

Кускина Наталья Михайловна

магистрант

ФГБОУ ВО «Астраханский государственный университет»
г. Астрахань, Астраханская область

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ И СПЕКТРОВ БАД «ГЛИЦИН-ФОРТЕ»

Аннотация: в работе представлены результаты модельных расчетов колебательных состояний глицина. Геометрические параметры и частоты колебаний определены с помощью метода функционала плотности DFT/b3LYP. На основании полученных результатов предложена структурно-динамическая модель исследуемой БАД. Выявлена возможность использования информационной технологии «Gaussian» в предсказательных расчетах структуры и спектров исследуемого соединения.

Ключевые слова: БАД, глицин, колебательные спектры, ИК-спектр, КР-спектр, полосы поглощения, сравнительный анализ.

В развитых странах мира БАДы ежедневно принимают более 80% населения. По результатам исследований, лишь 10–15% людей решили свои проблемы со здоровьем с помощью добавок, а на многих эти препараты оказали весьма негативное влияние [1]. Одним из отрицательных последствий приема БАД является то, что многие компоненты, входящие в состав добавок, могут оказывать побочные действия. Например, Гинкго-билиба может существенно снижать свертываемость крови, что весьма опасно для беременных и тех, кому в ближайшем времени предстоит операция; хром, входящий в состав добавок для похудения, при применении препаратов в больших дозах вызывает поражение почек [2].

Все это в той же степени относится и к весьма распространённой во многих странах БАД «Глицин-форте». Данные о структуре, спектрах молекулы и ее модификациях отсутствуют, в связи с чем оценить на эффективность применения этой БАД без дополнительного изучения невозможно, чем и обусловлена актуальность заявленной в заголовке проблемы.

Для реализации поставленной цели необходимо решить ряд задач:

- исследование колебательных спектров БАД «Глицин-форте»;
- построение структурно-динамической модели данной молекулы с использованием неэмпирических квантово-механических методов с целью ее идентификации по колебательным спектрам;
- определение качественного содержания глицина;

В ходе выполнения планируемых задач были получены ИК (рис. 1, рис. 2) и КР (рис. 3) спектры БАД «Глицин-форте» компании «Эвалар».

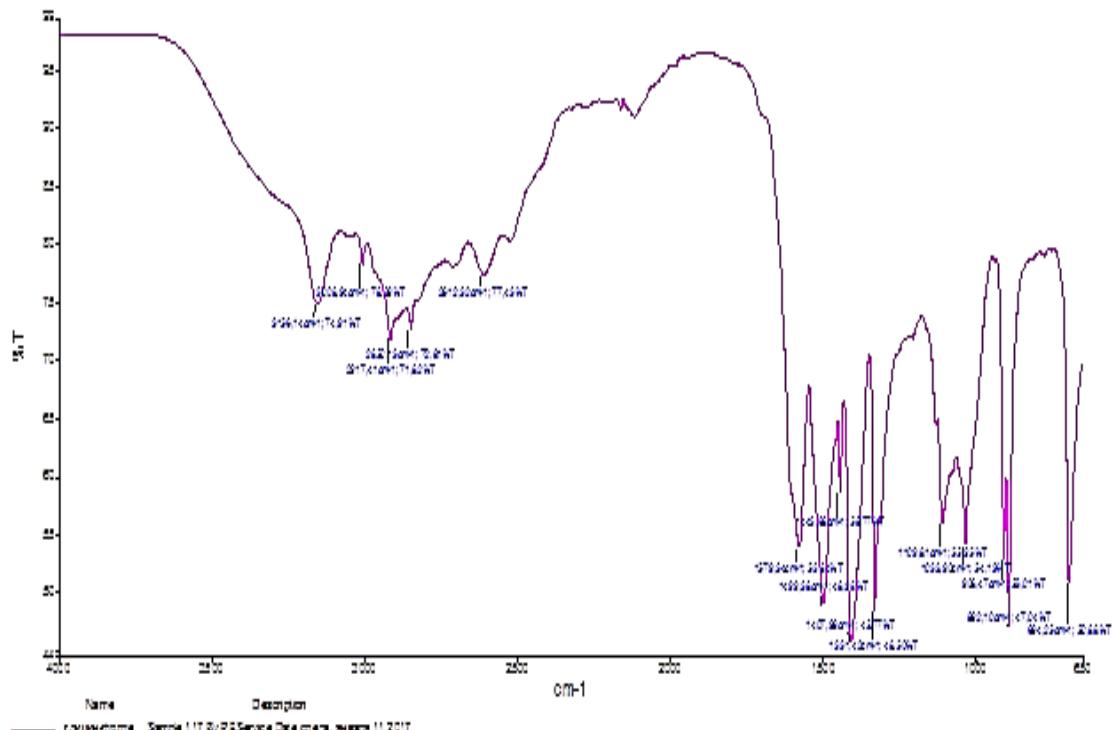


Рис. 1. ИК-спектр «Глицин-форте», полученный на оборудовании ИК-Фурье спектрометр «Frontier»

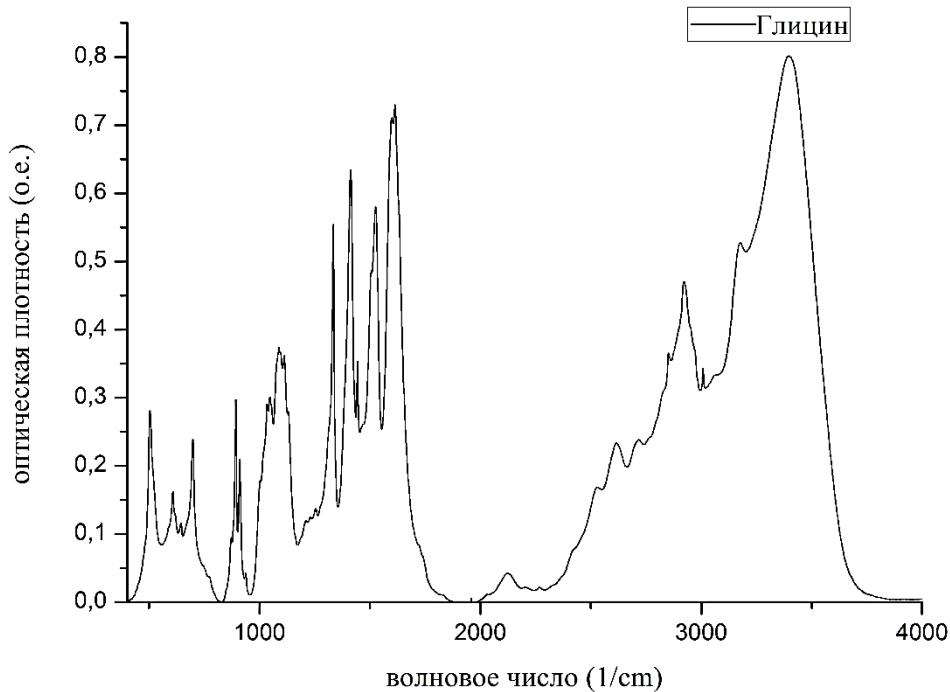


Рис. 2. ИК-спектр «Глицин -форте», полученный с помощью оборудования на основе интерферометра Майкельсона «Vertex80v»

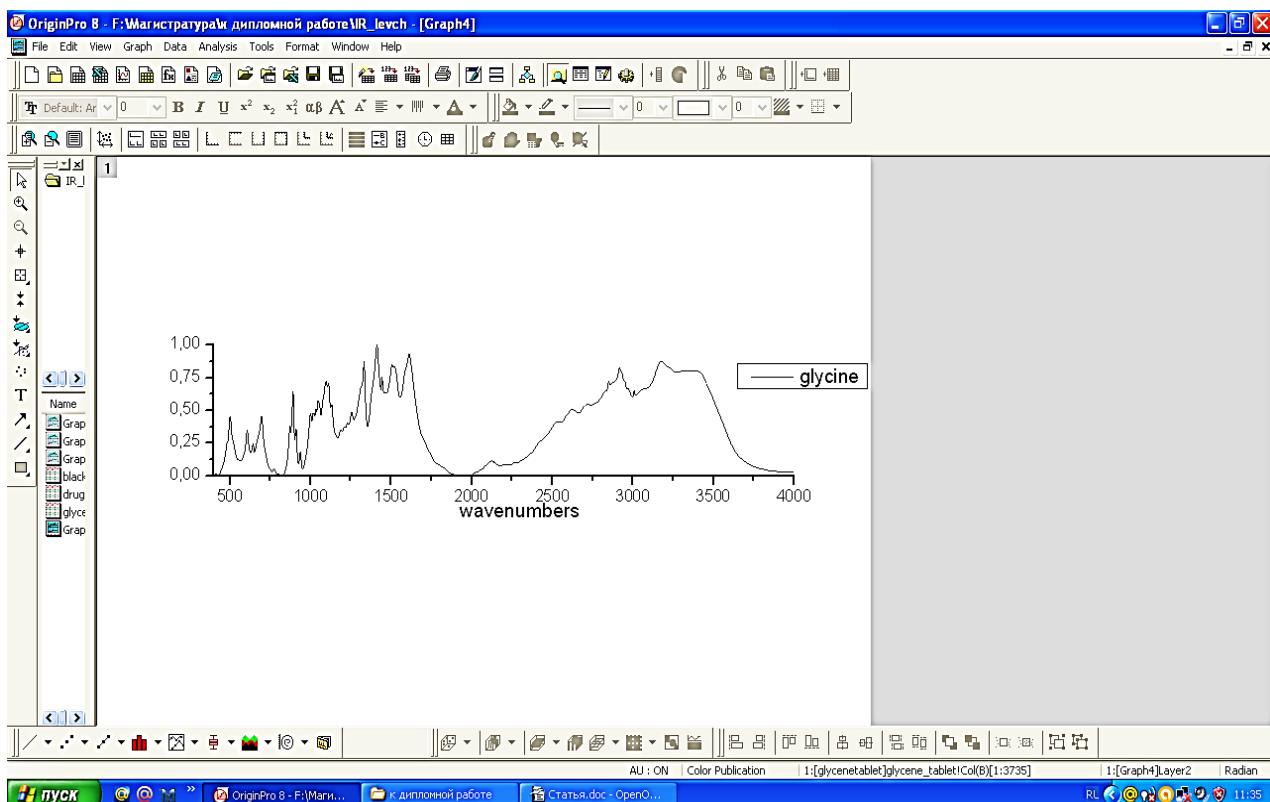


Рис. 3. КР-спектр «Глицин-форте», построенный в программе Origin по данным результатов, снятых в СГУ им. Н.Г. Чернышевского г. Саратов

Для эксперимента использовалось следующее оборудование: ИК-Фурье спектрометр Frontier фирмы «PerkinElmer» ИТЦ «Рациональное использование природных ресурсов» в Астраханском государственном университете; ИК-спектрометр на основе интерферометра Майкельсона – «Vertex80v» Лаборатории оптической прочности и диагностики кристаллов ИФТТ РАН, г. Черноголовка (рис. 4); КР-спектры регистрировали с использованием конфокального микроскопа, совмещенного с лазерным КР-спектрометром (Solar) в Саратовском государственном университете им. Н.Г Чернышевского.



Рис. 4. ИК-спектрометр «Vertex80v», г. Черноголовка

Для получения образцов была использованы следующие методики: метод прессования таблеток:

1. Малое количество вещества растиралось в ступке в тонкий порошок, тщательно смешивалось с некоторым количеством KBr [3].
2. Полученная смесь, помещалась в пресс-форму. Данную пресс-форму помещали под пресс и получали прозрачную или полупрозрачную таблетку.

3. Полученные таблетки крепились на держатель, который устанавливался вертикально. Спектр пропускания измерялся в отсеке прибора. Измерения проводились в вакууме. Сначала измерялся однолучевой спектр пустого канала, а затем спектр образца. Результирующий спектр получался путем деления одного спектра на другой.

Полосы поглощения, обусловленные колебаниями связей, настолько интенсивны, что находятся в «зашкале» и, чтобы определить спектральное положение их максимумов, необходимо было уменьшить концентрацию образца. Для этого $\frac{1}{4}$ уже спрессованной таблетки образца смешивали с KBr, уменьшив концентрацию образцов мы получили линии поглощения, что дало нам спектр пропускания образцов (рис. 2).

На заключительном этапе была предложена модель молекулы глицина, построенная с помощью программы GaussView и произведен расчет фундаментальных частот (рис. 5)

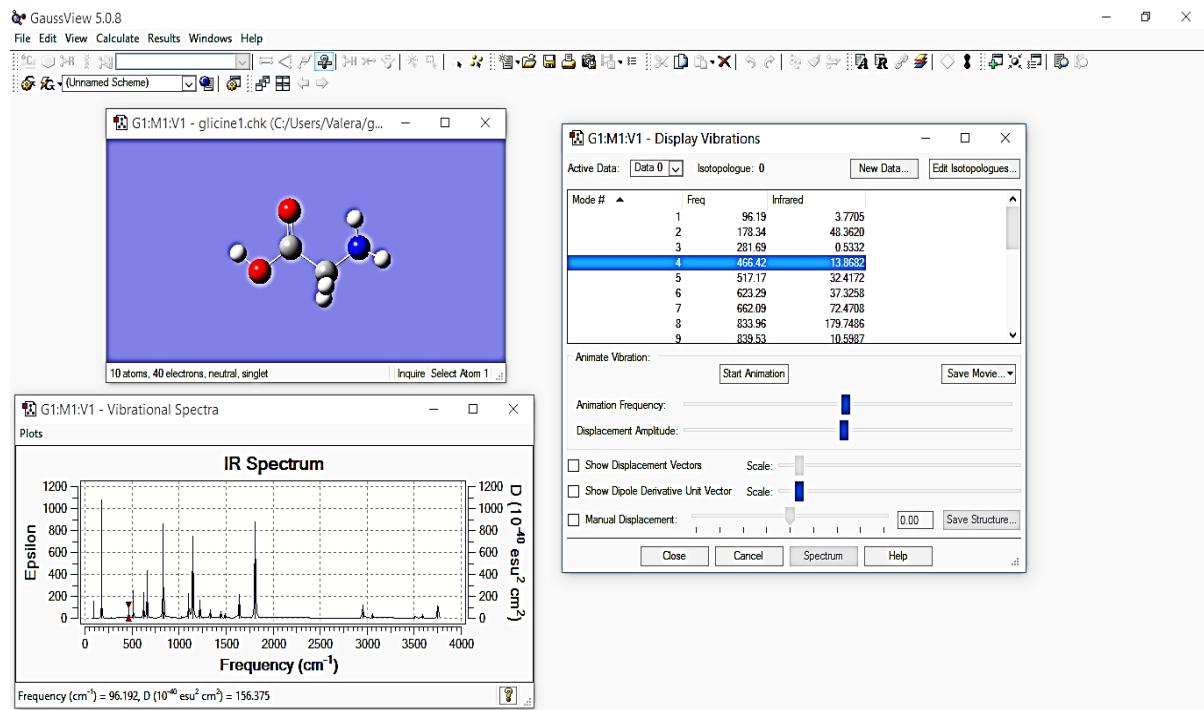


Рис. 5. Модель молекулы глицина

Сравнительный анализ экспериментальных и теоретических расчетов фундаментальных частот показал их хорошие совпадение. Что является основой для давнейшего изучения БАД и позволит получить более точные количественные

результаты, а также внесет вклад в углубление наше физико-химических представлений об электронной структуре вещества.

Список литературы

1. Биологически активные добавки (БАД). Польза или вред [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://www.zdorovih.net/modules.php?name=Articles&pa=showarticle&articles_id=4174
2. Технология, исследование и стандартизация таблеток на основе гидрофобной фракции прополиса. Открытый российский конкурс на лучшую научную работу студентов 2002 года по разделу «Медицинские науки» (2002; Москва): Тез. работ участников. – М., 2002. – С. 126–127.
3. Методы спектрального анализа: Учебное пособие / Е.А. Кириллова, В.С. Маряхина; Оренбургский гос. ун-т. – Оренбург: ОГУ, 2013. – 105 с.