

мическим строением. Стереохимическая гипотеза Я. Вант-Гоффа и Ле Беля (1874) расширила понятие строения. Оказалось, что свойства вещества зависят как от химического (в топологическом плане), так и пространственного строения молекул. В это же время были обнаружены первые количественные корреляции "структура – свойство" в органической химии, которые явились предтечей *аддитивных схем расчета и прогнозирования*.

На современном этапе указанная проблема весьма актуальна. Число полученных веществ (их в настоящее время более 20 млн) непрерывно возрастает. Экспериментальное определение физико-химических свойств нередко сопряжено со значительными техническими трудностями. Оно требует больших затрат материальных средств, квалифицированного труда и времени, да и не всегда возможно. В результате число изученных веществ резко отстает от числа известных (особенно это касается органических соединений, число которых исчисляется миллионами).

Наличие *надежных расчетных методов* исследования позволяет предсказывать характеристики вещества (прежде, чем оно синтезировано, а свойство измерено) и тем самым выбирать из многих (еще не изученных и даже не полученных) соединений те, которые (согласно прогнозу) удовлетворяют поставленным требованиям. Это закладывает *научные основы создания новых веществ и материалов с заранее заданными свойствами*.

В принципе все физико-химические свойства веществ можно вывести исходя из фундаментальных положений квантовой механики и физической статистики. Однако полные неэмпирические расчеты (*ab initio*) весьма трудоемки и дорогостоящи, что ограничивает их практические возможности. Ясно, что (наряду с квантовомеханическими) нужны *феноменологические методы*, которые более просты в обращении и успешно справляются с решениями задач массового расчета. Без таких методов невозможно создание информационно-поисковых систем, полноценных баз и банков данных по свойствам, целенаправленный поиск новых структур, решение задач молекулярного дизайна.

С феноменологической точки зрения молекула выступает как *система взаимодействующих атомов*. Принимая такую физическую модель, естественно предположить, что некоторое экстенсивное свойство вещества P может быть представлено как сумма свойств, приходящихся на отдельные атом-атомные взаимодействия: одноцентровые (p_α), двухцентровые - парные ($p_{\alpha\beta}$), трехцентровые - тройные ($p_{\alpha\beta\gamma}$) и т.д.

$$P = \sum_{\alpha} p_\alpha + \sum_{\alpha, \beta} p_{\alpha\beta} + \sum_{\alpha, \beta, \gamma} p_{\alpha\beta\gamma} + \dots \quad (1)$$

(общая математическая модель). Это уравнение распространяется на разные физические свойства: скалярные (например, энергия образования, энтропия), векторные (электрический дипольный момент) и тензорные (поляризуемость). Оно имеет квантовомеханическое и статистическое обоснование [2] и в принципе допускает прямые расчеты (которые в общем случае весьма трудоемки).

Выражение (1) выступает как *основной постулат феноменологической теории связи свойств веществ*

со строением молекул и служит базой для построения аддитивных схем расчета [1;2].

В докладе сформулированы основания теории, описаны схемы расчета в разных приближениях, установлены связи между ними. Определено число параметров схем, оценена предсказательная сила теории. Приведены формулы, удобные для массового расчета и прогнозирования физико-химических свойств замещенных метана (и его аналогов по подгруппе), этана, пропана, этилена, бензола и др. Проведены численные расчеты свойств. Сделаны предсказания.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (проект 04-03-96703p2004Центр-а).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Папулов Ю.Г., Виноградова М.Г. Расчётные методы в атом-атомном представлении. - Тверь: ТвГУ, 2002. - 232 с.
2. Татевский В.М. Теория физико-химических свойств молекул и веществ. - М.: МГУ, 1987. - 239 с.

ЭНДОГЕННАЯ СИСТЕМА ПИТАНИЯ МНОГОКЛЕТОЧНЫХ ОРГАНИЗМОВ

Парахонский А.П.

Кубанский медицинский университет,
Краснодар

В процессе эволюции образовалась система экзогенного питания организма (пищеварительная и дыхательная системы), и система фильтрации, что сформировало условия для многократного использования питательных веществ, непрерывно образующихся внутри организма в процессе его жизнедеятельности. Оценивая работу иммунной системы (ИС) в рамках входных и выходных параметров, основную её функцию можно обозначить как обеспечение эффективной реутилизации питательных веществ, появляющихся внутри организма в процессе его жизнедеятельности. К ним относятся погибшие клетки организма и продукты их распада, а также не полностью переваренные продукты питания и любые микроорганизмы, оказавшиеся во внутреннем пространстве организма.

Деградируя биоорганические соединения до биомолекул (БМ), ИС формирует экзогенную систему питания клеток. Для согласования функционирования систем деградаций БМ в качестве сигнальных молекул используются молекулы иммуноглобулинов (Ig), белки главного комплекса гистосовместимости — МНС и теплового шока — Hsp. ИС регулирует свою активность в направлении наиболее полного удовлетворения клеток организма в питании. Гибель клеток приводит к появлению соединений, которые организм может использовать для удовлетворения потребностей в питательных веществах. Мембранные Ig (Mlg) В-клеток связывают соответствующие белки, и транспортируют их в лизосомы, где они подвергаются деградации. При высоких концентрациях белка и резко возросшей нагрузке В-клетки не справляются со своей задачей, в результате

чего на их поверхности появляются молекулы II класса МНС в комплексе с продуктами деградации белка. Это служит сигналом для активации лимфоцитов CD4⁺, которые продуцируют лимфокины, пролиферации В-клеток и их дифференцировки в АО-клетки. Продуцируемые этими клетками Ig связывают во внешнем пространстве соответствующие белки. Образовавшиеся иммунные комплексы через Fc-рецепторы активируют клетки ИС с большим гидролитическим потенциалом (нейтрофилы - Нф, макрофаги - Мф), с помощью которых осуществляется деградация всего комплекса до БМ.

При поступлении большого количества пищи экзогенная пищеварительная система организма не справляется с ее переработкой до БМ. Появление в слизистом слое продуктов пищеварения активирует ИС, и В-клетки секретируют IgA. С помощью sIgA ИС уменьшает нагрузку на свои эффекторные клетки, повышает эффективность работы экзогенной системы питания. В основе взаимодействия клеток ИС с клетками организма лежат изменения в структуре клеточной поверхности. Появление Hsp во внеклеточном пространстве служит для Мф и ДК сигналом о нехватке БМ, что резко активизирует работу их лизосомального аппарата для обеспечения собственных потребностей. Активированные Мф способны утилизировать мембранные фрагменты погибших клеток до БМ, часть из которых выбрасывается обратно. Одновременно с этим Мф секретируют ферменты и медиаторы. В процессе макроцитоза на поверхности ДК увеличивается количество молекул МНС II и экспрессируются МНС I в комплексе с пептидами. Одновременно ДК начинают секретировать интерлейкины. Связывание Т-клеточных рецепторов с комплексами МНС II и МНС I на ДК стимулирует дифференцировку CD8-Т-лимфоцитов в присутствии ИЛ-2 в Т-киллеры, продуцирующие ИФН и ФНО. Т-лф в зоне гибели клеток, связываясь с комплексами МНС II на поверхности Мф, секретируют ИЛ-2 и ИФН, активируют новые Мф и ЕК.

Одновременно с обеспечением источников БМ для клеток, ИС стремится уменьшить скорость роста и негативное воздействие возможного недостатка БМ на функционирование в этой области других клеток организма. Эту функцию выполняют CD8-Т-киллеры и аЕК. Связывание их рецепторов с МНС I и мембранными конъюгатами клеток-мишеней вызывает секрецию этими клетками ФНО, лимфотоксина и гранул, содержащих перфорин и сериновые протеиназы. Эти медиаторы и ферменты стимулируют внутри клеток-мишеней процессы, приводящие к их гибели в результате апоптоза.

Эффективность восстановления легочной ткани обеспечивается синтезом IgE против содержащихся в воздухе органических макроструктур, проникающих в организм при повреждении легочной ткани. Фиксированные на поверхности ТК с помощью высокоаффинных рецепторов IgE дают источник БМ непосредственно в зоне повреждения за счет деградации комплексов IgE—белок.

Внеклеточные микроорганизмы воспринимаются как органические соединения, подлежащие утилизации, и соответственно вызывают развитие гуморального иммунного ответа. Внутриклеточные микроорганизмы используют для своего размножения клетки-хозяина, что вызывает истощение их внутренних ресурсов и гибель по типу некроза, сопровождаемую выбросом Hsp во внешнее пространство. Это активирует клеточный иммунитет организма.

Таким образом, гуморальное В-клеточное звено иммунной системы участвует в обеспечении БМ всего организма и в этом плане взаимодействует с экзогенной системой питания, а Т-клеточное звено участвует в обеспечении необходимого уровня БМ в зоне роста клеток и в этом плане взаимодействует с их внутриклеточной системой деградации макромолекул.

ОСОБЕННОСТИ ПОКАЗАТЕЛЕЙ КЛЕТЧНОГО ЗВЕНА ИММУНИТЕТА У ЛИЦ С ХРОНИЧЕСКИМ ГАЙМОРИТОМ ХЛАМИДИЙНОЙ ЭТИОЛОГИИ

Парилова О.В., Капустина Т.А.,

Коленчукова О.А., Родина Д.В., Кин Т.И.

ГУ НИИ медицинских проблем Севера СО РАМН

Хламидийная инфекция в последнее время привлекает особое внимание ученых и врачей, это связано с тем, что ежегодно в мире регистрируется около 90 миллионов новых случаев хламидиоза. При поражении хламидиями человека, вследствие особенностей хламидийного возбудителя, развиваются выраженные общие и местные специфические защитные реакции организма. Особенности иммунного ответа при хламидийной инфекции изучают многие исследователи, но, в основном, в литературных источниках встречаются работы, освещающие нарушения иммунного статуса при урогенитальном хламидиозе. При хронических воспалительных заболеваниях ЛОР-органов, сопряженных с хламидийной инфекцией, нарушения гомеостаза, обусловленные изменениями специфической реактивности организма, изучены недостаточно.

Поэтому, целью нашего исследования являлось выявление нарушений клеточного иммунитета у взрослых лиц с хроническими заболеваниями придаточных пазух носа, ассоциированных с хламидийной инфекцией.

Всего было обследовано 52 больных, в возрасте от 15 до 50 лет, находящихся на стационарном лечении по поводу обострения хронического гайморита. У всех обследуемых лиц проводился сбор жалоб, анамнеза заболевания и жизни, осмотр ЛОР-органов, лабораторные методы исследования, направленные на постановку диагноза и выявление хламидийного агента.

Нами производилась идентификация двух видов хламидий - *Chlamydia trachomatis* и *Chlamydia pneumoniae*. Клиническим материалом для прямого диагностирования хламидийной инфекции придаточных пазух служили мазки-соскобы со слизистой обо-