботанического сада, г. Ялта, Р. Крым; Запорожский государственный медицинский университет, Украина, г. Запорожье; Сумской государственный университет, Украина, г. Сумы; Национальный фармацевтический университет, г. Харьков, Украина; Одесский национальный медицинский университет, Украина, г. Одесса; Белорусский государственный медицинский университет, Беларусь, г. Минск; Витебский государственный медицинский университет, Республика Беларусь, г. Витебск; НУО «Казахстанско-Российский Медицинский Университет», Республика Казахстан, г. Алматы; Южно-Казахстанская Медицинская Академия, Казахстан, г. Шымкент; Ташкентская медицинская академия, Республика Узбекистан, г. Ургенч; Ташкентский педиатрический медицинский институт, Узбекистан, г. Ташкент; Таджикский государственный медицинский университет имени Абуали ибн Сино, Республика Таджикистан, г. Душанбе; Таджикский национальный университет, Республика Таджикистан, г. Душанбе; Государственный Университет Медицины и Фармации „Николае Тестемицану“, Республика Молдова, г. Кишинев; Городская Клиническая Больница №4, Республика Казахстан, г. Алматы; ГБУЗ АО «Архангельская областная клиническая больница», Россия, г. Архангельск; ГБУЗ Архангельской области «Новодвинская центральная городская больница», Россия, г. Архангельск; ООО НПП «Самоздрав», Россия, г. Самара; НПО Петровакс фарм, Россия, г. Москва.

Контактный адрес:

PCO-Алания, 362019, г. Владикавказ, ул. Пушкинская, 40, СМУиС СОГМА

тел. (8672)53-76-61

E-mail: smu.nosma@mail.ru

ББК 5

ISBN 978-5-4358-0038-6

© ФГБОУ ВО СОГМА Минздрава России, 2018

УДК: 615.099.092

КЛАСТЕРИЗАЦИЯ ДОФАМИНОПОДОБНЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВАНИИ ТОПОЛОГИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК ХИМИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ

Уселёнок Г.О., Марцинкевич Я.С.

УО «Витебский государственный медицинский университет»,
Республика Беларусь, г. Витебск,

Кафедра общей и клинической биохимии с курсом ФПК и ПК
(Зав. кафедрой – доц. Куликов В.А.; научный руководитель – ст. преп. Марцинкевич А.Ф.)
E-mail: alex@capsula.by

В статье рассматривается возможность взаимодействия молекул сальсолинола и изосальсолинола с нативными мишенями дофамина. На основании проведенного иерархического кластерного анализа продемонстрирована химическая схожесть указанных соединений и наркотических веществ, способствующих увеличению концентрации дофамина.

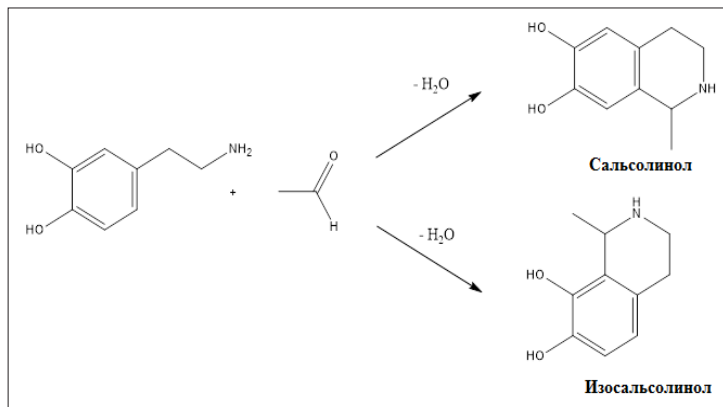
CLUSTERING OF DOPAMINE-LIKE COMPOUNDS BASED ON TOPOLOGICAL CHARACTERISTICS OF THE CHEMICAL STRUCTURE

Uselionok G.O., Martsinkevich Y.S.

The possibility of interaction between molecules of salsolinol and isosalsolinol with native dopamine targets is considered in the article. On the basis of the conducted hierarchical cluster analysis, the chemical similarity of these compounds and narcotic substances promoting the increase in dopamine concentration was demonstrated.

В настоящее время все большее значение приобретают исследования, проведенные на стыке нескольких научных дисциплин. Так, например, выяснение патогенеза того или иного заболевания невозможно без глубокого изучения протекающих молекулярно-биологических процессов, обработка которых, в свою очередь, обеспечивается средствами математической статистики и интеллектуального анализа данных.

Механизм формирования алкогольной зависимости, при сложной диагностической картине, обладает к тому же, широким спектром биологически активных соединений, определяющих развитие пагубного пристрастия. От изначальной гипотезы, обосновывающей состояние алкогольного опьянения как картину отравления ацетальдегидом, современная токсикология пришла к открытию веществ, которые, являясь метаболитами этанола, также принимают участие и в развитии эйфории после приема алкоголя.



Одним из таких соединений является сальсолинол, а также изомер – изосальсолинол, которые образуются в результате конденсации ацетальдегида и важного нейротрансмиттера, дофамина (рисунок 1).

Рисунок 1 – Схема конденсации дофамина и ацетальдегида с образованием сальсолинола и изосальсолинола

Сальсолинол, равно как и изосальсолинол, несут в своей структуре некоторые черты родительской молекулы, что позволяет предположить возможность их связывания с нативными рецепторами дофамина. Вместе с тем, существует большая группа веществ, также схожих с дофамином, но выполняющих принципиально иную функцию. Так, например, многие наркотические соединения способны блокировать обратный транспорт дофамина из синаптической щели, поддерживая его концентрацию на аномально высоком уровне. Возможно, именно посредством продуктов конденсации дофамина и ацетальдегида опосредуется развитие эффектов эйфории вследствие алкогольного опьянения, а в конечном итоге и формирование зависимости.

Начальным этапом разведочного анализа, позволяющего проверить выдвинутую гипотезу, является исследование количественных характеристик строения, таких как простой и гармонический индекс Наруми, мера эксцентриситета, матрица Барисза и прочие [1]. Определив топологические дескрипторы молекулы для ряда соединений, схожих по строению и обладающих заданными биологическими свойствами, можно найти меру сродства между целевыми соединениями в исследуемой выборке и получить информацию о возможной активности.

Таким образом, цель настоящего исследования состояла в определении химической схожести между молекулами сальсолинола и изосальсолинола, а также иными эффекторами рецепторов и транспортеров дофамина (дофамин, амфетамин, кокаин и MDMA).

Материалы и методы. Расчет топологических дескрипторов осуществлялся при помощи интерактивного web-приложения E-Dragon [2]. Анализ данных выполняли в программной среде R 3.4.4 [3], при помощи библиотеки для иерархической кластеризации rvcust [4]. Матрицу расстояний строили в евклидовой метрике, кластеризацию производили по методу МакКвитти. Для определения принадлежности соединения к тому или иному кластеру р-значения рассчитывали при помощи бутстрепа. Различия считали статистически значимыми при $p < 0,05$.

Результаты и обсуждение. В ходе исследования было построено 119 топологических дескрипторов, уникальными из которых (вследствие структурной схожести изучаемых соединений) оказались 80 параметров. Кластеризация позволила определить в выборке исследуемых молекул 2 группы соединений, обладающих, исходя из строения, сходными пространственными характеристиками. Графическое представление полученных результатов приведено на рисунке 2.

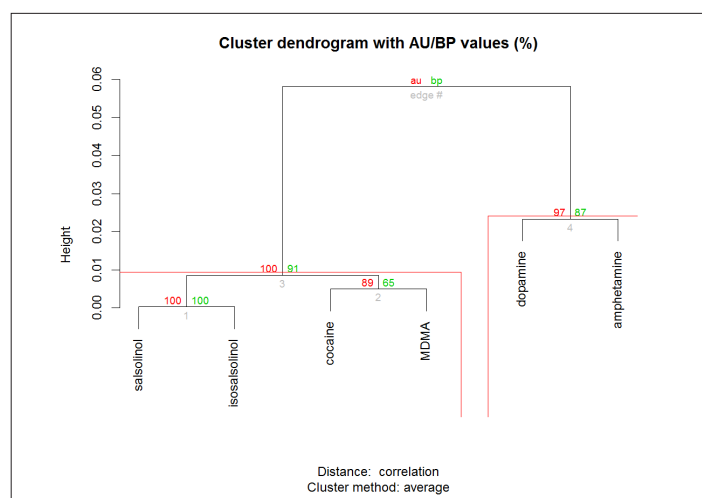


Рисунок 2 – Результаты иерархической кластеризации молекул сальсолинола и изосальсолинола на основании топологических характеристик

Можно отметить, что, вероятно, вследствие различий исключительно в положении гидроксильных радикалов в изохинолиновой системе, сальсолинол и изосальсолинола были определены в один и тот же кластер. Близким строением обладают также кокаин и MDMA, что выражается в выделении данных соединений во второй кластер. Тем не менее, исходя из полученных р-значений, данные кластеры статистически значимо не отличались друг от друга и принадлежали к одной и той же группе структур. Вторая группа структур, имеющих статистически значимо сходное строение, содержала дофамин и амфетамин.

Проведенный анализ подтвердил высказанную гипотезу о химической схожести производных дофамина, образованных вследствие конденсации с ацетальдегидом, и некоторых наркотических веществ, стимулирующих высвобождение дофамина.

Таким образом, на основании полученных результатов можно сделать следующие выводы:

Сальсолинол и изосальсолинол обладают схожими топологическими характеристиками.-

Соединениями, близкими по строению к сальсолинолу и изосальсолинолу являются кокаин и MDMA.

Полученные сведения, к сожалению, не могут количественно оценить биологическую активность исследуемых веществ, однако, дают основания для проведения дальнейших исследований.

Список литературы:

1. Dehmer, M. Statistical Modelling of Molecular Descriptors in QSAR/QSPR / M. Dehmer, K. Varmuza, D. Bonchev // John Wiley & Sons, 2010. – 456 p.
2. Virtual Computational Chemistry Laboratory [Electronic resource]. – Mode of access: <http://www.vcclab.org/lab/edragon/>. – Date of access: 01.04.2018.
3. The R Project for Statistical Computing [Electronic resource]. – Mode of access: <http://www.r-project.org>. – Date of access: 02.04.2018.
4. pvclust: Hierarchical Clustering with P-Values via Multiscale Bootstrap [Electronic resource]. – Mode of access: <https://CRAN.R-project.org/package=pvclust>. – Date of access: 01.04.2018.

УДК: 615.33.036:616.61-002-08-039.57

ОПРЕДЕЛЕНИЕ АНТИБАКТЕРИАЛЬНОГО И НЕФРОТОКСИЧЕСКОГО ДЕЙСТВИЯ ЦЕФОТАКСИМА У БОЛЬНЫХ ХБП III СТАДИИ

Хайтбоев Ж.А., Матмуратова С.О.

*Ургенческий филиал Ташкентской медицинской академии, Узбекистан, г. Ургенч,
Кафедра ПВБ и кожно-венералогических заболеваний
(зав. кафедрой-Джуманиязова З.Ф., научный руководитель-проф. Жаббаров А.А.)
E-mail: doc_xz@mail.ru*

В работе приведены сведения о хроническом пиелонефрите, осложненных ХБП III стадии и функциональном состоянии почек. Освещаются вопросы современного лечения пациентов, согласно утвержденным стандартам. Приведены данные по препаратам цефотаксим обладающими антибактериальными и нефротоксическими свойствами, и обосновывается их применение у данной категории больных.