

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ МОДИФИЦИРОВАННОГО ГЛИЦИНА В ВОДЕ

Жулидин П.А.¹, Филин П.Д.¹, Пластун И.Л.¹, Яковлев Р.Ю.²

¹Саратовский государственный технический университет имени Гагарина Ю.А.,
Россия, 410054, Саратов, ул. Политехническая 77, +79626270045, zhulidin@mail.ru

²ООО «СМАРТ ПОЛИМОРФ ТЕХНОЛОДЖИЗ», Россия, 121205, Москва, б-р Большой
42, +79060972727, yarules@yandex.ru

Исследовано влияние водного окружения на энергетические характеристики модифицированной формы глицина. Методом теории функционала плотности были рассчитаны следующие структуры: молекула глицина, димер глицина, 4 молекулы глицина и их комплексы с водой. Проведено сравнение рассчитанных ИК спектров с экспериментальными данными.

Разработка полиморфных модификаций – это один из способов повышения фармакологического эффекта препаратов. С помощью технологии криохимической перекристаллизации органических веществ, разработанной ООО «СМАРТ ПОЛИМОРФ ТЕХНОЛОДЖИЗ», была получена модифицированная форма глицина.

Исследования морфологии глицина выполнялись на электронном микроскопе TESCAN MIRA3. Спектры инфракрасного излучения регистрировались на ИК спектрометре Spectrum Two в диапазоне 4000-600 см⁻¹. Молекулярное моделирование и расчет спектров молекул и их комплексов проводились на основе метода теории функционала плотности [1], используя функционал B3LYP [1,2] и базисный набор 6-31G(d).

Было обнаружено, что при добавлении 4 молекул воды к димеру глицина наблюдается смещение характерных пиков высокочастотной области спектра, соответствующих валентным колебаниям связи О-Н гидроксильной группы глицина, что указывает на образование водородных связей. Анализ результатов взаимодействия глицина с молекулами воды указывает, что во время получения полиморфных модификаций, после этапа лиофильной сушки, в модифицированном глицине присутствуют молекулы воды. В свою очередь, наличие взаимодействия глицина с молекулами воды способствует более сильному водородному связыванию, что приводит к изменению физико-химических свойств глицина.

Литература

1. Кон В. Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности // Успехи физических наук. 2002. Т.172, No 3. С. 336–348.
2. Попл Дж. А. Квантово-химические модели // Успехи физических наук. 2002. Т. 172, No 3. С. 349–356.