



БАЛТИЙСКИЙ НАУЧНО-ИНЖЕНЕРНЫЙ КОНКУРС 2019

Санкт-Петербург, 4-7 февраля 2019

Поиск и получение сокристаллов, стабильных в процессе возгонки «Химия»

Кузнецова Карина Денисовна, Воронин Александр Павлович (научный руководитель, кандидат химических наук, н.с.), место выполнения работы: Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН

Сокристаллы – это многокомпонентные кристаллы, состоящие из двух или более нейтральных молекул компонентов, которые при стандартных условиях представляют собой твёрдые тела. В настоящее время сокристальная технология используется при разработке биодоступных лекарственных препаратов [1], материалов для оптики и электроники [2]. В последние годы разработано большое количество подходов, которые оценивают возможность образования, относительную стабильность и растворимость на основании энергии кристаллической решётки сокристалла и его компонентов расчётными методами. К сожалению, предсказательная сила подобных методов невысока, поскольку в литературе нет экспериментальных данных по сублимации сокристаллов. Единственные результаты, полученные в ИХР РАН [3], описывают неравновесный процесс сублимации сокристаллов, разлагающихся при возгонке на исходные компоненты. Чтобы измерить энергию решётки сокристалла, нужно очень точно подобрать компоненты, чтобы процесс возгонки был равновесным. Для этого сокристалл должен быть устойчив при сублимации и кристаллизоваться из паровой фазы в неизменном виде. Таким образом, целью нашей работы стал поиск сокристаллов, устойчивых в процессе сублимации, для дальнейшего создания набора реперных значений термодинамических функций сублимации сокристаллов.

Исследования проводились на базе лабораторий ИХР РАН. Скрининг и получение сокристаллов проводились ультразвуковой обработкой суспензии. Идентификация и анализ чистоты образцов проводились порошковой рентгенографией, ИК-спектроскопией и ДСК. Давление насыщенных паров определялось по методу переноса инертным газом-носителем с помощью ВЭЖХ. Состав паровой фазы был установлен из данных синхронной ДСК/ТГ/масс-спектрометрии.

На первом этапе из базы данных по сублимации органических соединений [4] были отобраны 6 пар объектов с близкими значениями энталпии и энергии Гиббса сублимации, способных образовывать сокристалл друг с другом. Экспериментальный скрининг подтвердил образование сокристалла в двух системах из шести. Показано, что сокристалл кофеина с 3-гидрокисибензойной кислотой возгоняется в неизменном виде в интервале от 100 до 130°C. Установлено, что энталпия сублимации сокристалла близка к энталпии сублимации его компонентов.

Полученные данные говорят о стабильности сокристалла [кофеин + 3-гидрокисибензойная кислота] в процессе возгонки в указанном интервале температур. Впервые измерена энталпия и энергия Гиббса равновесного процесса сублимации сокристалла, которая может быть использована для проверки и улучшения эффективности существующих расчётных подходов к оценке энергии кристаллической решётки и зависящих от неё практически значимых свойств.

Список литературы:

1. N. K. Duggirala [и др.] Chem.Comm. 2016,52(4),640-655;
2. J.-C. Christopherson [и др.] Cryst.Growth Des. 2018,18(2),1245-1259;
3. Manin A.N. [и др.] J.Phys.Chem.B 2014,118(24),6803–6814;
4. G.L. Perlovich, O.A. Raevsky. Cryst.Growth Des. 2010,10(6),2707-271