

## ДОСЛІДЖЕННЯ СЕНСИБІЛІЗАЦІЇ ДО ПЕНІЦИЛІНІВ У ХВОРИХ НА АЛЕРГОДЕРМАТОЗИ, АСОЦІЙОВАНИХ З COVID-19

Хміль Н.В.<sup>1</sup>, Колесніков В.Г.<sup>2</sup>

<sup>1</sup>Харківський національний університет радіоелектроніки, м. Харків

<sup>2</sup>Інститут радіофізики та електроніки

ім. О. Я. Усикова НАНУ, м. Харків

В роботі розглянуто питання сенсибілізації до пеніциліну  $g$  та його метаболітів шляхом визначення діелектричної проникності ( $\varepsilon'$ ) та динамічного поверхневого натягу ( $\sigma$ ) плазми крові хворих на алергодерматози, асоційованих з Covid-19 за допомогою мікрохвильової діелектрометрії. Побудовано моделі комплексів сироваткового альбуміну людини (САЛ) з низько-молекулярними лігандами – метаболітами пеніциліну  $g$  за допомогою методу молекулярного докінгу.

Діелектрична проникність є параметром оцінки розвитку патологічного процесу організму людини на молекулярному рівні. Діелектрична проникність області  $\gamma$ -дисперсії вільної води ( $f = 37,7$  ГГц) характеризує зміну відносної кількості об'ємної та гідратаційної води на білкових структурах [1]. За допомогою апаратурно-реєструючого комплексу на базі мікрохвильової діелектрометрії проведено візуалізацію інтегральної зміни гідратації білкових компонентів нативної плазми крові хворих на алергодерматози, асоційованих з Covid-19 та здорових пацієнтів, а також плазми крові, навантаженої пеніциліном в залежності від етіології захворювання. Одночасно аналізували  $\sigma$  плазми крові на першій моді «sweeper»-режиму акустичних частот  $f = 5...60$  Гц. Висока кореляційна залежність  $\varepsilon'$  плазми крові та  $\sigma$  з показниками швидкості осадження еритроцитів ( $r_s = +0,87$ ) та реакції агрегації лейкоцитів ( $r_s = +0,93$ ) дозволяє рекомендувати мікрохвильову діелектрометрію як додатковий засіб експрес візуалізації вірусної інвазії, яка супроводжує патологічні зміни шкіри.

Методом молекулярного докінгу проведена оцінка вільної енергії Гіббса при зв'язуванні САЛ з головними та другорядними метаболітами пеніциліну  $g$  та середньоквадратичного відхилення структури цих комплексів від даних рентгеноструктурного аналізу. З'ясовано ймовірні сайти зв'язування антигенних детермінант – пеніцилоїл, пеніциланова кислота, пеніциламін, пенілоїкова кислота з САЛ. Показано, що комплекс «пеніцилоїл–альбумін» має найменшу вільну енергію зв'язування  $-7,9$  ккал/моль. За значенням середньоквадратичного відхилення найкращі результати реєстрували в комплексах «пенілоїкова кислота-САЛ» та «пеніциламін-САЛ». Виявлення специфічних сайтів зв'язування важливо для розробки нових імуногенних антигенів, які зможуть стимулювати імунну систему та виробляти специфічні антитіла для запобігання алергічної реакції.

### Література:

1. Солошенко Е.М. Виявлення сенсибілізації до пеніциліну G / Е. М. Солошенко, Г.К. Кондакова, Н.В. Хміль та ін. // Дерматологія та венерологія.– 2019.– №2(84).– С. 35–39. <http://doi.org/10.33743/2308-1066-2019-2-35-39>