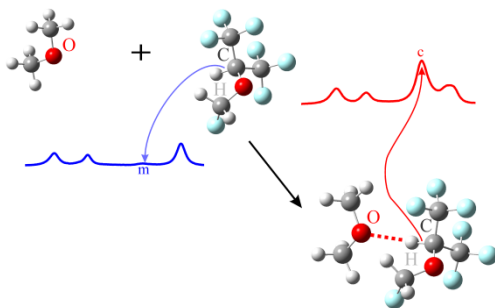


Колебательная спектроскопия современных летучих анестетиков и их взаимодействий с «таргетными» молекулами.

Физический факультет, кафедра молекулярной спектроскопии, Санкт-Петербургский Гос Университет

Благоприятный исход в инвазивной хирургии во многом определяется применением летучих анестетиков, обладающих высокой эффективностью и вместе с тем малой токсичностью. Одной из основных задач, решаемых при использовании таких соединений, является результативная и достаточно длительная блокировка болевых синдромов. Физико-химический механизм действия анестетиков все еще до конца не изучен. Тем не менее, очевидно, что действие каждого анестетика необходимо рассматривать на молекулярном уровне, с учетом межмолекулярных взаимодействий обратимого характера. Наиболее вероятными кандидатами для таких взаимодействий являются водородная связь, чаще всего типа C-H...B (B=O, N, Hal) и, дополнительно, ван дер Ваальсовы контакты между отдельными атомами анестетиков и молекул – мишеней. Большой класс современных летучих анестетиков представляет собой галогензамещенные углеводородов и эфиров. При наличии тяжелых галогенов (хлор, бром, йод) в образовании связи с молекулой-мишенью (белком) может принимать участие и т.н. галогенная связь C-Hal...B. (Hal=Cl, Br, I). Для исследования особенностей таких взаимодействий мощным и достаточно универсальным инструментом оказывается колебательная, в частности инфракрасная спектроскопия. Причем, в силу относительной слабости взаимодействий, наиболее перспективным следует признать метод криоспектроскопии, основанный на исследованиях в условиях термодинамического равновесия, в низкотемпературных растворах в сжиженных благородных газах. В течение последних двух лет авторам, с использованием, данной методики, удалось получить принципиально новые данные по конформационному составу, проявлениям колебательных резонансов, и особенностям невалентных взаимодействий с модельной кислородсодержащей мишенью – диметиловым эфиром таких востребованных ингаляционных анестетиков как: изофлюран, метоксифлюран и севофлюран



Образование комплекса севофлюран - диметиловый эфир.

1. S.M. Melikova, K.S. Rutkowski, M. Rospenk, Noncovalent interactions between isoflurane and dimethyl ether. Spectroscopic evidence of trimer formation, Spectrochim. Acta 223 (2019) 117363 <http://dx.doi.org/10.1016/j.saa.2019.117363>
2. S.M. Melikova, K.S. Rutkowski, M. Rospenk, IR cryospectroscopic evidence of complex formation between methoxyflurane and dimethyl ether in liquid Xe, Chem. Phys. Lett., 2020, 742, 137134 <http://dx.doi.org/10.1016/j.cplett.2020.137134>
3. S.M. Melikova, K.S. Rutkowski, M. Rospenk, Evidence of noncovalent interactions between sevoflurane and dimethyl ether. FTIR cryospectroscopic and ab initio studies, J. Mol. Struct., 2020, 1221, 128852 <http://dx.doi.org/10.1016/j.molstruc.2020.128852>