



КВАНТОВО ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ И КОЛЕБАТЕЛЬНОГО СПЕКТРА МЕРКОЗОЛИЛА, ПРИМЕНЯЕМЫЙ ПРИ ЖДА

А.Б.Йулчиев

доцент кафедры химии Андижанского государственного университета, DSc т.н.

Ф.Ю.Султонова

магистрант кафедры химии Андижанского государственного университета

<https://doi.org/10.5281/zenodo.7866781>

ARTICLE INFO

Qabul qilindi: 20-april 2023 yil

Ma'qullandi: 23-april 2023 yil

Nashr qilindi: 26-april 2023 yil

KEY WORDS

щитовидная железа, зоб,
меркозолил, квантовые
химические вычисления,
оптимизация структуры,
ИК-спектр, биозащита,
безопасность.

ABSTRACT

В этой работе рассматривается квантово-химический расчет структуры меркозолила и ИК-спектра, которые используются для лечения и профилактики зоба, не имеют побочных эффектов, обладают высокой биосовместимостью и безопасностью.

Сегодня дефицит йода является большой проблемой во всем мире. Из-за болезни 43 миллиона человек во всем мире, человек страдают умственной и физической слабостью, 11 миллионов страдают креатинизмом. 760 миллионов человек страдают подагрой.[1]

Эндокринная система, в которую входят железы внутренней секреции, вместе с нервной системой контролирует и координирует функции всех других органов и систем, обеспечивая целостность организма. Железы – это орган, вырабатывающий особые физиологически активные вещества, необходимые для жизнедеятельности организма.

Щитовидная железа занимает одно из важнейших мест среди секреторных желез. Располагается на передней поверхности шеи, над щитовидной железой. Щитовидная железа вырабатывает гормон тироксин. Тироксин содержит йод, который поступает в щитовидную железу извне (с током крови) с пищей и питьевой водой.[2]

Щитовидная железа является одним из основных элементов системы желез внутренней секреции. Эта железа играет важную роль в общем гормональном балансе организма. Щитовидная железа содержит 10 мг йода, что составляет около трети всего йода в организме. У человека щитовидная железа представляет собой красную плоскую структуру, состоящую из двух долей, массой 25-30 г, расположенных по обеим сторонам гортани. В процессе обмена йода в организме щитовидная железа выполняет несколько функций. Он очень интенсивно концентрирует циркулирующий в крови йод, превращает его в физиологически активные специфические гормоны, служит

резервуаром тиреоидных (щитовидных) гормонов и сохраняет их в виде особого белка тиреоглобулина, депонирует в своих фолликулах и обеспечивает их выброс в кровь под контролем гипофиза [3].

Зоб – это увеличение щитовидной железы в виде опухоли. Заболевание часто сопровождается нарушением функции этой железы и общего состояния организма. Различают несколько форм зоба. Один из них диффузный токсический зоб (синонимы: болезнь Грейвса, Базедова болезнь, гипертиреоз, болезнь Перри, болезнь Флаяни) — аутоиммунное заболевание, обусловленное избыточной секрецией тиреоидных гормонов диффузной тканью щитовидной железы, которая приводит к отравлению этими гормонами — тиреотоксикозу. Чаще наблюдается у женщин.

Эксперты в этой области рекомендовали несколько средств для предотвращения дефицита йода. Включая: Мерказолил.

Состав: 1-метил-2-меркаптоимидазол.

Синонимы: methimazole, thymidazol.

Тиамазол хорошо всасывается после приема внутрь, прием пищи не влияет на количество и скорость абсорбции. Максимальная концентрация в крови достигается в течение 30-60 мин и составляет 1,184 мкг/мл при пероральном введении дозы 60 мг. Биодоступность -93 %.

Распределение. С белками крови практически не связывается. Накапливается в ткани щитовидной железы. Небольшие количества обнаруживаются в грудном молоке. Объем распределения 0,6 л/кг.

Метаболизм. Метаболизм осуществляется в печени с образованием неактивных метаболитов.

Выведение. Период полувыведения составляет 5-6 ч. Выводится из организма почками, причем менее 10% - в неизменном виде. У пациентов с печеночной недостаточностью период полувыведения увеличивается.

Антитиреоидный препарат; нарушает синтез гормонов щитовидной железы, ингибируя йодидпероксидазу, участвующую в йодировании тиронина в щитовидной железе с образованием трийод- и тетраiodтиронина (тироксина), снижает внутреннюю секрецию тироксина. Это свойство позволяет проводить симптоматическую терапию тиреотоксикоза вне зависимости от этиологии. Мерказолил не влияет на процесс высвобождения синтезированных тиронинов из фолликулов щитовидной железы. Этим объясняется латентный период различной продолжительности, который может предшествовать нормализации концентрации трийодтиронина (Т3) и тироксина (Т4) в плазме крови, т.е. улучшению клинической картины. Мерказолил не влияет на тиреотоксикоз, развившийся вследствие высвобождения гормонов после разрушения клеток щитовидной железы (после лечения радиоактивным йодом или при тиреоидите).

Мерказолил снижает основной обмен, ускоряет выведение из щитовидной железы йодидов, повышает реципрокную активацию синтеза и выделения гипофизом тиреотропного гормона, что сопровождается некоторой гиперплазией щитовидной железы.

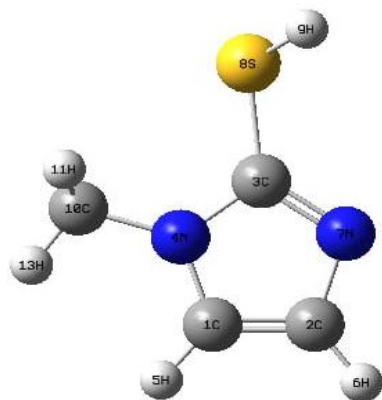


Рисунок 1. Строение молекулы мерказолила на программе

Для более глубокого изучения вышеуказанных преимуществ и свойств этого средства нами осуществлен квантово химический расчет структуры и ИК спектра мерказолила. Расчеты были выполнены с применением пакета программ «Gaussian 09W» по методу DFT/B3LYP (Becke, Lee, Yang, Parr) с базисами 3-21G

Расчеты колебательного спектра также вычисляли на пакете программ «Gaussian 09W» по методу Frequency DFT/B3LYP (Becke, Lee, Yang, Parr) с базисами 3-21G. Отличительной чертой этой программы от экспериментально вычисленного спектра в том, что в ней можно определить даже вид колебания валентный или деформационный. Некоторые параметры результатов ИК-спектра даны в таб.1.

Расстояние и угол между атомами молекулы мерказолила

R1	1C-2C	1.4018	A17	4N-10C-13H	109.4712
R2	1C-4C	1.3918	A18	11H-10C-12H	109.4713
R3	1C-5H	1.0893	A19	11H-10C-13H	109.4712
R4	2C-6H	1.0848	A20	12H-10C-13H	109.4712
R5	2C-7N	1.4349	D1	4N-1C-2C-6H	179.9987
R6	3C-4N	1.3918	D2	4N-1C-2C-7N	0.0004
R7	3C-7N	1.4018	D3	5H-1C-2C-6H	0.0051
R8	3C-8S	1.78	D4	5H-1C-2C-7N	-179.9933
R9	4N-10C	1.47	D5	2C-1C-4N-3C	0.0039
R10	8S-9H	1.31	D6	2C-1C-4N-10C	179.9846
R11	10C-11H	1.07	D7	5H-1C-4N-3C	179.9982
R12	10C-12H	1.07	D8	5H-1C-4N-10C	-0.0211
R13	10C-13H	1.07	D9	1C-2C-7N-3C	-0.0044
A1	2C-1C-4N	108.4177	D10	6H-2C-7N-3C	179.9972
A2	2C-1C-5H	130.0976	D11	7N-3C-4N-1C	-0.0067
A3	4N-1C-5H	121.4847	D12	7N-3C-4N-10C	-179.9874
A4	1C-2C-6H	126.4408	D13	8S-3C-4N-1C	179.9924
A5	1C-2C-7N	107.1873	D14	8S-3C-4N-10C	0.0117
A6	6H-2C-7N	126.372	D15	4N-3C-7N-2C	0.0069

A7	4N-3C-7N	108.4137	D16	8S-3C-7N-2C	-179.9922
A8	4N-3C-8S	121.4742	D17	4N-3C-8S-9H	133.4175
A9	7N-3C-8S	130.1121	D18	7N-3C-8S-9H	-46.5837
A10	1C-4N-3C	108.7956	D19	1C-4N-10C-11H	119.7131
A11	1C-4N-10C	125.5966	D20	1C-4N-10C-12H	-120.2869
A12	3C-4N-10C	125.6078	D21	1C-4N-10C-13H	-0.2869
A13	2C-7N-3C	107.1858	D22	3C-4N-10C-11H	-60.3093
A14	3C-8S-9H	109.5	D23	3C-4N-10C-12H	59.6907
A15	4N-10C-11H	109.4712	D24	3C-4N-10C-13H	179.6907
A16	4N-10C-12H	109.4712			

R_n - длина связи между атомами в нм, A_n - валентный угол между атомами в градусах, D_n - торсионный угол между атомами в градусах.

Список использованной литературы:

1. Газета "Маърифат". Йододефицитная болезнь. 9 декабря 2009 г.
2. Газета "Соглом авлод". Профилактика ЯТ. 2002 №44 (300)
3. Журнал "Мактаб ва хаёт". Психические особенности заболевания щитовидной железы. 2010 №3 (71) стр. 16 – 17
4. <https://barrett-group.mcgill.ca/tutorials/Gaussian%20tutorial.pdf>