

**КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ГЛИЦИНА, ПРЕПАРАТА
В ЛЕЧЕНИИ НЕРВНЫХ ЗАБОЛЕВАНИЙ****Аскарлов Ибрагим Рахманович**

д-р. хим. наук, профессор,
Андижанский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Андижан
E-mail: stek@inbox.ru

Мамарахмонов Мухаматдин Хомидович

PhD, доцент,
Андижанский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Андижан
E-mail: muhamatdin@mail.ru

Обидова Шохсанам Акрамжон кизи

магистрант,
Андижанский государственный университет,
Республика Узбекистан, г. Андижан

**QUANTUM-CHEMICAL STUDY OF GLYCINE, A PREPARATION
IN TREATMENT OF NERVOUS DISEASES****Ibragim Askarov**

DSc, professor, Department of chemistry,
Andijan State University,
Republic of Uzbekistan, Andijan

Khomidovich Mukhamatdin

PhD, Associate professor, department chemistry,
Andijan State University
Republic of Uzbekistan, Andijan

Shokhsanam Obidova

Master of Andijan State University,
Republic of Uzbekistan, Andijan

АННОТАЦИЯ

Квантово-химическим методом изучен простейший представитель среди аминокислот – глицин. В результате изучения геометрии и электронной структуры оценена реакционная способность молекулы.

ABSTRACT

The simplest representative of amino acids, glycine, has been studied using a quantum-chemical method. As a result of studying the geometry and electronic structure, the reactivity of the molecule was estimated.

Ключевые слова: глицин, квантово-химический расчет, геометрия, электронная структура, реакционная способность, биологическая активность, нервные заболевания.

Keywords: glycine, quantum-chemical calculation, geometry, electronic structure, reactivity, biological activity, nervous diseases.

Широко используемый в медицине, в лечебной практике нервных заболеваний препарат Глицин - $C_2H_5NO_2$, самая простейшая алифатическая аминокислота или аминокислотная кислота [1, 2], со сладким

вкусом, без оптических изомеров. Так как не имеет в своей молекуле асимметрический атом углерода (Рис 1.):

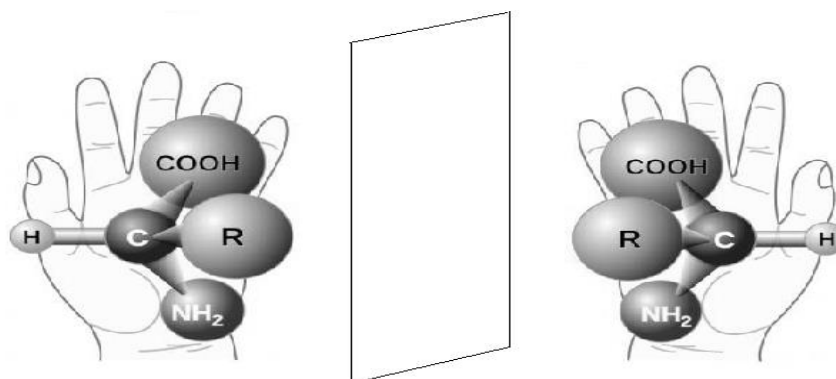


Рисунок 1. Зеркальное отражение оптических изомеров

Производные глицина оказывают успокаивающее, слабое противотревожное и антидепрессивное действие, ослабляя выраженность побочных эффектов антипсихотических средств (нейролептиков), снотворных и противосудорожных средств, используется в ряде терапевтических практик по снижению алкогольной, опиатной и других видов абстиненции как вспомогательный препарат; оказывает слабовыраженное седативное и транквилизирующее действие. Обладает некоторыми ноотропными свойствами, улучшает память и ассоциативные процессы. Таблетки глицин имеют белый цвет, выпускаются в виде плоскоцилиндрических капсул с фаской.

Глицин является регулятором обмена веществ, нормализует и активирует процессы защитного торможения в центральной нервной системе, уменьшает психоэмоциональное напряжение, повышает умственную работоспособность.

Потому для изучения электронной структуры и реакционной способности глицина нами проведены квантово-химические расчеты методом DFT-B3LYP с базисным набором 3-21G с полной оптимизацией геометрических параметров, удачно [3, 4], используемый нами ранее, для изучения органических молекул [5 - 7]. Результаты расчетов энергетических параметров и распределения зарядов на атомах приведена на рисунке ниже.

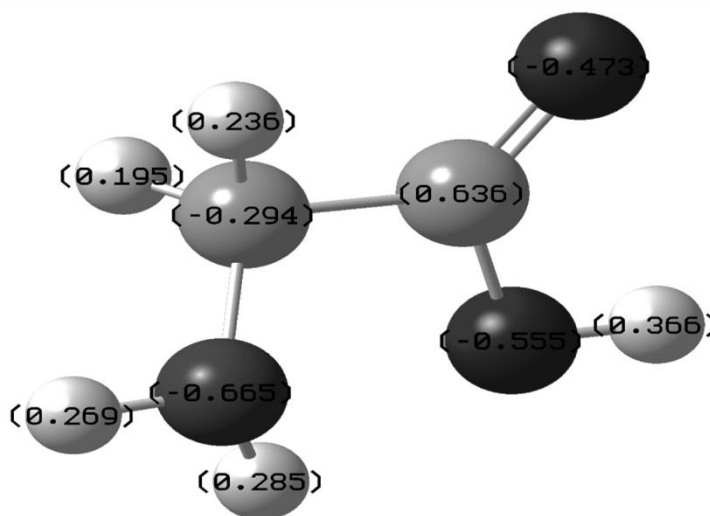


Рисунок 2. Распределение электронных зарядов на атомах глицина

Согласно распределению электронных зарядов, на атомах молекулы глицина, в нем имеются два центра электрофильной атаки: амино- и карбоксильная группы. В реакциях контролируемые зарядами, центром атаки электрофилов должен быть атом азота. То же самая тенденция наблюдается на следующем рисунке 3: вклад аминогруппы на ВЗМО молекулы наивысшая. Поэтому можно представить, что реакция электрофильного замещения протекает селективно, замещением одного протона на аминогруппе.

Наоборот, вклад карбоксильной группы на НСМО молекулы высокая. Потому, можно представить, что именно возможность образования пептидной межмолекулярной связи между их амино- и карбоксильными группами в процессе дегидратации не исключается. Теоретически рассчитанная полная энергия глицина равна $E_p = -177484,0283$ кКал/моль, а дипольный момент составляет $\mu = 2,2906$ Д.

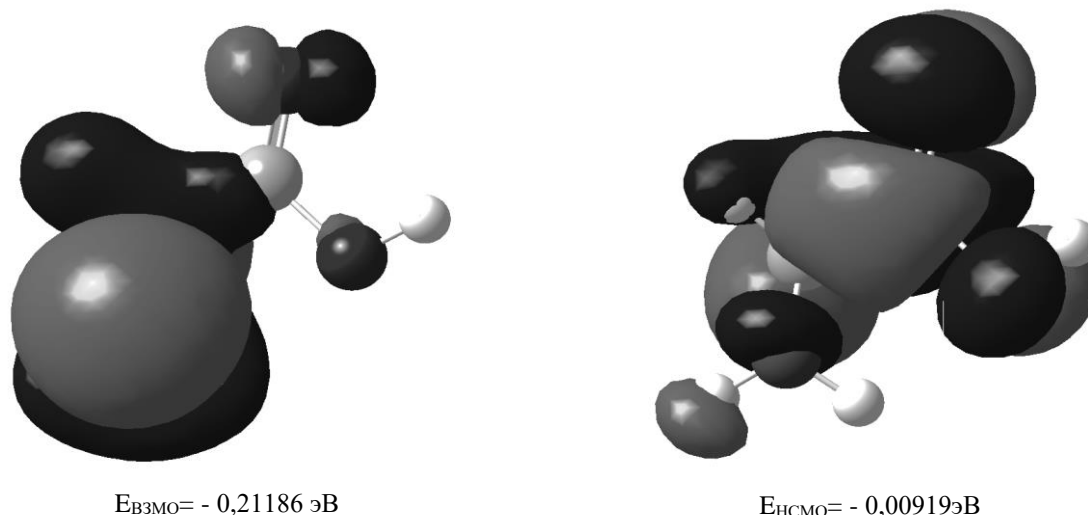


Рисунок 3. Пространственная форма ГО глицина

Энергетическая разница между Граничными Орбиталями (ГО) молекулы не очень высокая, всего составляет $\Delta E = 0,20267 \text{ эВ}$.

Таким образом, глицин проявляет высокую реакционную способность, легко переходя в катионную, цвиттерийонную или анионную форму:

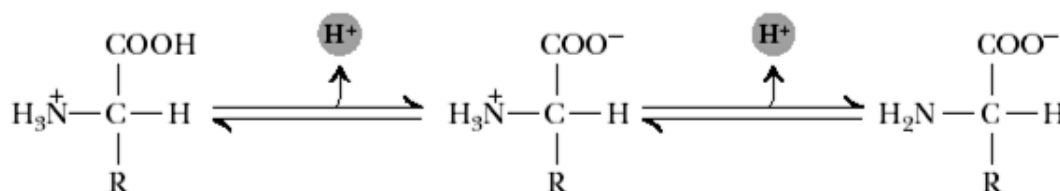


Схема 1. Химические превращения у молекулы глицина

Вероятно, и этим объясняется эффективный механизм действия глицина на нервную систему человека.

Список литературы:

1. Якубке Х.-Д., Эшкайт Х. Аминокислоты. Пептиды. Белки. Перевод с немецкого. - М.: «Мир», 1985. - 75 с.
2. Овчинников Ю.А. Биоорганическая химия: - М.: «Просвещение», 1987. - 816 с.
3. Мамарахмонов М.Х., Квантово-химическое изучение некоторых производных пиримидина и ферроцена и их классификация на основе химического состава: Автореф. дис. на соиск. уч. степ. док. философии по хим. наукам. (PhD). - Фергана, 2018.- 48 с.
4. Мамарахмонов М.Х., Бельский Л.И., Чувылкин Н.Д., Аскарлов И.Р. // Изв. АН. Сер. хим. - 2016. - № 3. - С. 654-657.
5. Мамарахмонов М.Х., Бельский Л.И., Джураев А.М., Чувылкин Н.Д., Аскарлов И.Р. // Изв. АН. Сер. хим. - Москва, 2017. - №4. С. 721-723.
6. Мамарахмонов М.Х., Аскарлов И.Р., Исаев Ю.Т., Киргизов Ш.М., Использование программы Gauss View и Gaussian в процессе преподавания предмета «Квантовая химия» // Материалы международной научно-практической конференции. - Бухара, 2015. - С.88-89.
7. Бельский Л.И., Мамарахмонов М.Х., Субботин А.Н., Чувылкин Н.Д., // Изв. АН. Сер. хим. - Москва, 2015. - № 5. С. 1032-1038.