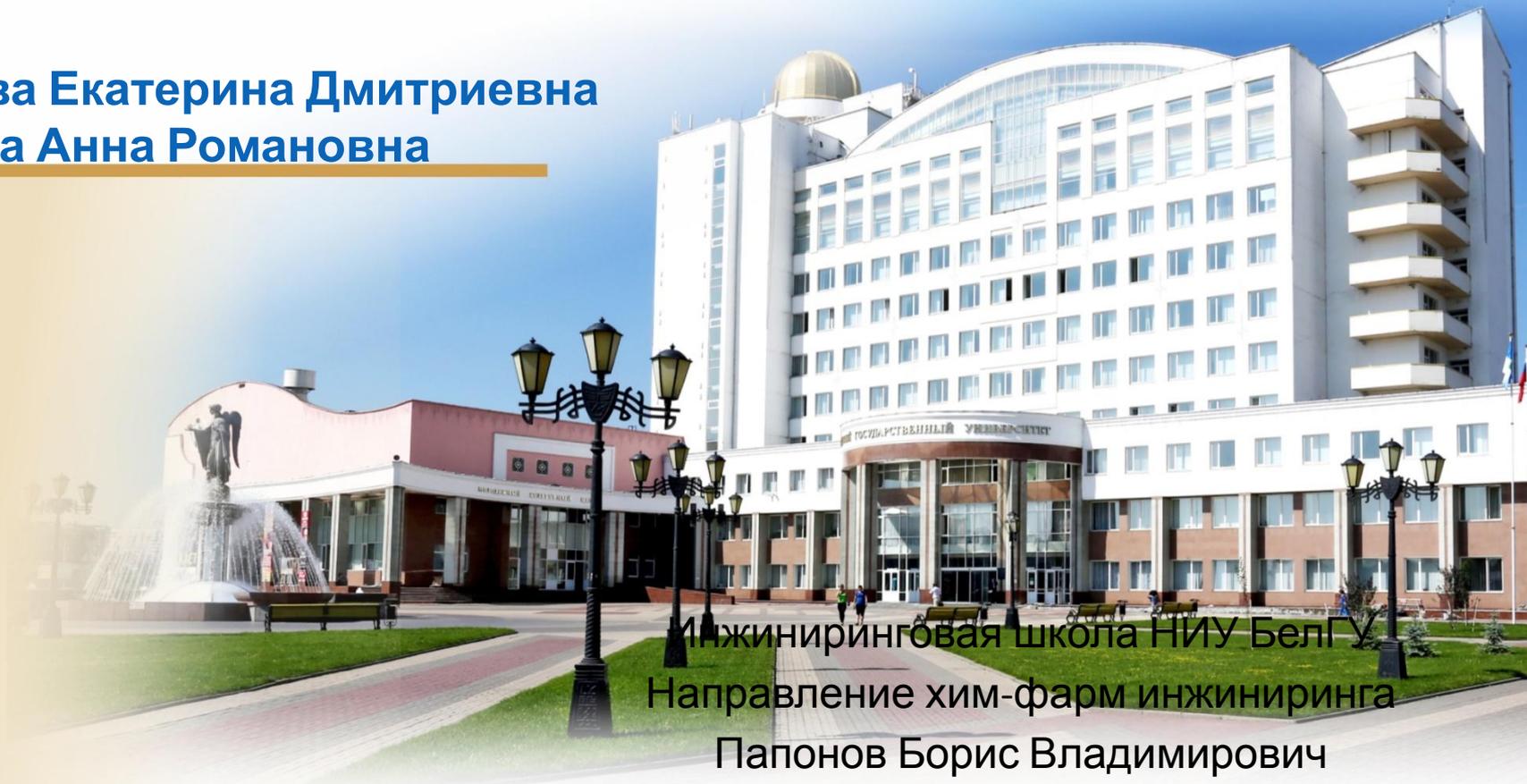


# «ПОЛИМОРФИЗМ КРИСТАЛЛОВ ИЗАТИНА»



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

**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:***

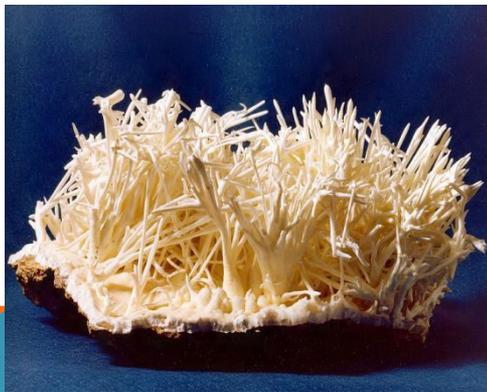
- Осуществить кристаллизацию индолин-2,3-диона (изатина) из растворителей различной полярности.
- Провести корреляцию между формой кристаллов и свойствами растворителей, применяющихся для кристаллизации.

# 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 ( $\text{CaCO}_3$ )



Кальцит



Арагонит



Мрамор



Травертин

# АЛЛОТРОПИЯ

## Аллотропные модификации серы

Аллотропные видоизменения серы

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



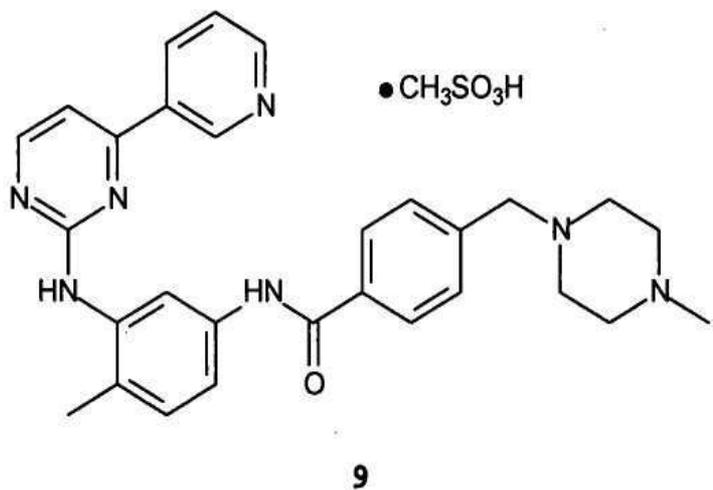
Моноклинная сера,  
игольчатые  
кристаллы желтого  
цвета,  
тпл. = 119,3°C, **S6**



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**

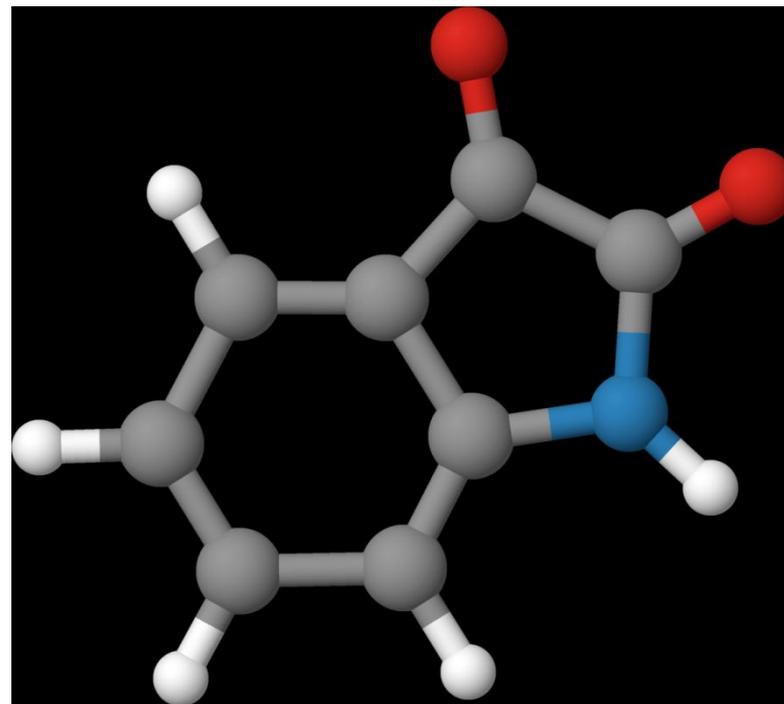
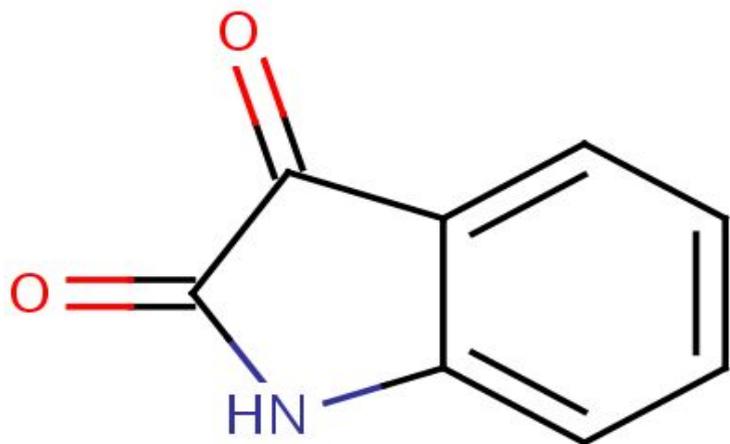
Полиморфизм объясняется тем, что одни и те же атомы вещества могут образовывать различные устойчивые кристаллические решётки, соответствующие минимумам на поверхности . Стабильной модификации отвечает глобальный минимум, метастабильным — локальные минимумы. При повышении температуры более прочная кристаллическая 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

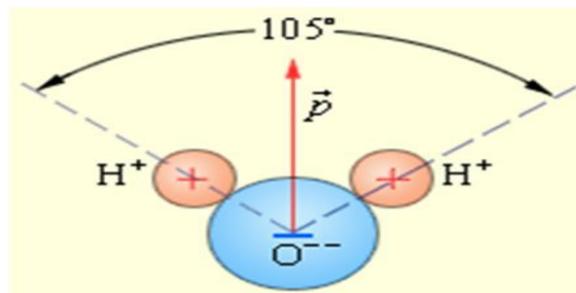


# ВОДА



- 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



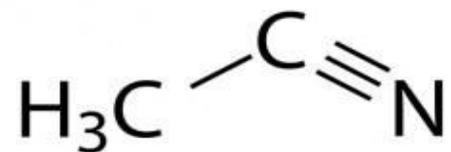
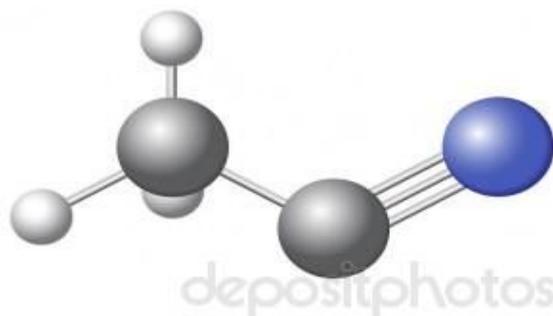
Isopropyl alcohol  
(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub>CHOH

# АЦЕТОНИТРИЛ

- Ацетонитрил — полярный, апротонный растворитель
- Дипольны

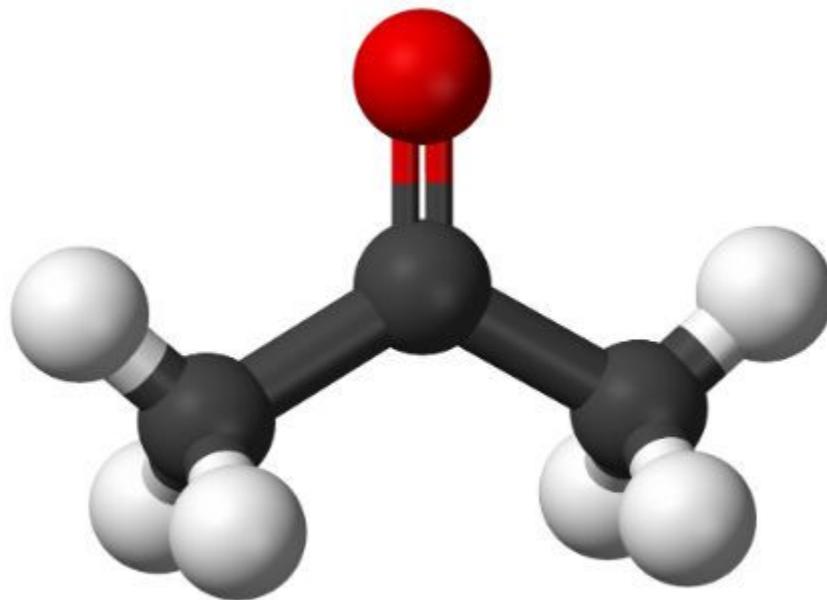
Acetonitrile

3,93 Д



# АЦЕТОН

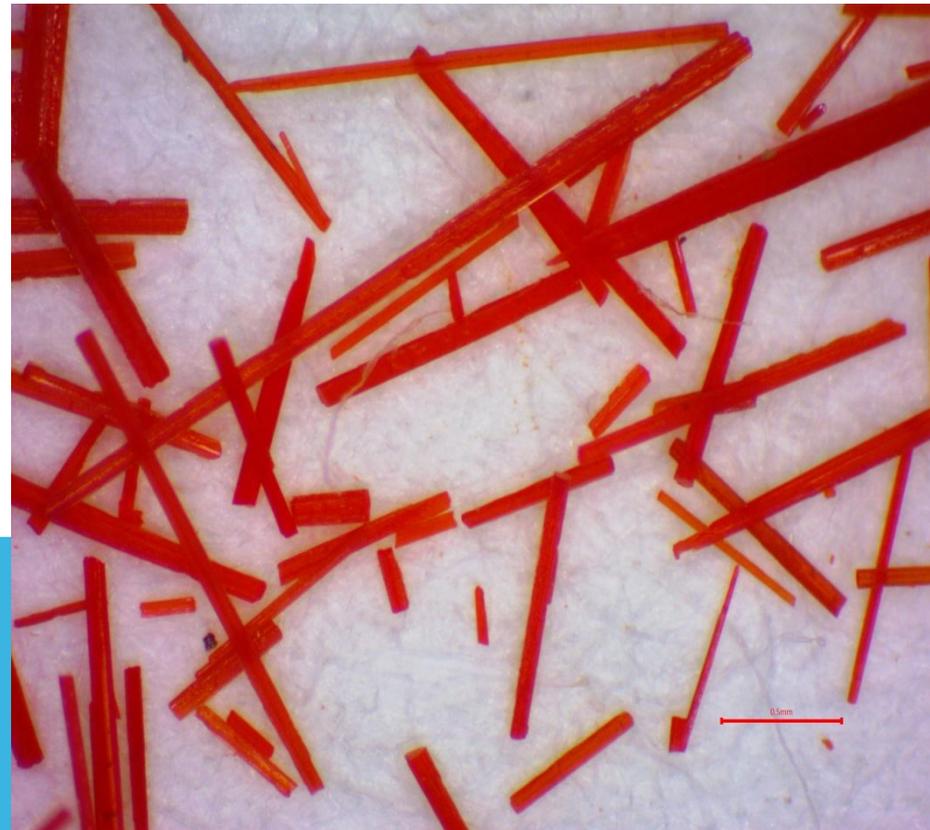
- Ацетон — полярный, апротонный растворитель
- Дипольный момент ацетона — 2,70 Д



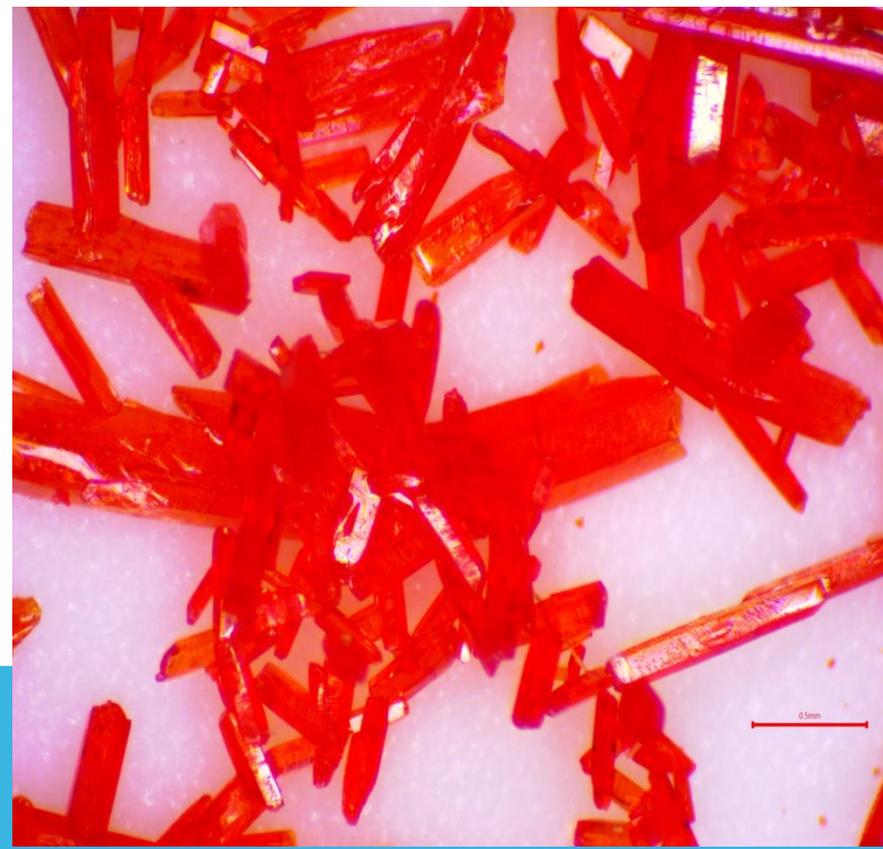
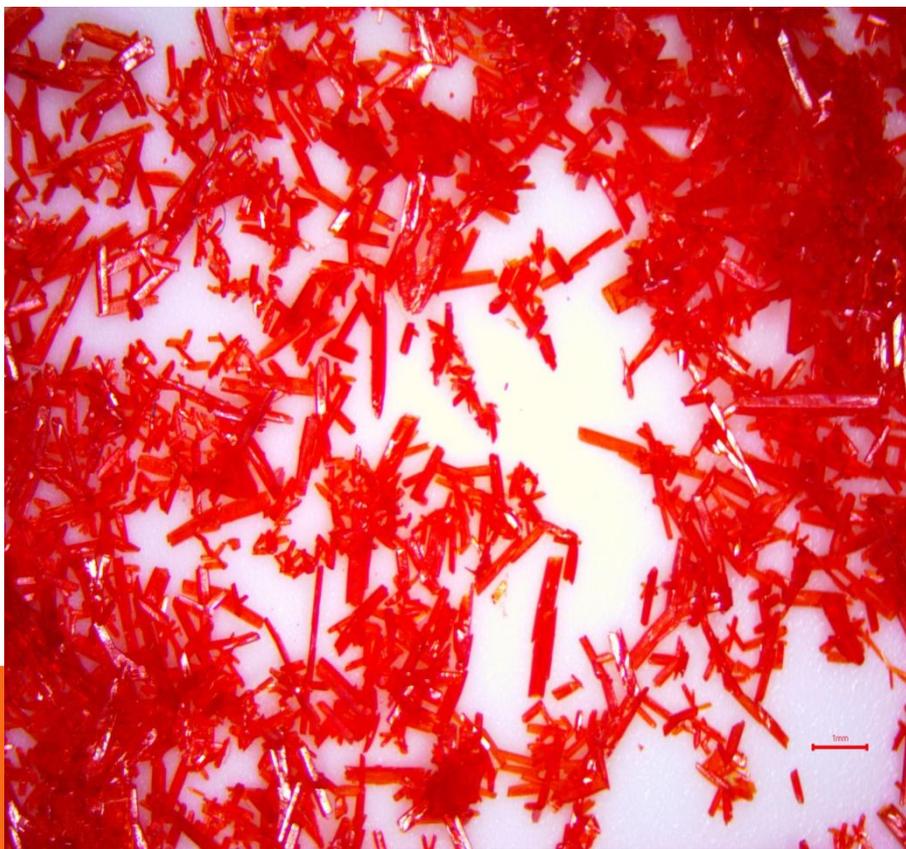
**ацетон**

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

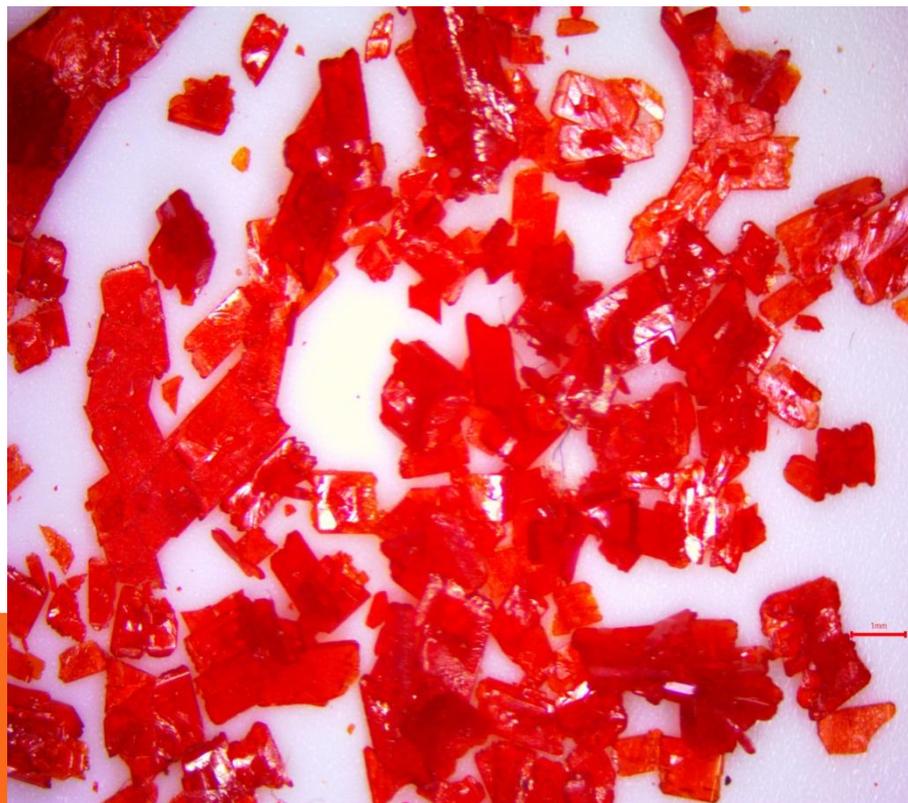
- Кристаллы изатина из воды



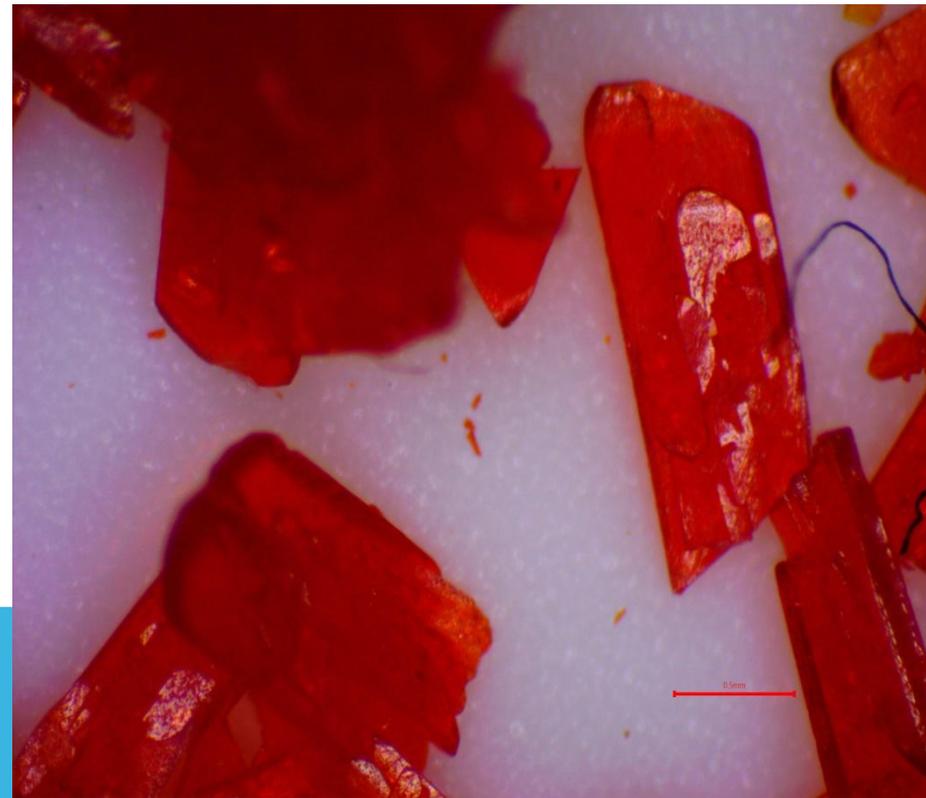
# КРИСТАЛЛЫ ИЗАТИНА ИЗ ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА



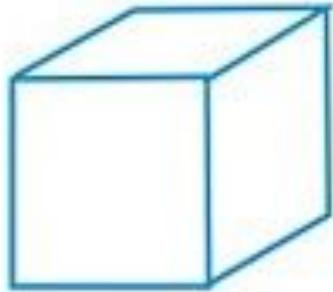
# КРИСТАЛЛЫ ИЗАТИНА ИЗ АЦЕТОНИТРИЛА



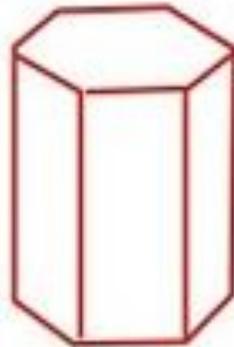
# КРИСТАЛЛЫ ИЗАТИНА ИЗ АЦЕТОНА



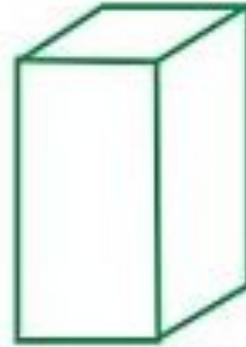
# СИНГОНИИ КРИСТАЛЛОВ



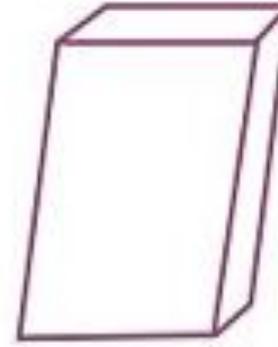
cubic



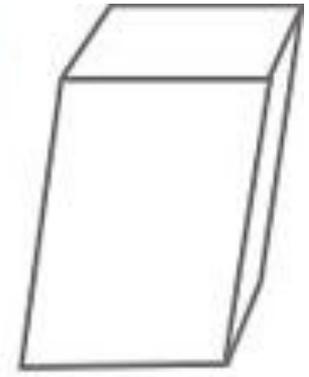
hexagonal



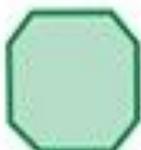
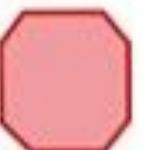
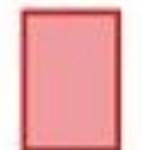
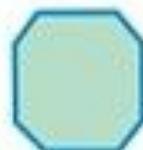
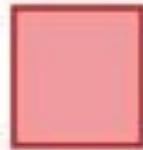
tetragonal



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!**