

Слепченко П. В., Скачко Е. Н. Науч. рук. Квиткевич Л. А.
**Влияние веществ, содержащихся в табачных и
электронных сигаретах на тонус сосудов**

Учреждение образования «Белорусский государственный
медицинский университет»

Гладкомышечные элементы стенки кровеносного сосуда постоянно находятся в состоянии умеренного напряжения – сосудистого тонуса. Существует три механизма регуляции сосудистого тонуса: ауторегуляция, нервная регуляция и гуморальная регуляция (осуществляется веществами системного и местного действия). К веществам системного действия относятся ионы кальция, калия, натрия, гормоны. К веществам местного воздействия относятся: медиаторы симпатической нервной системы – сосудосуживающее действие, парасимпатической (ацетилхолин) – расширяющее; биологически активные вещества – гистамин расширяет сосуды, а серотонин суживает; кинины – брадикинин, калидин – оказывают сосудорасширяющее действие; простогландины A1, A2, E1 расширяют сосуды, а F2 α суживает. В данной работе исследовалась первичная реакция изменения сосудистого тонуса при действии различных веществ, входящих в состав табачных и электронных сигарет на NO-рецепторы (NO оказывает сосудорасширяющий эффект).

Цель исследования: нахождение веществ в составе табачных и электронных сигарет, обладающих наименьшими константами ингибирования и наибольшими

свободными энергиями связывания при связывании с NO-рецептором.

Материалы и методы: Исследование взаимодействий NO-рецептор - лиганд производилось путем молекулярного докинга с помощью программы docking server ((copyright © 2006-2011 Virtua Drug) is maintained by Virtua Drug Ltd; Powered by Web6). Молекулярный докинг – это метод молекулярного моделирования, который позволяет предсказать наиболее выгодную для образования устойчивого комплекса ориентацию и положение одной молекулы по отношению к другой.

Результаты и их обсуждение: В результате исследования мы получили значения констант ингибирования, энергий связывания и других видов энергии, которые дали нам право сделать выводы о совместимости рецептора и инородного лиганда.

Таблица 1 – Сравнение констант ингибирования веществ, содержащихся в сигаретах

Лиганд	Значение
1. Никотин	36.43 μM
2. Пропеналь (акролеин)	10.61 mM
3. Катехол	122.83 mM
4. Аммиак	4.13 mM
5. Этаналь	21.99 mM
6. Бутан	6.52 mM
7. Бензол	1.2 μM
8. Флюорен	18.74 μM
9. Пирен	2.51 mM
10. Уксусная кислота	441.27 mM
11. Пропандиол	1.77 mM
12. Глицерин	968 μM

Константа ингибирования – это минимальное количество вещества, которое требуется для того, чтобы связаться с рецепторным комплексом. Из данной таблицы видно, что у пирена, флюорена и никотина наименьшие значения констант ингибирования, следовательно, этих веществ потребуется меньше всего, чтобы связаться с рецептором.

Таблица 2 – Сравнение свободных энергий связывания

Лиганд	Значение
1. Никотин	-6.06 ккал/моль
2. Пропеналь (акролеин)	-2.69 ккал/моль
3. Катехол	-1.24 ккал/моль
4. Аммиак	-3.25 ккал/моль
5. Этаналь	-2.26 ккал/моль
6. Буган	-2.98 ккал/моль
7. Бензол	-3.89 ккал/моль
8. Флюорен	-6.45 ккал/моль
9. Пирен	-7.64 ккал/моль
10. Уксусная кислота	-0.48 ккал/моль
11. Пропандиол	-3.75 ккал/моль
12. Глицерин	-4.11 ккал/моль

Свободная энергия связывания – энергия, которая выделяется при связывании лиганда с рецептором. Чем больше значение энергии по модулю, тем сильнее будет связывание. Но учет изначального знака все-таки есть: если энергия отрицательная, то связывание происходит самопроизвольно. Если положительная – то для связывания нужно подействовать энергией извне.

Выводы:

1. Спектр веществ, содержащихся в табачных сигаретах, лучше изучен и представлен более

разнообразными соединениями, чем спектр веществ, входящих в состав электронных сигарет.

2. Исследуемые компоненты сигарет при связывании с NO-рецептором вызывают первичную реакцию расширения сосудов

3. Вследствие более широкого спектра веществ, входящих в состав табачных сигарет, расширение сосуда произойдет под действием меньшей их концентрации, в отличие от электронных сигарет, имеющих меньше компонентов.

Библиографический список

1. Качан, В. А. О вреде курения. – Мн.: Беларусь, 1979 – 31 с.
2. Казьмин, В. Д. Курение, мы и наше потомство / В. Д. Казьмин. – Москва: Советская Россия, 1989. – С.13.
3. Дюбкова Т. П. Химический состав табачного дыма: токсические и канцерогенные эффекты на организм человека/Т. П. Дюбкова/ Медицинская панорама. –Минск, 2008, №9. –С.34-39.
4. Кубарко, А. И. Нормальная физиология: учебник. В 2 ч. Ч. 1 / А. И. Кубарко, В. А. Переверзев, А. А. Семенович; под. ред. А. И. Кубарко. – Минск: Вышэйшая школа, 2013. – С. 262-264.
5. Антонов Н. С., Сахарова Г. М., Донитова В. В. Электронные сигареты: оценка безопасности и рисков для здоровья (обзор) // Пульмонология. – 2014. - №3. – С. 122-127.
6. Беляев, И. И. Табак – враг здоровья. – М. Медицина, 1979 – 56 с.