

MELDONIJA UN γ -BUTIROBETAĪNA HIDROHLORĪDU MOLEKULĀRĀ UN KRISTĀLISKĀ UZBŪVE

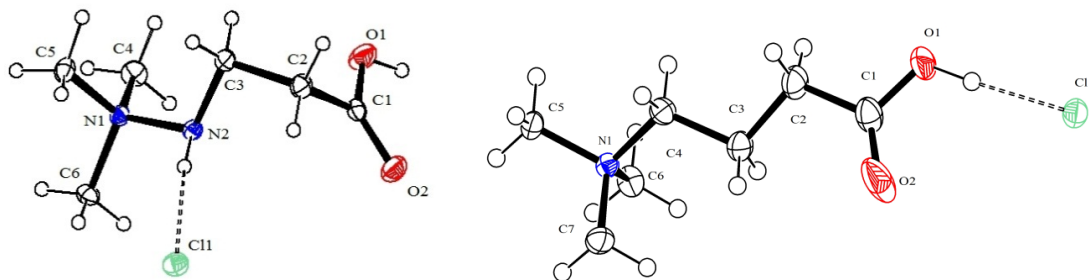
Meldonija dihidrāts ir farmaceitisks līdzeklis, ko izmanto dažādu sirds un asinsvadu slimību un citu patoloģiju ārstēšanā. Tā iedarbības mehānisms ietver fermenta γ -butirobetaīna (GBB) hidroksilāzes inhibēšanu, kas mazina karnitīna biosintēzi, tādējādi novērš šūnu membrānu bojājumus.

Meldonijs un GBB ir ārkārtīgi hidroskopiski, hidroskopiskums apgrūtina ražošanas procesu un uzglabāšanu. Darba uzdevums ir iegūt nehidroskopiskus meldonija un GBB savienojumus, pierādīt un pētīt to molekulāro un kristālisko uzbūvi ar rentgenstruktūranalīzi un noteikt fizikāli-ķīmiskās īpašības (kristagrāfiskie dati ir apkopoti tabulā, struktūras redzamas attēlā).

Tabula

Meldonija un GBB hidrohlorīdu kristālogrāfiskie un fizikāli ķīmiskie dati

	Meldonija HCl	GBB HCl
Formula	C ₆ H ₁₅ N ₂ O ₂ · Cl	C ₇ H ₁₆ NO ₂ · Cl
Singonija, telpiska grupa	Monoklīnā, <i>P2₁/c</i>	Monoklīnā, <i>P2₁/c</i>
<i>a, b, c</i> , Å	10.5280 (5) 12.6690 (5) 11.3422 (5)	7.0653 (3) 5.4593 (2) 24.8633 (12)
β , °	140.847 (2)	94.828 (2)
<i>V</i> , Å ³	955.18 (7)	955.61 (7)
<i>Z</i>	4	4
<i>D_x</i> , Mg·m ⁻³	1.263	1.263
Pakojuma indekss, %	67.7	69.5
<i>T_{kuš.}</i> , K	448	493
<i>R</i> [<i>F</i> ² > 2σ(<i>F</i> ²)], %	3.9	5.5
CCDC Nr.	874911	874910



Att. Meldonija (pa kreisi) un GBB hidrohlorīda (pa labi) kristāliskā struktūra.

Meldonija hidrohlorīda kristālisko struktūru stabilizē 2 starpmolekulārās ūdeņraža saites N–H...Cl un O–H...Cl, kas veido bezgalīgu molekulu ķēdi, bet GBB – tikai 1, taču stipra, starpmolekulārā O–H...Cl saite, kas veido dimērus.

Meldonija molekulas vienkāršās saites N1–N2 garums ir 1.468 (2) Å, kas pārsniedz standarta vērtību 1.452 Å. Molekulu konformāciju raksturojošais torsijas leņķis C1C2C3N2 meldonija HCl un C1C2C3C4 GBB HCl attiecīgi ir 64.3 un 170.7°. Otrs molekulu konformāciju raksturojošais torsijas leņķis C2C3N2N1 meldonija HCl un C2C3C4N1 GBB HCl attiecīgi ir 177.2 un 168.6°.