

**ИЗУЧЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИКИ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ
МЕСТНЫХ АНЕСТЕТИКОВ С КЕПЛЕРАТОМ {Mo₁₃₂}***Гасимова А.Ф.⁽¹⁾, Ельцов О.С.⁽¹⁾, Ким Г.А.⁽²⁾, Гржегоржевский К.В.⁽¹⁾*⁽¹⁾ Уральский федеральный университет

620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

⁽²⁾ Институт органического синтеза УрО РАН

620137, г. Екатеринбург, ул. Софьи Ковалевской, д. 22

Взаимодействие кеплерата {Mo₁₃₂} с местными анестетиками – лидокаином, бупивакаином, и артикаином, содержащими в своей структуре общий амидный фрагмент и различные периферийные заместители, является интересной задачей в целях изучения нековалентных взаимодействий и процессов молекулярного распознавания, а также установления корреляций между структурой лигандов и их сродством к поверхности кеплерата.

Целью данной работы является определение термодинамических констант связывания местных анестетиков (лидокаина, бупивакаина и артикаина) с кеплератом {Mo₁₃₂} в водных растворах, а также установление природы межмолекулярных взаимодействий в образующихся супрамолекулярных ансамблях.

Для изучения взаимодействия кеплерата {Mo₁₃₂} с местными анестетиками использованы методы электронной спектроскопии поглощения (UV-Vis) и ЯМР-титрования, а для системы с артикаином – дополнительно применена флуоресцентная спектроскопия. При добавлении анестетиков к раствору {Mo₁₃₂} в спектрах поглощения наблюдался батохромный сдвиг, что свидетельствует об изменении электронной структуры и формировании ассоциатов. В случае артикаина – взаимодействие с {Mo₁₃₂} сопровождалось выраженным тушением флуоресценции лиганда, что также указывает на образование комплекса. Константа связывания была определена на основе анализа зависимости интенсивности флуоресценции с использованием уравнения Штерна–Фольмера.

Дополнительная информация о механизме взаимодействия получена методом ЯМР-титрования. Последовательное добавление {Mo₁₃₂} к растворам анестетиков сопровождалось изменениями химических сдвигов протонов ароматических и алкильных фрагментов, а также уширением сигналов, что указывает на участие данных функциональных групп в процессах связывания. Анализ зависимости химического сдвига от концентрации позволил определить константы связывания и подтвердить стехиометрию образующихся комплексов.

Исследование выполнено в рамках работ по РНФ № 23-73-10158.