

Расчет колебательных спектров некоторых триптанов (суматриптан и ризатриптан) методами квантовой химии

Wednesday 2 July 2025 18:50 (20 minutes)

Вибрационная спектроскопия часто используется для исследования биофизических систем, поскольку она предоставляет подробную информацию о локальной структуре материала. Большинство исследований проводятся с помощью инфракрасной или рамановской спектроскопии. Комплементарным методом является спектроскопия неупругого рассеяния нейтронов (INS) [1]. Как спектроскопический метод, INS дает уникальную возможность обеспечения изотопной чувствительности, поскольку является гораздо более сильным рассеивающим центром, чем все другие атомы, включая дейтерий. Кроме того, рассеяние нейтронов не имеет правил отбора, кроме тех, которые возникают из-за изменения длин ядерного рассеяния. Комбинация инфракрасной, рамановской и неупругой нейтронной спектроскопии (INS) используется для получения полных колебательных спектров [2].

Методы компьютерной химии активно применяются в колебательной спектроскопии, как для лучшей интерпретации экспериментальных спектров, так и как дополнительный инструмент исследования системы. Существуют различные пакеты для расчетов методами квантовой химии, среди которых одним из самых популярных является пакет ORCA.

В настоящем исследовании мы сочетаем экспериментальные подходы с теоретическими расчетами. В центре нашего внимания – триптаны. Триптаны – это группа лекарственных средств, специально разработанных для снятия приступа мигрени. Классическая триптановая структура содержит боковую цепь на индольном кольце и основной азот на аналогичном расстоянии от индольной структуры. Основным структурным отличием триптанов является положение сульфонида и боковой цепи, присоединенной к нему. Ризатриптан и золмитриптан имеют вместо сульфонида триазол и 2-оксазолон, соответственно. Другое исключение из классической структуры наблюдается у элетриптана, где азотно-алкильная цепь, соединенная с индольным кольцом, заменена диметилпирролидином, и у наратриптана, где азотно-алкильная цепь заменена 1-метилпиперидиновым кольцом [3].

Несмотря на похожие структуры и одинаковый механизм действия, все триптаны обладают разными побочными эффектами. Кроме того, побочные эффекты одного и того же триптана могут проявляться у разных людей по-разному. Таким образом, триптаны являются интересными объектами для исследований SAR (structure-activity relationship – связь между структурой и активностью). Исследования особенностей структуры и динамики триптанов может помочь в понимании, какие именно характеристики молекулы могут влиять на ее свойства.

С целью пролить свет на различия в биофизических свойствах триптанов были рассчитаны колебательные спектры (ИК-спектр и рамановский спектр) для двух триптанов: суматриптана и ризатриптана. Несколько методов расчетов квантовой химии были применены.

1. Mitchell et al. 2005 Vibrational spectroscopy with neutrons, with applications in chemistry, biology, Materials Science and Catalysis
2. https://link.springer.com/referenceworkentry/10.1007/978-3-642-16712-6_143
3. https://en.wikipedia.org/wiki/Discovery_and_development_of_triptans

Primary author: КАЧАНОВСКАЯ, Светлана (Тверской государственный университет, Тверь, Россия)

Presenter: КАЧАНОВСКАЯ, Светлана (Тверской государственный университет, Тверь, Россия)

Session Classification: 9. Poster Session

Track Classification: Section 3. Modern methods and technologies of nuclear physics.