

«ПОЛИМОРФИЗМ КРИСТАЛЛОВ ИЗАТИНА»



**НИУ
БелГУ**
BELGOROD STATE
UNIVERSITY (BelSU)

**Фролова Екатерина Дмитриевна
Смагина Анна Романовна**



Инжиниринговая школа НИУ БелГУ
Направление хим-фарм инжиниринга
Папонов Борис Владимирович

ЦЕЛИ И ЗАДАЧИ ПРОЕКТА

Цель проекта:

- Изучение изменения формы кристаллов индолин-2,3-диона (изатина) при использовании растворителей разной полярности.

Задачи проекта:

- Осуществить кристаллизацию индолин-2,3-диона (изатина) из растворителей различной полярности.
- Провести корреляцию между формой кристаллов и свойствами растворителей, применяющихся для кристаллизации.

АКТУАЛЬНОСТЬ ПРОЕКТА

- Известно, что одни и те же вещества могут существовать в разных кристаллических формах и обладать, в зависимости от этого разными физическими и химическими свойствами
- Карбонат кальция (CaCO_3)



Кальцит



Арагонит



Мрамор



Травертин

АЛЛОТРОПИЯ

Аллотропные модификации серы

Аллотропные видоизменения серы

Ромбическая сера,
лимонно-желтого
цвета,
тпл. = 112,8°C,
S8



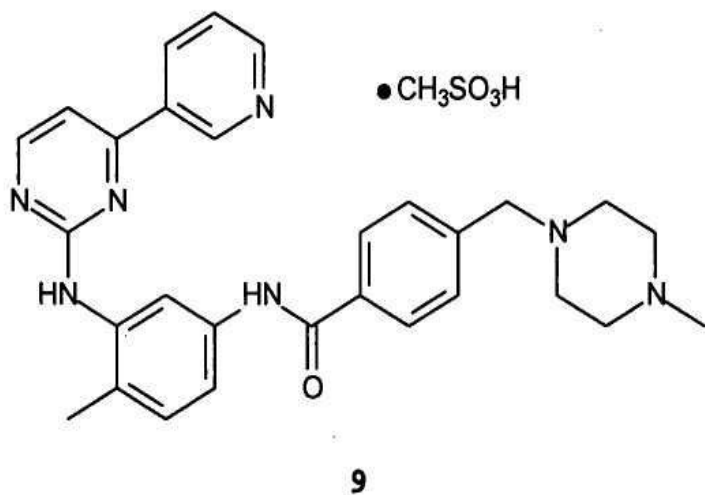
Моноклинная сера,
игольчатые
кристаллы желтого
цвета,
тпл. = 119,3°C, **S6**



Пластическая сера,
темно –
коричневого цвета,
тпл. = 160°C,
S2



ПОЛИМОРФИЗМ КРИСТАЛЛОВ В ФАРМАКОЛОГИИ



Иматиниб мезилат



Активная форма



Неактивная форма

ПОЛИМОРФИЗМ

Полиморфизм кристаллов — способность вещества существовать в различных , называемых полиморфными модификациями

Причины возникновения полиморфизма

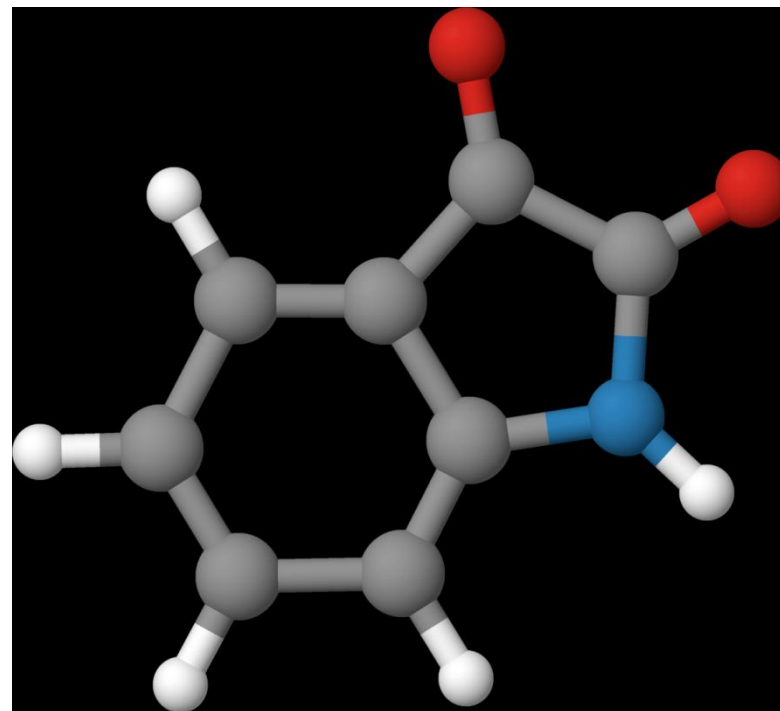
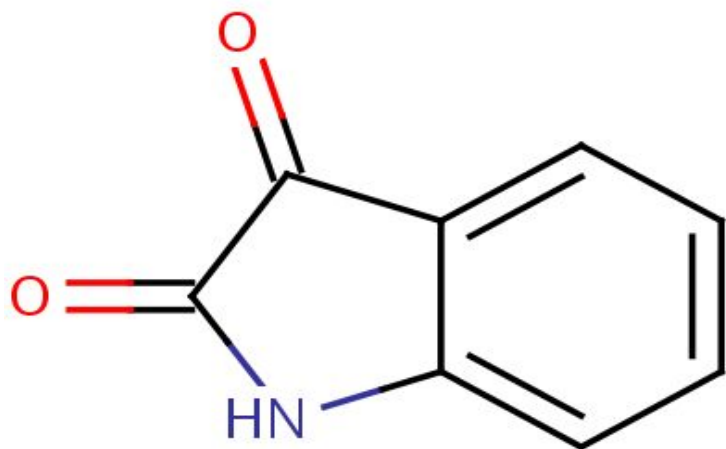
Полиморфизм объясняется тем, что одни и те же атомы вещества могут образовывать различные устойчивые кристаллические решётки, соответствующие минимумам на поверхности . Стабильной модификации отвечает глобальный минимум, метастабильным — локальные минимумы. При повышении температуры более прочная кристаллическая решётка низкотемпературной модификации может характеризоваться меньшей энтропией за счёт того, что она менее восприимчива к возбуждению тепловых колебаний, поэтому другая модификация, характеризующаяся более крутой зависимостью энергии Гиббса от температуры, становится более выгодной.

ЧАСТО ФОРМА КРИСТАЛЛОВ ОБУСЛОВЛЕНА СВОЙСТВАМИ РАСТВОРИТЕЛЕЙ, ИЗ КОТОРЫХ ОНИ БЫЛИ ВЫДЕЛЕНЫ

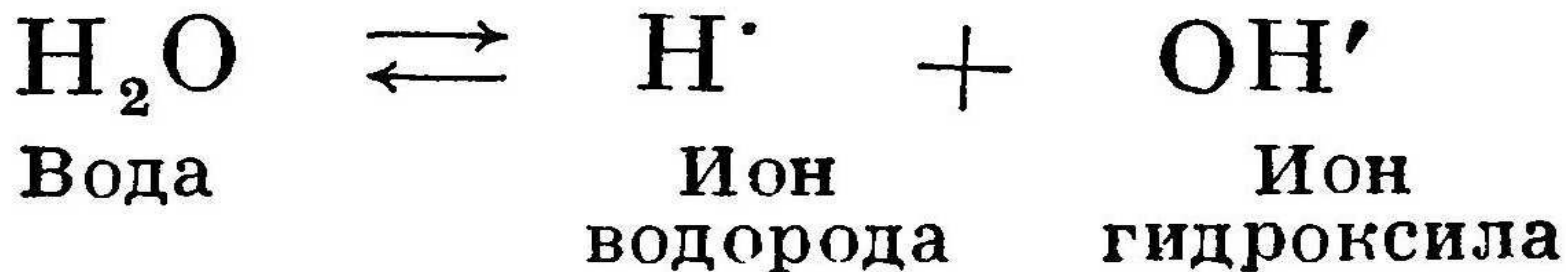
Важнейшие свойства растворителей:

- Полярность растворителей.
Определяется дипольным моментом и диэлектрической проницаемостью.
- Способность растворителя диссоциировать с образованием протона.

ИЗАТИН — ПОЛЯРНАЯ МОЛЕКУЛА

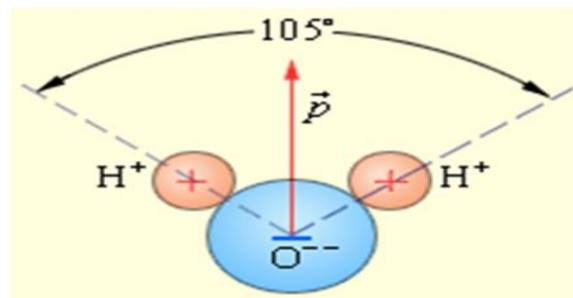


ВОДА



- Вода - полярный, протонный растворитель
- Дипольный момент воды — 1,8 D

Дипольный момент молекулы
ВОДЫ



ИЗОПРОПИЛОВЫЙ СПИРТ

- Изопропанол — полярный, протонный растворитель
- Дипольный момент изопропанола — 1,66 Д



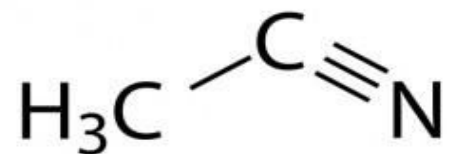
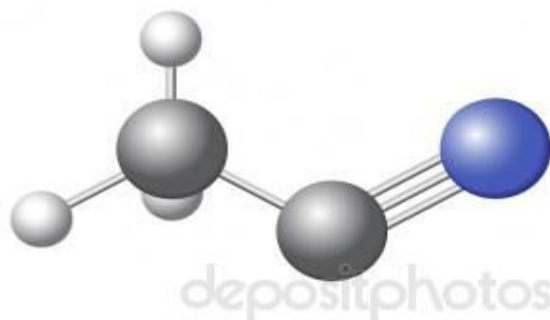
Isopropyl alcohol
(CH₃)₂CHOH

АЦЕТОНИТРИЛ

- Ацетонитрил — полярный, апротонный растворитель
- Дипольны

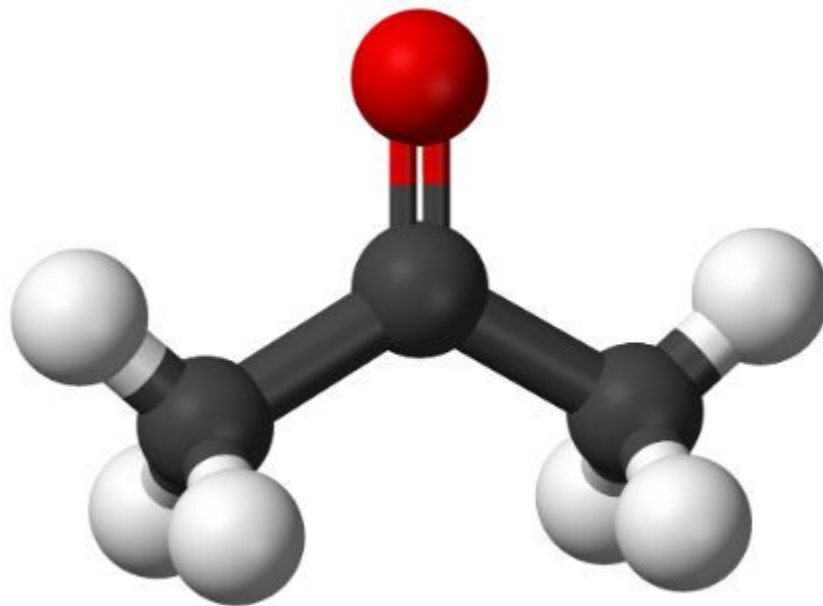
Acetonitrile

3,93 Д



АЦЕТОН

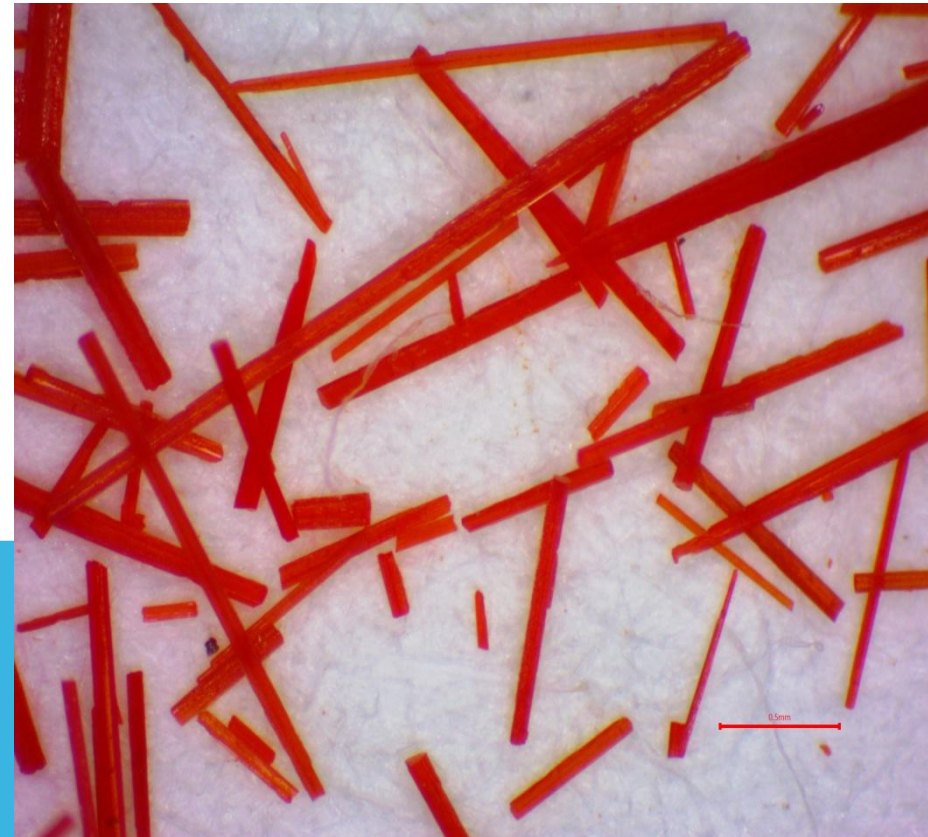
- Ацетон — полярный, апротонный растворитель
- Дипольный момент ацетона — 2,70 Д



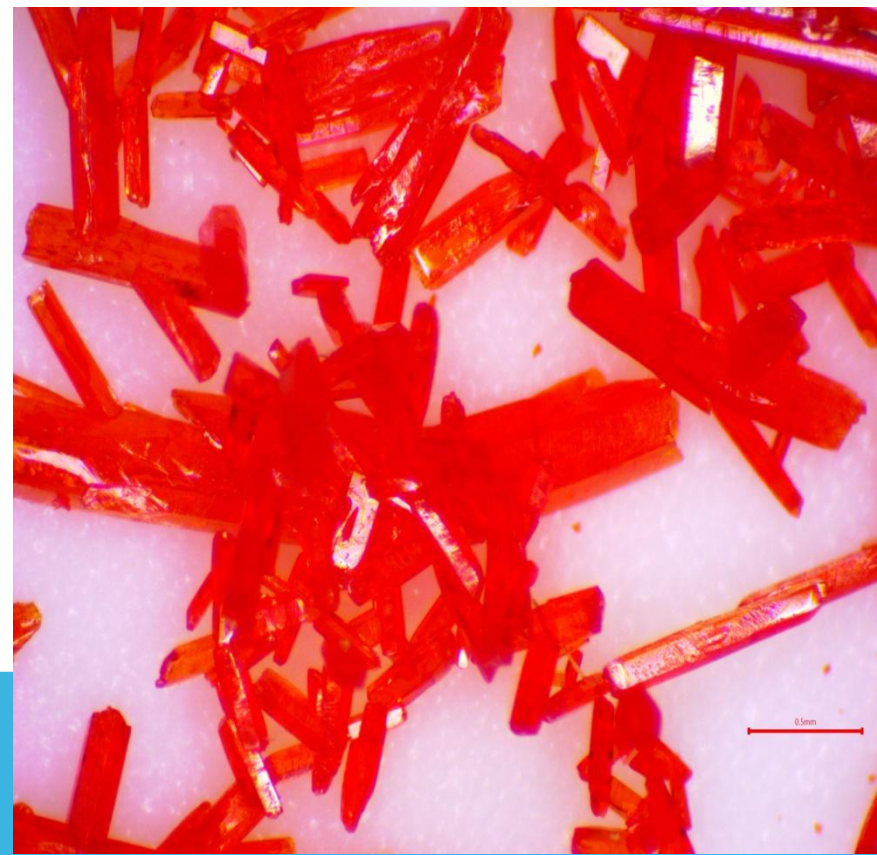
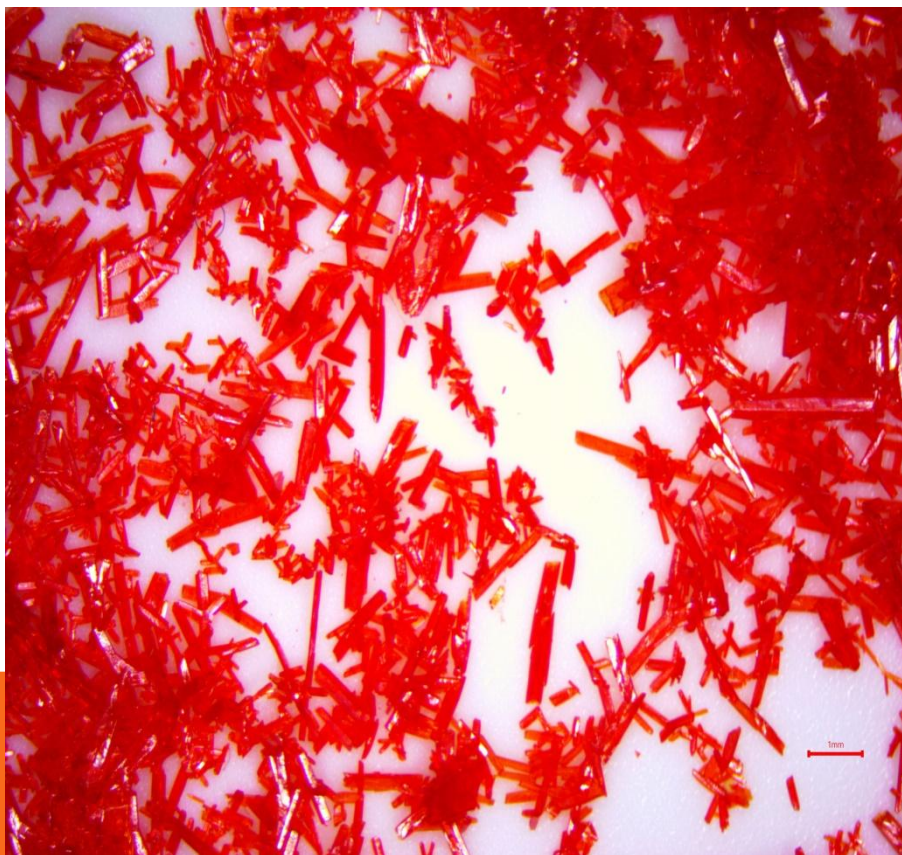
ацетон

ВЕЩЕСТВО ЛУЧШЕ РАСТВОРЯЕТСЯ В ЖИДКОСТИ, ЕСЛИ ОНО ОБЛАДАЕТ ТОЙ ЖЕ ПОЛЯРНОСТЬЮ И СХОДНЫМИ ПРОЧИМИ ХАРАКТЕРИСТИКАМИ.

- Кристаллы изатина из воды



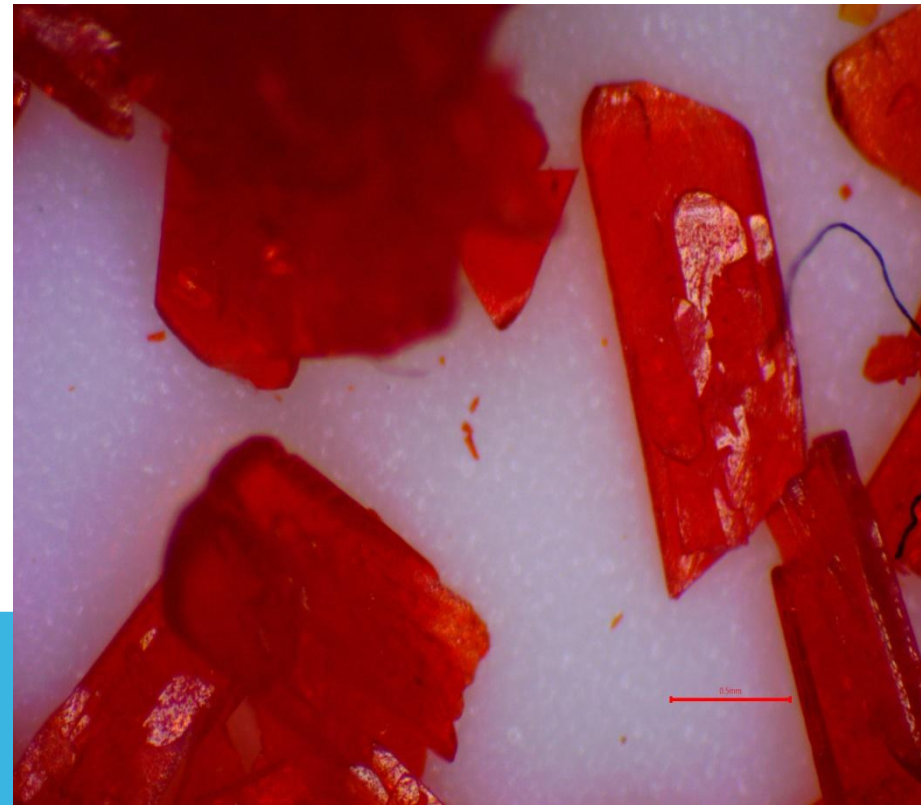
КРИСТАЛЛЫ ИЗАТИНА ИЗ ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА



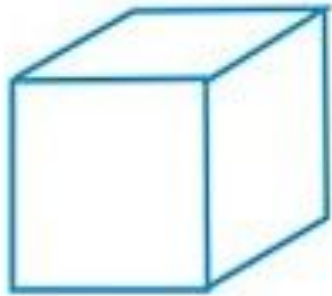
КРИСТАЛЛЫ ИЗАТИНА ИЗ АЦЕТОНИТРИЛА



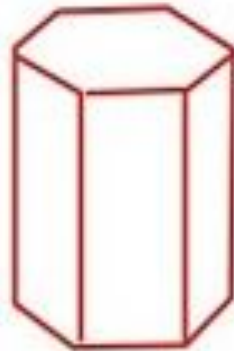
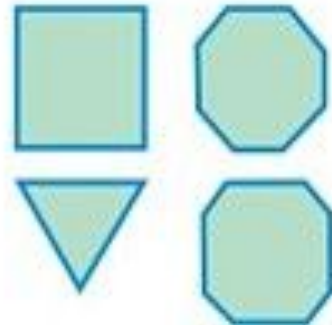
КРИСТАЛЛЫ ИЗАТИНА ИЗ АЦЕТОНА



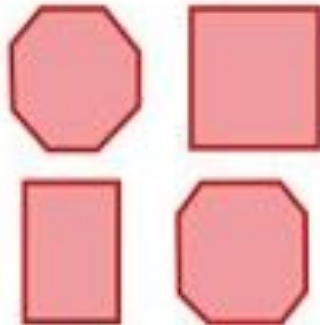
СИНГОНИИ КРИСТАЛЛОВ



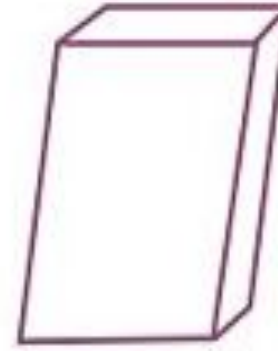
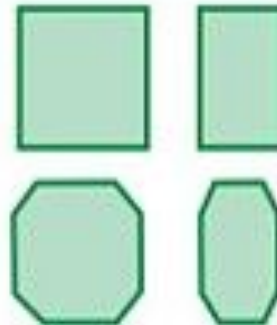
cubic



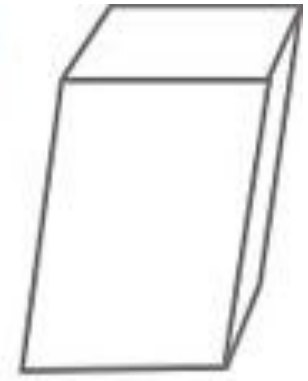
hexagonal



tetragonal



monoclinic



triclinic



ВЫВОДЫ

- Изучено зависимость формы кристаллов изатина от свойств растворителя, из которого осуществлялась кристаллизация
- Показано , что во всех экспериментах кристаллы изатина принадлежат к моноклинной сингонии.
- Показано, что из протонных и апротонных растворителей выпадают разные формы кристаллов.
- Показано, что дипольный момент растворителя мало влияет на форму кристаллов изатина.

Спасибо за внимание!