

## ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МЕХАНИЗМА ОКИСЛЕНИЯ ТЕОФИЛЛИНА

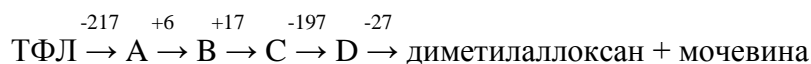
Хейдоров В.П., Ершов Ю.А.<sup>1</sup>, Максимов А.С., Титорович О.В., Чалый Г.Ю.

Витебский государственный медицинский университет, Беларусь, 210009, г. Витебск,  
тел.: 52-33-88, e-mail: [heidorov@mail.ru](mailto:heidorov@mail.ru)

<sup>1</sup>Московский государственный технический университет им. Н.Э. Баумана, Россия,  
107005, г. Москва, ул. 2-ая Бауманская, д.5

Математическое моделирование при исследовании превращения лекарственных веществ в средах *in vitro* и *in vivo* заканчивается построением модели, представляющей картину процесса, проходящего на молекулярном уровне (его механизм) и включающей независимые данные о структуре исходных, конечных и промежуточных соединений. Хотя часто молекулярные модели имеют тот или иной вероятностный характер, их создание позволяет наилучшим образом понять суть процесса, стимулирует исследования и просто необходимо на определенных этапах работы, например, при создании нового лекарственного средства.

Продолжая наши исследования [1], используя кинетические результаты [2] и термодинамический подход расчета свободной энергии Гиббса [3,4] мы провели расчеты наиболее вероятного механизма последовательных реакций окислительного превращения теofilлина (ТФЛ), очень важного лекарственного вещества. Из всех возможных вероятных маршрутов мы выбрали наиболее адекватный нашим расчетам. Согласно проведенным расчетам окислительное превращение ТФЛ можно представить модельным путем, в котором две стадии являются эндэргоническими (изменение свободной энергии равно соответственно +6 кДж/моль и +17 кДж/моль), остальные стадии являются экзэргоническими ( $\Delta G < 0$ ).



Значение  $\Delta G$  для процесса окислительного превращения теofilлина до конечных продуктов (диметилаллоксан и мочевина) равно  $-418$  кДж/моль.

Полученные нами данные согласуются с результатами [2]. Планируется иллюстрация расчетов свободной энергии разных модельных окислительных маршрутов.

### Литература.

1. Хейдоров В.П., Ершов Ю.А. Математическое моделирование кинетики окислительного превращения урацилпроизводных // Тез. XI-й межд. конф. "Математика. Компьютер. Образование". – Дубна, 2004. с. 237.
2. Хейдоров В.П., Чалый Г.Ю., Титорович О.В. Кинетика окисления теofilлина гипохлоритом // Известия Нац. акад. наук Беларуси. Серия хим. наук. Физ. Химия №1, 2012. Стр. 67-72.
3. Ершов Ю.А., Мушкамбаров М.М. Кинетика и термодинамика биохимических и физиологических процессов. – М.: Медицина, 1990. 155 стр.
4. Мушкамбаров Н.Н., Ершов Ю.А. Термодинамика и функционально-групповая классификация биохимических процессов. – Львов, 1987. 86 стр.