

ПОСТРОЕНИЕ КИНЕТИЧЕСКИХ КРИВЫХ ОКИСЛЕНИЯ ПЕНТОКСИЛА

Хейдоров В.П., Ершов Ю.А.¹, Титорович О.В.

Витебский государственный медицинский университет, Беларусь, 210009, г.Витебск,
ул.Мира, д.24, корп.3, кв. 22, тел.: 62-33-88, E-mail: heidorov@mail.ru

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

Данное сообщение продолжает исследования окислительного превращения биологически активных веществ [1], а именно пентоксила. Пентоксил (ПТК) – 6-метил-5-оксиметилурацил в организме при метаболизме подвергается окислительному превращению. Анализ полученных кинетических закономерностей и механизма показывает [2], что этот процесс сопровождается расщеплением структуры пиримидинового основания через последовательные стадии. Одним из основных продуктов реакции является мочевины. Мы приняли процесс, как двухстадийную реакцию с образованием промежуточного вещества и конечного продукта по схеме $C1 \rightarrow C2 \rightarrow C3$. Каждая стадия представляет реакцию первого порядка и константами скорости $K1$ и $K2$ при условии $K1 = K2 = K$.

Решая кинетические уравнения изменения концентрации $C1$, $C2$, $C3$ получили математическую модель и уравнения:

$$C1(t) = e^{-kt}; 2(t) = kte^{-kt}; 3(t) = 1 - e^{-kt}(1 + kt).$$

При построении концентрационных кинетических кривых в координатах концентрация – время получили график, где кинетическая кривая $C1(t)$ имеет убывающую функцию, кинетическая кривая промежуточного вещества $C2(t)$ имеет вид с выпуклостью вверх – сначала с возрастающей функцией с перегибом в максимуме, затем с убывающей функцией. Кинетическая кривая конечного продукта $C3(t)$ идет вверх в виде S-образной формы с возрастающей функциональной зависимостью до завершения реакции.

При построении концентрационных кинетических кривых процесса оказалось, что экспериментальные точки хорошо ложатся на теоретические кривые, что указывает на правильность выбранной математической модели. Экспериментально определенные величины в разные моменты времени имеют достаточную сходимость с расчетными данными, что может быть использовано, в подобных случаях, для прогнозирования, наблюдения и контроля за ходом аналогичных реакций.

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., Ершов Ю.А., Зябкина О.А. Кинетика реакции окисления пентоксила гипохлорит-ионами. //Журн. физ.химии. 2006. Т.70, №3, с.432-435.