



ФИЗИКА

УДК 543.42+547.82

МОДЕЛЬНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОГО ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПИРИДИНА, СКАТОЛА И ПИРРОЛА С ВОДОЙ

Г. Н. Тен¹, Д. М. Кадров¹, В. И. Баранов²

¹Саратовский государственный университет
E-mail: TenGN@yandex.ru

²Институт геохимии и аналитической химии им. В. И. Вернадского РАН, Москва

Проведены расчёты длин водородного мостика и частот колебаний связей, участвующих в образовании водородных связей скатола, пиридина и пиррола с молекулами воды в приближении B3LYP/6-31G(d,p). Выполнены расчёты модельных потенциалов межмолекулярного взаимодействия рассматриваемых молекул на основе формул Леннарда–Джонса и Морзе, позволившие учесть изменение длины водородной связи в зависимости от числа молекул воды, участвующих в образовании комплексов. Построены потенциальные кривые, характеризующие гидрофильные и гидрофобные свойства скатола, пиридина и пиррола, а также их растворимость в воде.

Ключевые слова: скатол пиридин, пиррол, модельный потенциал, водородная связь, гидрофильность, гидрофобность.

Model Potentials of Intermolecular Interaction Pyridine, Skatole and Pyrrole with Water

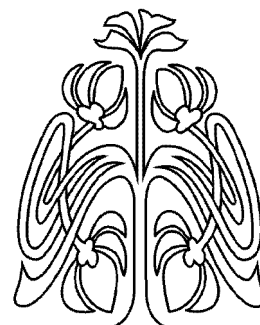
G. N. Ten, D. M. Kadrov, V. I. Baranov

The calculations of the lengths of hydrogen bridge and frequencies of vibrations of bonds in the formation of hydrogen bonds skatole, pyridine and pyrrole with the water molecules in the approximation of B3LYP/6-31G(d,p). The calculations of model potentials of intermolecular interaction of the molecules on the basis of formulas Lennard–Jones and Morse, allowed to account for changes in the length of hydrogen bonds depending on the number of water molecules participating in the formation of complexes. Built potential curves characterizing the hydrophilic and hydrophobic properties skatole, pyridine, pyrrole, and their solubility in water.
Key words: skatole, pyridine, pyrrol, model potential, hydrogen bond, hydrophilic, hydrophobic.

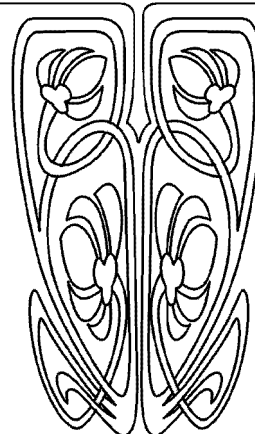
Введение

Исследование водных растворов биологически важных соединений необходимо для успешного решения многих научных и практических задач, одной из которых является определение причин, приводящих к гидрофобности или гидрофильности вещества и оказывающих непосредственное влияние на их растворимость.

Как известно, явления гидрофильности и гидрофобности обусловлены силами межмолекулярного взаимодействия с молекулами воды, и они могут проявляться в таких разных физических процессах, как смачивание, растворимость, сворачиваемость белков, формирование мицелл, мембран, поверхностно-активных комплексов и т.д. [1, 2]. Свойство гидрофильности и гидрофобности веществ



НАУЧНЫЙ
ОТДЕЛ





широко используется в промышленности, технике и научных исследованиях [3, 4]. Например, гидрофильность наноэмульсии применяется для сообщения специальных свойств текстильным материалам, а гидрофобность некоторых веществ – для создания перспективных носителей лекарственных препаратов [5, 6].

В общем случае понятия гидрофильности и гидрофобности применимы не только к телам или их поверхностям, но и к единичным молекулам или отдельным частям молекул. Например, в молекулах поверхностно-активных веществ, таких как цветтер-ионные формы аминокислот, различают гидрофильные (полярные) и гидрофобные (углеводородные) группы [7].

Несомненно, спектральные методы являются одними из самых широко используемых традиционных методов исследования межмолекулярного взаимодействия. Сильное межмолекулярное взаимодействие вещества с водой приводит к значительному смещению частот валентных колебаний, участвующих в образовании водородных связей (ВС), и усилению интенсивности соответствующих полос поглощения (см., например, [8–10]). Поскольку растворимость или нерастворимость веществ в водном растворе обусловлена той же причиной, что и гидрофильность и гидрофобность, а именно межмолекулярным взаимодействием вещества с водой, то часто из-за плохой растворимости гидрофобных веществ методы колебательной спектроскопии оказываются недостаточно информативными. В этом случае целесообразно обратиться к квантово-химическим расчётам, позволяющим теоретически рассматривать свойства молекул, экспериментальное исследование которых затруднено.

Методы компьютерного моделирования растворов позволяют изучить движение частиц на микроструктурном уровне, получить информацию о процессах, происходящих в растворе, провести корректную интерпретацию экспериментальных данных, а также выполнить проверку адекватности существующих межмолекулярных и внутримолекулярных потенциалов взаимодействия. Например, методы молекулярной динамики и Монте–Карло позволили рассчитать структурные и динамические параметры, с помощью которых были объяснены результаты экспериментально наблюдаемых изменений термодинамических и кинетических параметров смесей гептан – метанол и трет-бутанол – вода [11].

Целью данного исследования является определение модельных межмолекулярных потенциалов и их особенностей, отвечающих за гидрофобность скатола, высокую и слабую растворимость пиридина и пиррола соответственно. Используется метод молекулярного моделирования водного раствора, состоящий в расчёте геометрических и спектральных характеристик комплексов скатола, пиридина и пиррола с молекулами воды.

Результаты и их обсуждение

Ранее был выполнен расчёт комплексов скатола с водой (1:*n*) для определения зависимости длины *l* водородного мостика (ВМ) от числа молекул воды *n*, участвующих в образовании комплекса [12]. Было показано, что наличие гидрофобного хвоста у скатола при увеличении молекул воды (*n* = 2÷8), окружающих комплекс скатола с одной молекулой воды (1:1), приводит сначала к уменьшению длины ВМ, затем увеличению, и, наконец, начиная с 6-й молекулы воды параметры ВМ практически не меняются, т.е. наблюдается их стабилизация. Значение длины *l*(NH...O) становится равной ~3.3 Å, т.е. ВС является очень слабой, что объясняет гидрофобность скатола.

Для пиридина образование комплексов с молекулами воды, число которых меняется от 1 до 5, приводит сначала к уменьшению длины связи *l*(N...HO) от 1.94 до 1.61 Å, т.е. ВС становится сильнее. Затем длина ВС с увеличением числа молекул воды не меняется, т.е. стабилизируется (табл. 1).

Совершенно иная картина наблюдается для пиррола. Каждая последующая молекула воды, присоединённая к комплексу 1:1, вытесняет предыдущую молекулу воды в область над ароматическим кольцом. Было показано, что сильное взаимодействие молекул воды с ароматической системой пиррола приводит к ослаблению ВС и к возможности быстрого разрыва ВС между пирролом и водой.

Молекулярные диаграммы скатола, пиридина и пиррола приведены на рис. 1.

Результаты расчёта длин ВМ и частот валентных колебаний связей NH скатола и пиррола, а также частот валентных колебаний OH воды, образующей ВС с пиридином, для комплексов с водой приведены в табл. 1. Расчёт структуры и колебательных спектров был выполнен с помощью программы Gaussian-09 методом DFT в базе 6-31G(d,p) [13].



Таблица 1

Вычисленные значения длин (l , Å) ВМ и частот (ν , см⁻¹) валентных колебаний связей NH и OH для скатола, пиррола и воды (для пиридина) при разных количествах молекул воды (n), окружающих комплекс 1:1

n	Скатол				Пиридин				Пиррол			
	$l(\text{H}\dots\text{O})$	$l(\text{NH})$	$l(\text{NH}\dots\text{O})$	$\nu(\text{NH})$	$l(\text{N}\dots\text{H})$	$l(\text{OH})$	$l(\text{N}\dots\text{OH})$	$\nu(\text{OH})$	$l(\text{H}\dots\text{O})$	$l(\text{NH})$	$l(\text{NH}\dots\text{O})$	$\nu(\text{NH})$
–	–	–	–	3670	–	–	–	3624	–	–	–	3689
1	1.95	0.99	2.94	3513	1.94	0.97	2.91	3551	1.94	1.02	2.96	3519
2	1.84	1.00	2.84	3480	1.85	0.98	2.83	3397	2.00	0.99	2.99	3614
3	1.79	1.02	2.81	3250	1.70	1.00	2.70	3027	1.81	1.06	2.87	3389
4	1.96	0.93	2.89	3397	1.67	1.01	2.68	2889	1.96	1.02	2.98	3522
5	2.34	0.95	3.29	3501	1.67	1.01	2.68	2892	1.80	1.04	2.84	3295
6	2.33	0.98	3.32	3600	–	–	–	–	1.89	1.04	2.93	3481
7	2.33	0.99	3.32	3602	–	–	–	–	1.78	1.07	2.85	3267
8	2.33	0.99	3.32	3609	–	–	–	–	–	–	–	–

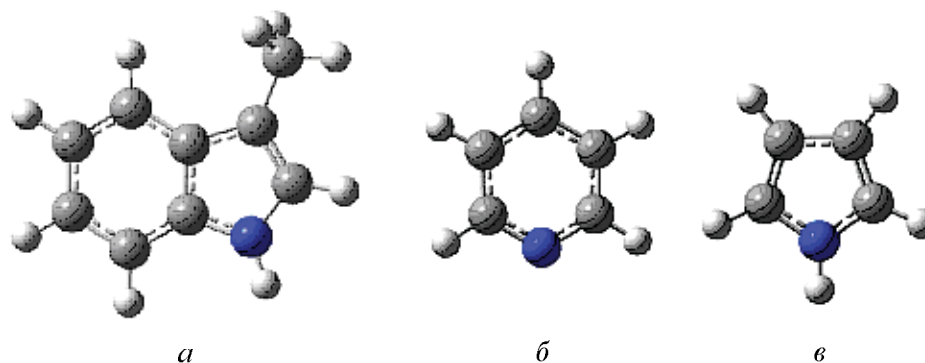


Рис. 1. Молекулярные структуры скатола (а), пиридина (б) и пиррола (в)

Для описания межмолекулярного взаимодействия (ММВ) были использованы потенциалы Леннарда–Джонса и Морзе, описание которых дано, например, в [14, 15]. Выбор этих потенциалов обусловлен тем, что потенциал Леннарда–Джонса позволяет достаточно хорошо учитывать зависимость энергии взаимодействия двух частиц от расстояния между ними (потенциал межмолекулярного взаимодействия убывает по степенному закону как r^{-6}), и поэтому его широко используют при компьютерном моделировании, а потенциал Морзе – связать энергию водородной связи с колебательными частотами.

Форма потенциала Леннарда–Джонса определяется как

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right], \quad (1)$$

где ε – глубина потенциальной ямы; а σ – значение r , при котором $U(r) = 0$; точка минимума соответствует $r_{\min} = 2^{1/6} \sigma$.

Потенциал Морзе описывается выражением

$$U(r) = D_e (1 - e^{-\beta(r-r_0)^2}), \quad (2)$$

где D_e – глубина потенциальной ямы;

$$\beta = \nu \sqrt{\frac{2\pi^2 \mu}{D_e}}, \quad \text{где } \nu \text{ – частота колебания,}$$

μ – приведённая масса; r_0 – равновесное расстояние.

Известно, что потенциальная функция водородной связи А–Н...В согласно экспериментальным и квантово-химическим исследованиям имеет два минимума и один максимум, причём при сближении атома водорода Н со вторым электроотрицательным атомом В на расстояние меньше чем 1 Å возможен перенос протона, а при расстоянии $l(\text{А–Н}\dots\text{В})$ более чем 3.5 Å образование ВС маловероятно [16]. Учитывая эти особенности, при моделировании потенциальной поверхности ММВ расстояние между атомами Н...В менялось от 1 до 2.5 Å (считаем, что длина связи А–Н ~ 1 Å).

Скатол. Особенность скатола заключается в одновременном присутствии гидрофобной и гидрофильной структурных составляющих – бензольное и пиррольное кольца вместе со связями



СН представляют гидрофобную поверхность, гидрофильным центром является гетероатом N.

В связи с этим моделирование потенциальной поверхности ММВ для скатола выполнялось в три этапа.

1. Сначала была построена потенциальная кривая Леннарда–Джонса с использованием параметров, вычисленных для комплекса 1:1. Глубина потенциальной ямы, отвечающая энергии водо-

родной связи $E_{1:1}^{BC}$, равная 5,71 ккал/моль, была определена с помощью вычисленных значений энергий скатола $E^{Скато\lambda}$, воды $E_{1:1}^{Вода}$ и комплекса скатола с водой (1:1) $E_{1:1}^{Скато\lambda:Вода}$ (табл. 2). Точка минимума $r_{min} = 1,95 \text{ \AA}$ (см. табл. 2); значение r , при котором $U = 0$, составляет 1.74 \AA. Полученная потенциальная кривая 1 представлена на рис. 2.

Таблица 2

Значения полных энергий E (а.е.м.) скатола, пиридина и пиррола, молекул воды в комплексах и комплексов скатола, пиридина и пиррола с водой

Скато\л	E	Пиридин	E	Пирро\л	E
$E^{Скато\lambda}$	-403.135523	$E^{Пиридин}$	-248.292597	$E^{Пирро\lambda}$	-210.176337
$E_{1:1}^{Вода}$	-76.419736	$E_{1:1}^{Вода}$	-76.419736	$E_{1:1}^{Вода}$	-76.419736
$E_{1:1}^{Скато\lambda:Вода}$	-479.564359	$E_{1:1}^{Пиридин:Вода}$	-324.723787	$E_{1:1}^{Пирро\lambda:Вода}$	-286.59607
$E_{1:3}^{Вода}$	-229.267535	$E_{1:5}^{Вода}$	-305.710986	$E_{1:3}^{Вода}$	-229.285114
$E_{1:3}^{Скато\lambda:Вода}$	632.409999	$E_{1:5}^{Пиридин:Вода}$	-554.041288	$E_{1:3}^{Пирро\lambda:Вода}$	-439.49249
				$E_{1:5}^{Вода}$	-382.155333
				$E_{1:5}^{Пирро\lambda:Вода}$	-592.367326
				$E_{1:7}^{Вода}$	-535.060071
				$E_{1:7}^{Пирро\lambda:Вода}$	-745.259677

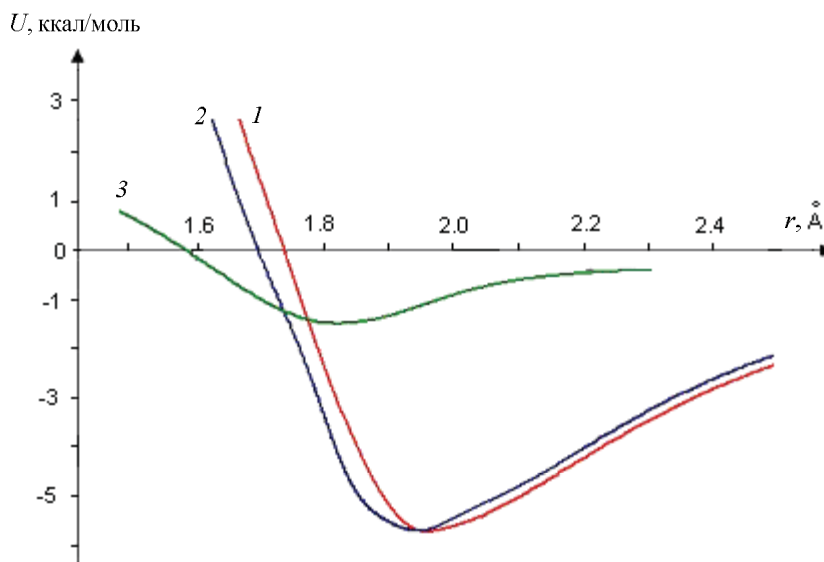


Рис. 2. Потенциальные кривые $U(r)$ для скатола: 1 – Леннарда–Джонса, 2 – Морзе для комплекса 1:1, 3 – Морзе с учётом окружения комплекса 1:1 молекулами воды

2. Далее была рассчитана потенциальная кривая ММВ по формуле Морзе. Была выполнена нормировка, в результате которой вычисленное по формуле (2) значение частоты для $r = 1.95 \text{ \AA}$ соответствовало частоте валентного колебания

связи NH в комплексе скатола с водой (1:1), т.е. частоте 3513 см^{-1} (см. табл. 1). В этом случае для $r = 2.50 \text{ \AA}$ частота колебания $\nu(\text{NH})$ равна 3635 см^{-1} , что согласуется с результатами экспериментальных и теоретических исследований



водородной связи, согласно которым при длине ВС $l(\text{NH}\dots\text{O})$, равной 3 Å и выше, происходит значительное ослабление ВС с её последующим разрывом. Этот факт подтверждается сравнением частоты 3635 см^{-1} с частотой нормального колебания связи NH без образования ВС, равной 3670 см^{-1} (см. табл. 1). Построенная кривая Морзе 2 приведена на рис. 2.

Отметим, что оба модельных потенциала (Леннарда–Джонса и Морзе) были построены для ВС, образованной скатолом с одной молекулой воды (1:1), и характеризовали только гидрофильные свойства скатола.

3. Поскольку гидрофобные свойства скатола проявляются при окружении его несколькими молекулами воды (начинает сказываться влияние гидрофобного хвоста), то для определения потенциальной кривой, учитывающей гидрофобность скатола, были учтены результаты расчёта параметров ВМ для комплексов скатола с водой 1: n , где n изменяется от 3 до 8 молекул (см. табл. 1). Ранее было показано, что увеличение молекул воды сначала приводит к уменьшению длины ВМ, затем она увеличивается и далее происходит стабилизация её величины [10]. Согласно этим результатам была построена потенциальная кривая Морзе ММВ скатола с молекулой воды, участвующей в образовании комплекса 1:1, при окружении её другими молекулами воды, число которых меняется от 3 до 8 (см. рис. 3, б). В данном случае точка минимума $r_{\min} = 1,79\text{ Å}$, а $E_{1,3}^{BC} = 1,45\text{ ккал/моль}$ (см. табл. 2); значение r , при котором $U = 0$, составляет $1,59\text{ Å}$.

Сравнение вычисленных потенциальных кривых, описывающих гидрофильность (см. рис. 2, б) и гидрофобность (см. рис. 2, в) скатола, показывает, что гидрофобность приводит к уменьшению r_{\min} (на величину $0,16\text{ Å}$) и глубины потенциальной ямы (на $4,26\text{ ккал/моль}$), вследствие чего ВС значительно ослабляется по сравнению с комплексом 1:1. Как показывают результаты расчёта, каждую из полученных потенциальных кривых в области притяжения Н к электроотрицательному атому О, т.е. для $1,9 < r < 2,5\text{ Å}$, можно описать степенной функцией r^k – для гидрофильности показатель степени $k = -6$, для гидрофобности $k = -9$.

Пиридин. Для пиридина, как и для скатола, сначала был рассчитан потенциал Морзе для ММВ, характеризующего комплекс пиридина с одной молекулой воды 1:1. Значения параме-

тров минимума потенциальной ямы: $r = 1,94\text{ Å}$ ($l(\text{N}\dots\text{H})$); $E_{1,1}^{BC} = 7,18\text{ ккал/моль}$; величина r , при которой $U = 0$, составляет $1,72\text{ Å}$. Полученная потенциальная кривая $U(r)$ представлена на рис. 3, а.

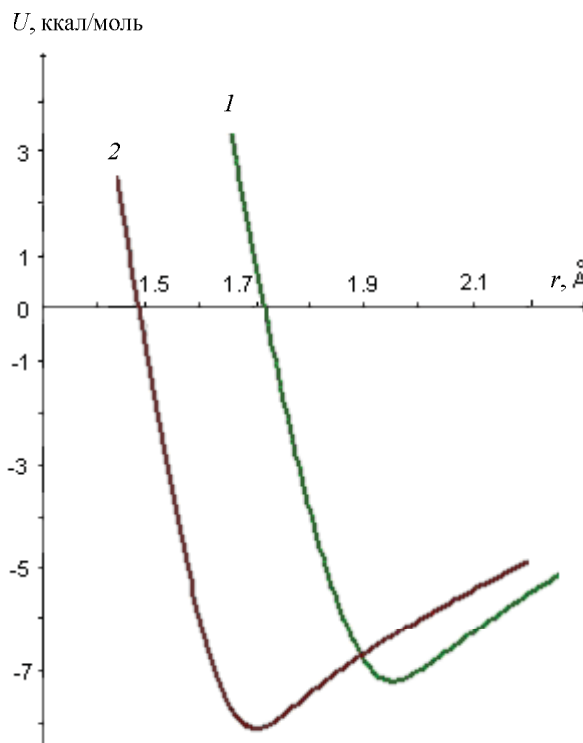


Рис. 3. Потенциальные кривые $U(r)$ Морзе для пиридина: 1 – для комплекса 1:1, 2 – с учётом окружения комплекса 1:1 молекулами воды

Далее была построена кривая Морзе зависимости потенциальной энергии ВС от длины $l(\text{N}\dots\text{H})$ при окружении комплекса 1:1 молекулами воды. В отличие от скатола, при достижении минимума $r = 1,67\text{ Å}$ для $n = 5$ дальнейшее увеличение числа молекул практически не меняет длину и энергию водородной связи, т.е. наступает стабилизация этих параметров. Глубина потенциальной ямы $E_{1,3}^{BC} = 7,88\text{ ккал/моль}$; величина r , при котором $U = 0$, составляет $1,49\text{ Å}$ (рис. 3, б). Расчёт показал, что потенциальная кривая, во-первых, хорошо воспроизводит вычисленные значения частот – отличие составляет $\sim 10\text{ см}^{-1}$; во-вторых, она так же, как и потенциальная кривая ММВ для комплекса 1:1, описывается степенной функцией с показателем степени -6 .

Пиррол. Как уже отмечалось выше, каждое последующее присоединение к пирролу молекул воды приводит к вытеснению предыдущих моле-



кул воды, образующих с пирролом водородную связь, в область над ароматическим кольцом, но, как и в случаях со скатолом и пиридином, при некотором количестве воды (в данном случае $n = 6\div 7$) наступает стабилизация параметров водородной связи – длины и энергии (см. табл. 1).

Для того чтобы проследить динамику изменения параметров водородной связи и характер изменения потенциальной кривой в зависимости от числа молекул воды, целесообразно построить кривые Морзе для комплексов 1:1, 1:3, 1:5, 1:7, для которых значения r_{\min} соответствовали 1.94, 1.81, 1.80, 1.78 Å; глубина потенциальной ямы – 7.15, 6.49, 3.05, 2.08 ккал/моль (см. табл. 2); значения r , при котором $U = 0$, равны 1.73, 1.61, 1.60, 1.59 Å.

Анализ вычисленных потенциальных кривых Морзе (рис. 4) показывает, что увеличение числа молекул воды приводит к уменьшению глубины потенциальной ямы, необходимой для разрыва старой и образования новой водородной связи, причём величина потенциального барьера при окружении пиррола 7 молекулами воды близка по значению к потенциальному барьеру скатола при проявлении его гидрофобных свойств.

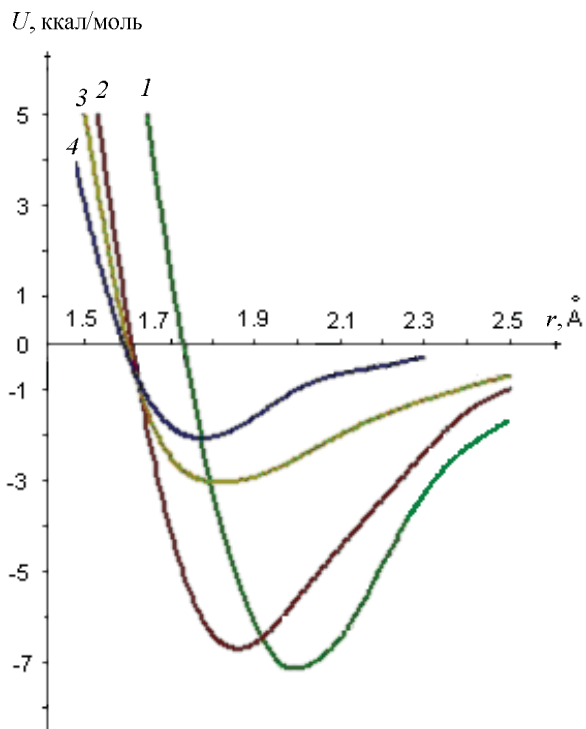


Рис. 4. Потенциальные кривые $U(r)$ Морзе для пиррола: 1 – для комплекса 1:1, 2 – для комплекса 1:3, 3 – для комплекса 1:5, 4 – для комплекса 1:7

Известно, что энергия водородной связи, например, в димере воды, составляет ~ 5 ккал/моль [10]. Учитывая, что в водном растворе наблюдается конкуренция молекул воды с молекулами растворённого вещества за образование водородной связи, в водном растворе пиридина уменьшение числа связей между молекулами воды компенсируется образованием прочных водородных связей N...OH. Напротив, скатол и пиррол не могут образовывать такие прочные связи с молекулами воды, поэтому скатол и пиррол нерастворимы или слабо растворимы в воде.

Выводы

Таким образом, выполненный расчёт параметров ВМ и частот валентных колебаний связей, принимающих участие в образовании ВС между скатолом, пиридином, пирролом и водой, показал, что увеличение числа молекул воды приводит к стабилизации параметров ВС (длины и энергии) для всех рассматриваемых соединений. Были определены модельные потенциалы ММВ на основе формул Леннарда–Джонса и Морзе, что позволило связать частоты валентных колебаний с энергией ВС, анализ которых показал, что во всех случаях увеличение числа молекул воды приводит к ослаблению ВС по сравнению с комплексом 1:1. Характер этих изменений различен.

Так, для скатола результаты расчёта комплекса 1:1 позволяют описать только гидрофильные свойства. Для определения гидрофобных свойств необходимо учитывать влияние среды, что возможно сделать методом молекулярного моделирования комплексов скатола с несколькими молекулами воды ($n = 8$). Результаты расчёта показали, что потенциальную кривую в области притяжения Н к электроотрицательному атому О можно описать степенной функцией – для гидрофильности показатель степени равен -6 , для гидрофобности равен -9 .

Для пиридина, как и для скатола, были построены две кривые Морзе – для комплекса 1:1 и при окружении этого комплекса другими молекулами воды. Обе потенциальные кривые хорошо воспроизводят вычисленные значения частот и описываются степенной функцией с показателем степени -6 , причём увеличение числа молекул приводит к увеличению глубины потенциальной ямы, т.е. водородная связь усиливается.

Построенные кривые Морзе для комплексов 1:1, 1:3, 1:5, 1:7 позволили проследить динамику



изменения параметров водородной связи воды с пирролом и характер изменения потенциальной кривой в зависимости от числа молекул воды. Их анализ показал, что увеличение числа молекул воды приводит к уменьшению глубины потенциальной ямы, необходимой для разрыва старой и образования новой водородной связи, причём величина потенциального барьера становится соизмеримой с величиной потенциального барьера скатола при проявлении его гидрофобных свойств.

Результаты расчёта позволяют объяснить одно из важнейших физико-химических свойств – растворимость рассматриваемых соединений в воде: высокую у пиридина, слабую у пиррола и гидрофобность скатола.

Список литературы

1. *Стайер Л.* Биохимия : в 3 т. М. : Мир, 1984. Т. 1. 232 с.
2. *Кантор Ч., Шиммель П.* Биофизическая химия : в 3 т. М. : Мир, 1984. Т. 1. 336 с.
3. *Адамсон А.* Физическая химия поверхностей. М. : Химия, 1979. 568 с.
4. *Уразаев В.* Влагозащита печатного монтажа. Обзор методов // Электроника НТБ. 2003. № 1. С. 64–69.
5. *Дянкова Т. Ю., Громов В. Ф.* Сорбция красителей волокнами из полигетероариленов // Вестн. СГПУТД. 1999. № 3. С. 110–115.
6. *Korchagina E. V., Philippova O. E.* Nanogels of chitosan and of its hydrophobic derivatives in dilute aqueous solutions // Abstracts of V International Symposium «Supramolecular Systems in Chemistry and Biology». Kyiv, Ukraine, 2009. P. 127.
7. *Анисимов А. А., Леонтьева А. Н., Александрова И. Ф., Каманина М. С., Бронштейн Л. М.* Основы биохимии. М. : Высш. шк., 1986. 551 с.
8. *Пиментелл Дж., Мак-Клеллан О.* Водородная связь. М. : Мир, 1964. 462 с.
9. *Юхневич Г. В.* Инфракрасная спектроскопия воды. М. : Наука, 1973. 208 с.
10. *Билобров В. М.* Водородная связь. Внутримолекулярные взаимодействия. Киев : Наук. думка, 1991. 316 с.
11. *Ивлев Д. В., Киселев М. Г.* Сольвофобные эффекты в смеси метанол – гептан. Молекулярно-динамическое моделирование // Журн. физ. химии. 2001. Т. 75, № 1. С. 74–77.
12. *Тен Г. Н., Яковлева А. А., Баранов В. И.* Теоретическое исследование гидрофобности и гидрофильности индола, скатола и этанола // Журн. структурной химии. 2013. Т. 54, № 6. С. 986–996.
13. *Frisch M. J., Trucks G. W., Schlegel H. B. et al.* Gaussian 09 / Gaussian Inc., Wallingford CT, 2009. 394 p.
14. *Каплан И. Г.* Введение в теорию межмолекулярных взаимодействий. М. : Наука, 1982. 312 с.
15. *Гирифельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р.* Молекулярная теория газов и жидкостей. М. : Изд-во иностр. лит., 1961. 931 с.
16. *Ефимов Ю. Я.* О влиянии геометрии водородного мостика на колебательные спектры воды : простейшие модели потенциала Н-связи // Журн. структурной химии. 2008. Т. 49, № 2. С. 265–273.

УДК 535.015; 53.06; 617.7; 616-073.756.8(04); 617.713-085; 617.741-089; 57.085.1

ВЛИЯНИЕ 40%-ГО РАСТВОРА ГЛЮКОЗЫ НА СТРУКТУРУ РОГОВИЦЫ ЧЕЛОВЕКА

А. С. Орлова¹, А. Н. Башкатов², Э. А. Генина², И. О. Колбнев¹, И. Д. Каменских¹, Т. Г. Каменских¹, В. В. Тучин^{2,3,4}

¹Саратовский государственный медицинский университет им. В. И. Разумовского

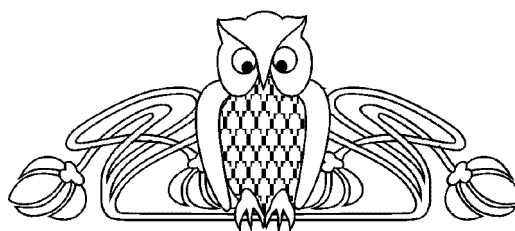
²Саратовский государственный университет

E-mail: eagenina@yandex.ru

³Институт проблем точной механики и управления РАН, Саратов

⁴Университет Оулу, Финляндия

Эффективное лечение больных с послеоперационным отеком роговицы является одной из актуальных проблем офтальмологии. В статье представлены результаты комплексного мониторинга влияния 40%-го раствора глюкозы на состояние нормальной и отёчной роговицы после факоэмульсификации катаракты на основе данных конфокальной микроскопии и оптической когерентной томографии. Показано, что раствор глюкозы вызывает кратковременное набухание здоровой роговицы и дегидратацию отёчной роговицы, а



также оптическое просветление биоткани в обоих случаях. Исследовано влияние раствора глюкозы на состояние эпителиального и эндотелиального слоёв роговицы. Полученные результаты позволяют расширить возможности мониторинга структурных и оптических параметров роговицы в процессе лечения.

Ключевые слова: управление оптическими свойствами биотканей, оптическая когерентная томография, конфокальная микроскопия, роговица, катаракта, глюкоза.