

# Bioaktyviųjų joninių skysčių BMR tyrimas

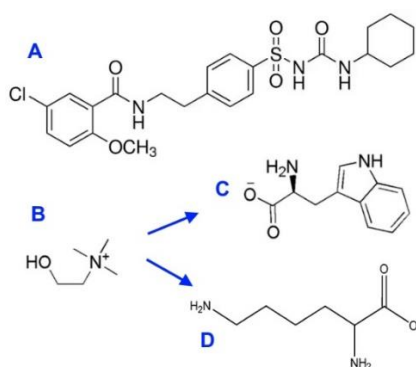
## NMR study of bioactive ionic liquids

Lukas Mikalauskas<sup>1</sup>, Vytautas Klimavičius<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Vilniaus universitetas, Fizikos fakultetas, Cheminės fizikos institutas  
Saulėtekio al. 3, LT-10257 Vilnius  
[lukas.mikalauskas@ff.stud.vu.lt](mailto:lukas.mikalauskas@ff.stud.vu.lt)

Kambario temperatūros joniniai skysčiai (Room Temperature Ionic Liquids – RTIL) yra vadinamos organinės druskos, kurių lydymosi temperatūra yra < 100 °C. Keičiant įvairias anijono ir katijono posistemų kombinacijas galima derinti jų fizikines ir chemines savybes. Tokių kombinacijų yra labai daug, todėl RTIL yra vadinami „programuojamomis“ medžiagomis. Dėl mažo garų slėgio yra laikomi žaliaisiais tirpikliais. Visa tai lemia labai plačias RTIL pritaikymo galimybes – nuo maisto, chemijos pramonės iki energetikos ar kitų technologinių taikymų. [1]. Viena iš įdomesnių RTIL klasių yra bioaktyvieji RTIL (b-RTIL). [2] B-RTIL yra suderinami su gyvaisiais organizmais arba gali su jais sąveikauti, gali būti pritaikyti vaistų sintezėje, kaip vaistų nešikliai (*drug delivery systems*), kaip vaistų komponentai ir kita. Taip pat net nedideli kiekiai b-RTIL gali smarkiai padidinti netirpių ar menkai tirpių medžiagų tirpumą vandenyje. Daug cheminių junginių, kurie yra aktyviosios vaistų medžiagos, pasižymi žemu tirpumu vandenyje, tačiau tai yra būtina medicininiams taikymams. [2] Viena iš tokių medžiagų yra glibenklamidas (Gli, C<sub>23</sub>H<sub>28</sub>ClN<sub>3</sub>O<sub>5</sub>S) (1 pav.), kuri yra aktyvioji medžiaga naudojama vaistuose, skirtuose gydyti II-tipo diabetą.

Cholino Triptofanatas ([Ch][Try]) ir Cholino Lizinatas ([Ch][Lys]) yra b-RTIL (1 pav.), kurie yra sudaryti iš cholino katijono ir atitinkamai iš triptofano ir lizino anijonų.

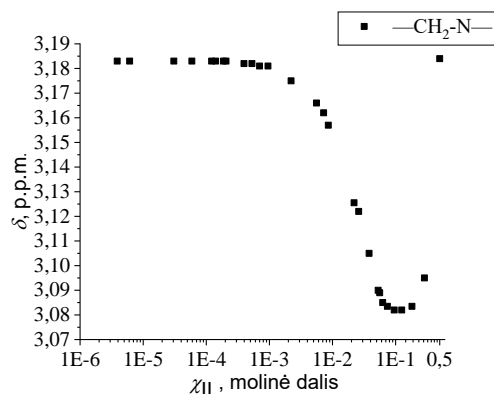


1 pav. Tirtosios medžiagos: A – Glibenklamidas (Gli), B – Cholino katijonas ([Ch]), C – Triptofano anijonas ([Try]), D – Lizinato anijonas ([Lys]).

Šie b-RTIL sudarytas iš tik bioaktyviųjų sudedamųjų dalių – cholinas yra ląstelių membranos komponentas ir dalyvauja gyvųjų organizmų metabolizmo procesuose. Triptofanas ir lizinas yra amino rūgštys, svarbios baltymų

biosintezėje. Norint tokias b-RTIL savybes panaudoti medicininiams taikymams, svarbu suprasti ten vykstančius procesus molekuliniam lygmenyje. Vienas iš eksperimentinių metodų tai padaryti yra Branduolių Magnetinio Rezonanso (BMR) spektroskopija.

Taikant <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C 1D ir 2D aukštosios skyros BMR metodus buvo atliktas spektrinis priskyrimas tirtiesiems b-RTIL. <sup>1</sup>H BMR parametrų kitimas buvo įvertintas plačiame koncentracijų intervale ( $\chi_{IL} = 1 \cdot 10^{-6}$  ir  $\chi_{IL} \approx 1$  molinės dalies, mol. d.) [Ch][Lys] ir [Ch][Try] vandeniniuose tirpaluose. Nustatyta, kad cholino katijono protonų cheminio poslinkio vertės [Ch][Lys] tirpale pasiekia sotį ties  $\chi_{IL} = 2 \cdot 10^{-4}$  mol. d., o [Ch][Try] tirpale ties  $\chi_{IL} = 2,5 \cdot 10^{-4}$  mol. d. Triptofano anijono protonų cheminis poslinkis nekinta žemesnėse nei  $\chi_{IL} = 5 \cdot 10^{-5}$  mol. d. koncentracijose. Tuo tarpu lizinato anijono cheminio poslinkio vertės nepasiekia įsisotinimo tirtosiose koncentracijose. Buvo registruotas cholino katijono protonų cheminio poslinkio vertės minimumas ties  $\chi_{IL} = 0,1$  mol.d. (2 pav.).



2 pav. Cholino katijono CH<sub>2</sub>-N— protono cheminio poslinkio kitimas [Ch][Try/Lys] vandeniniame mišinyje.

Galiausiai buvo įvertintas Gli tirpumas [Ch][Lys] ir [Ch][Trp] vandeniniuose tirpaluose – nustatyta, kad abu b-RTIL padidina Gli tirpumą vandenyje.

Tyrimams finansavimą skyrė Lietuvos mokslo taryba (LMTLT), sutarties Nr. S-MIP-22-74.

*Reikšminiai žodžiai:* BMR, bioaktyvus joninis skystis, b-RTIL, glibenklamidas, tirpumas, cheminis poslinkis.

### Literatūra

- [1] *Chem. Rev.* 2017, 117, 10, 6633-6635.
- [2] *Chem. Rev.* 2017, 117, 10, 7132-7189.