

ΜΕΛΕΤΗ ΤΗΣ ΔΟΜΗΣ ΚΑΙ ΤΗΣ ΔΥΝΑΜΙΚΗΣ ΥΔΑΤΙΚΩΝ ΔΙΑΛΥΜΑΤΩΝ ΝΟΡΣΠΕΡΜΙΔΙΝΗΣ ΜΕΣΩ ΑΚΟΥΣΤΙΚΗΣ ΦΑΣΜΑΤΟΣΚΟΠΙΑΣ

Σ. Τσιγκόϊας¹, Μ. Γ. Παπανικολάου², Θ. Α. Καμπανός², Α. Γ. Καλαμπούνιας^{1,3,*}

¹ Εργαστήριο Φυσικοχημείας, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, 45110, Ιωάννινα, Ελλάδα

² Τομέας Ανόργανης και Αναλυτικής Χημείας, Τμήμα Χημείας, Πανεπιστήμιο Ιωαννίνων, 45110, Ιωάννινα Ελλάδα

³ Πανεπιστημιακό Ερευνητικό Κέντρο Ιωαννίνων (URCI), Ινστιτούτο Επιστήμης Υλικών και Υπολογιστών, Ιωάννινα, Ελλάδα

* akalamp@uoi.gr

ΠΕΡΙΛΗΨΗ

Η Νορσπερμιδίνη (NSpd) είναι μια πολυαμίνη με μοριακό τύπο $(\text{NH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2\text{CH}_2)_2\text{NH}$. Σαν ένωση έχει προσδιοριστεί στα βακτήρια, σε μερικά είδη φυτών και σε φύκια και είναι κυρίως γνωστή για την αντικαρκινική της δράση.^[1,2] Σε αυτή τη δουλειά παρουσιάζεται μια *in situ* μελέτη φασματοσκοπίας χαλάρωσης του υπερήχου σε μια προσπάθεια προσδιορισμού των δομικών αλλαγών και της δυναμικής που συμβαίνουν όταν η Νορσπερμιδίνη (NSpd) διαλύεται στο νερό. Ο στόχος μας είναι να διευκρινίσουμε το μηχανισμό που είναι υπεύθυνος για τον παρατηρούμενο μηχανισμό χαλάρωσης στα ακουστικά φάσματα και να υπολογίσουμε τις αντίστοιχες θερμοδυναμικές παραμέτρους και τη σχετική αλλαγή του όγκου. Τα πειραματικά φάσματα των υδατικών διαλυμάτων της NSpd αποκάλυψαν έναν και μοναδικό μηχανισμό χαλάρωσης τύπου Debye που αποδίδεται στην αντίδραση μεταφοράς πρωτονίων. Η εξάρτηση από τη συγκέντρωση και τη θερμοκρασία των ακουστικών παραμέτρων υποστηρίζει αυτή την απόδοση. Υπολογίστηκαν η ενθαλπία ενεργοποίησης και η εντροπία να είναι ίσες με $\Delta H^* = 1.79 \pm 0.20 \text{ kcal mol}^{-1}$ και $\Delta S^* = -18.31 \pm 0.73 \text{ cal mol}^{-1} \text{ K}^{-1}$, αντίστοιχα. Η εξάρτηση από τη συγκέντρωση και τη θερμοκρασία της ταχύτητας του ήχου και της απορρόφησης του υπερήχου στα διαλύματα αναδεικνύουν χαρακτηριστικές λειτουργίες που σχετίζονται με αλλαγές στην ακαμψία του δικτύου λόγω των μεταβολών των αλληλεπιδράσεων των δεσμών υδρογόνου σε μοριακό επίπεδο.^[3] Εκτιμήθηκε και συγκρίθηκε η μεταβολή του όγκου που σχετίζεται με την αντίδραση μεταφοράς πρωτονίων για την NSpd με τη μεταβολή του όγκου που παρατηρήθηκε για μια ανάλογη γουανιδίνη, την 1,1,3,3 tetramethyl guanidine.^[4] Τα αποτελέσματα που λάβαμε συζητούνται στο πλαίσιο ενός υπάρχοντος θεωρητικού δομικού μοντέλου που υπογραμμίζει την ισχυρή μοριακή σύνδεση σε αυτά τα υγρά μίγματα που οδηγεί σε συμπληρωματικές πληροφορίες για τη δομή και τη δυναμική των αμινών γουανιδίνης. Τέλος παρουσιάζεται και συζητείται λεπτομερώς ένα ολοκληρωμένο μοντέλο όλων των διαδικασιών χαλάρωσης.^[3]

ΛΕΞΕΙΣ ΚΛΕΙΔΙΑ: Φασματοσκοπία Αποκατάστασης Υπερήχων, Νορσπερμιδίνη, pulse-echo, Γουανιδίνες, Μεταφορά Πρωτονίων.

ΑΝΑΦΟΡΕΣ

[1] N. J. Prakash, T. L. Bowlin, G. F. Davis, P. S. Sunkara, A. Sjoerdsma. 1988. *Anticancer Res.* **8** 563

[2] P. S. Sunkara, J. H. Zwolshen, N. J. Prakash, T. L. Bowlin. 1988. *Adv. Exp. Med. Biol.* **250** 707

[3] S. Tsigoiias, M. G. Papanikolaou, T. A. Kabanos, A. G. Kalampounias. 2021. *J. Phys.: Condens. Matter.* **33** 495104.

[4] S. Tsigoiias, C. Kouderis, A. Mylona-Kosmas, S. Boghosian, A. G. Kalampounias. 2020. *Spectrochim. Acta A.* **229** 117958.