воноидами цветочных корзинок ястребинки волосистой (*Hieracium pilosella* L.) являются лютеолин и неидентифицированный гликозид.

Выводы. Флавоноидный комплекс цветочных корзинок ястребинки волосистой (*Hieracium pilosella* L.) представлен девятью соединениями, среди которых обнаружено три агликона флавоноидов и шесть гликозидов. Доминирующими соединениями флавоноидного комплекса изучаемого растения являются лютеолин и неидентифицированный гликозид с относительным временем удерживания 0,2.

©ВГМУ

ЭНЕРГИЯ ГИББСА В МЕТАБОЛИЗМЕ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ

А.С. МАКСИМОВ, В.П. ХЕЙДОРОВ

Information on the metabolism and disposition of candidate drugs has become a critical part of all aspects of the drug discovery and development process. Values of ΔG can be used for a substantiation of the way of the reactions of metabolic transformation of drugs in this work. The additive approach is based on the method of mono-carbon fragments used for calculations of values of ΔG

Ключевые слова: метаболизм, аддитивная схема расчета, инкременты, метилурацил, пентоксил, теофиллин

Практически невозможно экспериментально исследовать ни одно химическое соединение на все известные виды активности, поэтому большое значение на сегодняшний день приобретает разработка различных методов, позволяющих осуществить априорную оценку различных свойств, видов активности веществ и возможностям прогнозирования ADMET/Tox-свойств соединений, еще до осуществления их синтеза [1].

Целью работы являлось изучение и обоснование применения термодинамического подхода на основе метода одноуглеродных фрагментов (ОУФ) для изучения возможных метаболических превращений лекарственных веществ, на примере реакций окисления протекающих с биологически активными веществами, являющимися производными пиримидин-2,4-диона и ксантина.

Система ОУФ, описанная в литературе [2], была адаптирована к расчетам для лекарственных веществ: был проведен расчет вкладов (инкрементов) ОУФ в значения ΔG для молекул лекарственных веществ и введены соответствующие поправки, учитывающие строение молекул и химическое окружение соответствующих ОУФ. На основании расчетов показано, что для метилурацила и пентоксила наиболее вероятным является путь окислительного превращения все стадии, которого являются экзергоническими, для теофиллина маршрут на котором будет минимальное число эндэргонических стадий, и они будут иметь минимальное численное значение ΔG [3]. Полученные результаты согласуются с литературными данными, результатами эксперимента и квантово – химических расчетов.

Таким образом, энергетический подход может быть использован самостоятельно или дополнять другие способы обоснования химизма реакций превращения биологически активных веществ *in vitro* и *in vivo* [4].

Литература

1. Филимонов, Д.А. Прогноз спектра биологической активности органических соединений / Д.А. Филимонов, В.В. Поройков // Рос. хим. журнал. – 2006. – Т. L, № 2. – С. 66-75.
2. Мушкамбаров, Н.Н. Метаболизм: структурно-химический и термодинамический анализ: в 3 т. / Н.Н. Мушкамбаров. – М.: Химия, 1988. – Т. 1. – 336 с.
3. Максимов, А.С. Термодинамический подход к прогнозированию механизма окислительного превращения лекарственных веществ в эксперименте и метаболизме [Электронный ресурс]. – Материалы Международного молодежного научного форума “Ломоносов–2012”. – Москва, МГУ имени М.В. Ломоносова, 2012. – 1 электрон. опт. диск (CD-ROM).
4. Максимов, А.С. Применение метода одноуглеродных фрагментов для расчета энергии Гиббса превращения биологически активных веществ / А.С. Максимов // Сб.: Менделеев–2012. Физическая химия. – Санкт – Петербург, 2012. – С. 389–390.

©БГМУ

МОРФОЛОГИЯ СОСУДИСТОГО КОМПОНЕНТА МИКСОМ СЕРДЦА

А.С. МЕДВЕДЕВА, О.А. ЮДИНА

Cardiac myxomas are the most well-known cardiac tumours to date, yet the morphology of their vascular component has not been widely depicted in literature. Through our study we aim to fully characterize the features of vascular changes associated with cardiac myxomas and to determine their frequency and differential diagnostic implications, as well as compare the peculiarities of vascular changes in cardiac myxomas with those in Merkel Cell Carcinoma (MCC). MCC was chosen for its prominent vascular changes, which have not been very well studied until recently. The following 3 types are the most characteristic of cardiac myxomas: pericyte hyperplasia, pyogenic granuloma-like pattern and peliosis-like pattern. In terms of prominent vascular changes, cardiac myxomas can be considered similar to Merkel Cell Carcinoma. The use of the classification of such a phenomenon in MCC can improve and simplify the diagnosis of myxomas

Ключевые слова: опухоли сердца, миксомы, сосудистый компонент, опухоль Меркеля