**Термодинамика комплексообразования 18-краун-6 с *L*-карнозином,**

***β*-аланином и гистидином в воде и в водно-этанольном растворителе**

***Сатурина Е.В.***

*Студентка, 3 курс бакалавриата*

*Ивановский государственный химико-технологический университет,*

*Иваново, Россия*

*E-mail: kate.ks754@gmail.com*

Изучение модельных биологических процессов «гость-хозяин» между пептидами, аминокислотами и краун-эфирами позволяет понять природу молекулярного распознавания в живых системах. Методом изотермической калориметрии титрования изучены реакции молекулярного связывания L-карнозина (L-Carn), β-аланина(β-Ala) и гистидина (His) с краун-эфиром18-краун-6 (18К6) в воде и в водно-этанольном растворителе с содержанием этанола 0.1 мольной доли при T = 298.15  K. Теплоты смешения растворов аминокислот с растворами 18-краун-6 определяли на калориметрической системе титрования ТАМ III (TA Instruments).

Из термохимических данных рассчитаны термодинамические параметры реакции образования молекулярного комплекса [L-Carn 18К6]. Молекулярное комплексообразование краун-эфиров с аминокислотами и пептидами в воде характеризуется низкой устойчивостью комплексов и незначительной экзотермичностью комплексообразования. Комплексообразование L-Carn с 18К6 не является исключением.

Сравнительный анализ термодинамических параметров реакций образования молекулярных комплексов 18К6 с L-Carn и с Ala показывает, что наличие в структуре   
L-Carn гистидинового фрагмента приводит к повышению устойчивости молекулярного комплекса L-Carn с 18К6 и к уменьшению экзотермичности комплексообразования. Устойчивость комплексов [L-Carn 18К6], [His 18К6] и [Phe 18К6] имеет близкие значения, однако экзотермичность комплексообразования [Phe 18К6] выше, чем [L-Carn 18К6], [His 18К6] и [Ala 18К6].

Еще одной отличительной особенностью термодинамики реакций образования молекулярных комплексов 18К6 с L-Carn и His, имеющими в своей структуре остаток имидазола, является положительное значение энтропийного вклада в изменение энергии Гиббса комплексообразования.

Комплексообразование 18К6 с алифатическими аминокислотами (Val, Ile, Met, Pro) характеризуется положительным изменениями энтропии, что вызвано перегруппировками растворителя в результате дегидратации взаимодействующих частиц и гидрофобными эффектами.

Напротив, комплексы 18K6 с полярными и ароматическими аминокислотами характеризуются отрицательными изменениями энтальпии и энтропии комплексообразования за счет межмолекулярной водородной связи между полярными группами «гостя» и «хозяина». Можно предположить, что положительные значения энтропии при комплексообразовании [L-Carn 18К6] обусловлены аналогичными причинами.

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (FZZW-2023-0008) с использованием ресурсов Центра совместного использования научного оборудования ИГХТУ (грант № 075-15-2021-671).*