

ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ МЕХАНИЗМА ОКИСЛЕНИЯ МЕТИЛУРАЦИЛА

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

Витебский государственный медицинский университет, Беларусь, 210009, г.Витебск,
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

Изучение окисления пиримидиновых оснований, производным которых является метилурацил (МУР) представляет важную медикобиологическую задачу [1]. Все больше исследований подтверждают антиоксидантную роль этих соединений, которые могут предотвращать или приостанавливать развитие многих заболеваний. При взаимодействии, например, с гидроксильными радикалами, местом атаки на пиримидиновые основания является ненасыщенная двойная связь ($-C = C -$) в пиримидиновом цикле с образованием диолпроизводного метилурацила [2]. При этом принципиально важно знать не только начальную стадию окисления и конечные продукты, но и все промежуточные стадии.

Используя кинетические результаты [2] и термодинамический подход расчета свободной энергии [3, 4] можно представить наиболее вероятный механизм последовательных реакций окисления МУР по трем маршрутам А, В, С после первой стадии образования диолпроизводного. Преобладающие маршруты определяются термодинамическими характеристиками отдельных стадий. Расчет свободной энергии на каждой стадии показывает, что в ряде стадий имеет место как эндэргонические, так и экзэргонические эффекты. По маршруту А все значения энергетических эффектов шести последовательных стадий являются экзэргоническими в кДж/моль:



По маршрутам В и С есть стадии экзэргонические и эндэргонические. Поэтому наиболее энергетически выгодным является путь А окисления МУР, и менее выгодными являются маршруты В и С, так как они имеют стадии энергетически невыгодные с положительным значением свободной энергии ($\Delta G^{\circ} > 0$).

Энергетический подход может быть использован самостоятельно или дополнять другие способы обоснования механизма сложных, многостадийных, последовательных реакций превращения химических соединений, в том числе лекарственных веществ, *in vitro* и *in vivo*.

Литература

1. Хейдоров В.П., Ершов Ю.А. Математическое моделирование кинетики окислительно-го 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 метилурацила с гипохлоритом натрия. //Журн. физ. химии. 2003. Т.77. №4. с.648-651.
3. Ершов Ю.А., Мушкамбаров М.М. Кинетика и термодинамика биохимических и физиологических процессов. – М.: Медицина, 1990. 155 с.
4. Мушкамбаров Н.Н., Ершов Ю.А. Термодинамика и функционально-групповая классификация биохимических процессов (препринт). – Львов. 1987. М.86.