

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ И АНАЛИЗ СТРУКТУР КОНФОРМЕРОВ С ЦЕЛЬЮ ИССЛЕДОВАНИЯ КОНФОРМАЦИОННОГО ПОЛИМОРФИЗМА ЯНТАРНОЙ КИСЛОТЫ

Захаров А.А, Пластун И.Л.

Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А., г.
Саратов, ул. Политехническая 77, 410054

Янтарная кислота имеет много применений в фармацевтической промышленности – например, она является исходным материалом для активных фармацевтических ингредиентов (API), в качестве добавки в составе, моноэтиловый эфир янтарной кислоты использовали в качестве инсулинотропного агента и соединение также используется в качестве сшивающего агента в полимерах, контролирующающих лекарственное средство. В медицине янтарная кислота часто входит в состав некоторых лекарственных средств.

В ходе вычислений были рассчитаны структуры и ИК спектры различных вариантов янтарной кислоты. За счёт анализа разностей энергий конформеров были найдены оптимальные варианты структур янтарной кислоты, как для единичной молекулы, так и для димера янтарной кислоты.

Все процедуры молекулярного моделирования были проведены с использованием программного комплекса Gaussian 09. Для расчетов использовался функционал B3LYP и базисный набор 6-31G.

В ходе исследования были рассмотрены различные варианты структур янтарной кислоты, в результате чего за счёт анализа разности энергий были найдены варианты конформеров, как для одной молекулы, так и для димера янтарной кислоты. Из всех рассмотренных вариантов конформеров единичной молекулы янтарной кислоты оптимальными оказались 3 варианта. Для димера янтарной кислоты - 4 варианта конформеров. Полученные результаты могут быть использованы при создании полиморфных модификаций янтарной кислоты.

Список литературы:

1. Zhou Y., Wang J., Xiao Y., Wang T., Huang, X. The effects of polymorphism on physicochemical properties and pharmacodynamics of solid drugs // *Current Pharmaceutical Design*. 2018. V.24(21). P. 2375-2382.
2. Gentili D., Gazzano M., Melucci M., Jones D., Cavallini M. Polymorphism as an additional functionality of materials for technological applications at surfaces and interfaces // *Chemical Society Reviews*. 2019. V.48(9). P. 2502-2517.