

ВЛИЯНИЕ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ НА ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МОДИФИЦИРОВАННОГО ГЛИЦИНА

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 «Научный центр РТА», Россия, 117292, г. Москва, пр-кт 60-Летия Октября, д. 27, к. 2, кв. 40, +79060972727, yarules@yandex.ru

Исследовано влияние межмолекулярного комплексообразования модифицированного глицина на его энергетические характеристики. В области 600-4000 см⁻¹ были экспериментально измерены ИК спектры глицина в цвиттерионной форме и глицина, модифицированного при помощи процедуры криохимической перекристаллизации. Методом теории функционала плотности были рассчитаны структуры и ИК спектры комплекса из 8 молекул глицина. 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 «Научный центр РТА», была получена модифицированная форма глицина.

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] и базисный набор 6-31G(d).

Исходя из статьи [2], глицин обычно существует в виде полимерных цепочек. В качестве примера межмолекулярного комплексообразования из восьми молекул глицина были рассмотрены два варианта: «Сетка», «Кольцо».

Как показал анализ водородных связей, наиболее сильные водородные связи образуются между молекулами глицина в варианте «Сетка», чем между аналогичными молекулами в варианте «Кольцо». Парное сравнение ИК спектров рассчитанных вариантов «Кольцо» и «Сетка» с экспериментальными ИК-спектрами показало, что наилучшее согласие представлено в варианте «Сетка». Из чего можно предположить, что данный вариант комплексообразования является более оптимальным. Также необходимо отметить, что спектральный пик в области 3400-3500 см⁻¹ является пиком, характерным для ИК спектра молекул воды.

Таким образом, исходя из сравнения экспериментальных и рассчитанных ИК спектров, можно сказать, что модифицированный глицин содержит в своем составе связанные молекулы глицина, а также единичные молекулы воды.

Литература

1. Кон В. Электронная структура вещества – волновые функции и функционалы плотности // Успехи физических наук. 2002. Т.172, No 3. С. 336–348
2. Boldyreva E., Ivashevskaya S., Sowa H., Ahsbahs H., Weber, H.-P. Effect of hydrostatic pressure on the γ -polymorph of glycine 1. A polymorphic transition into a new δ -form. // Z. Kristallogr. 2005. V.220. P. 50-57