

Рис. Структура L в кристалле

В ЯМР ^1H -спектрах растворов комплексов диамагнитных Cd(II) и Cu(I) наблюдали отсутствие сигналов протонов группы OH (9,93 мд) и $\text{NH}_{\text{цикл}}$ (11,6 мд), которые имеются в спектре L. Указанный факт свидетельствует в пользу реализации азометинового изомера лиганда в составе указанных комплексов (схема 1). Это согласуется с результатами изучения комплексов методами ЭСП- и ИК-спектроскопии.

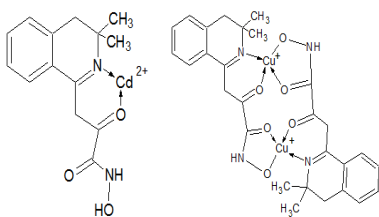


Схема 1

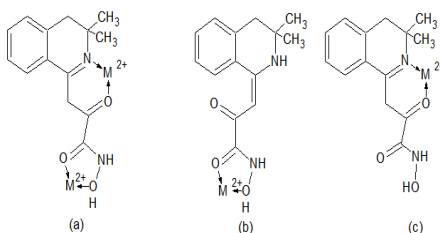


Схема 2

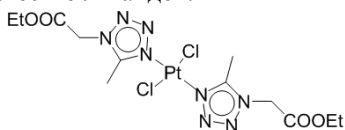
На схеме 2 представлено наиболее вероятное строение комплексов Cu(II) и Co(II) с L.

Количественные исследования взаимодействий ДНК и сывороточного альбумина с *транс*-комплексами Pt(II) , Pd(II) с производными тетразолилуксусных кислот в качестве лигандов

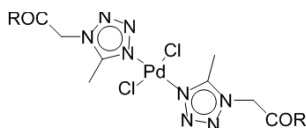
А. В. Протас, Е. А. Попова, О. В. Миколайчук, Р. Е. Трифионов
Санкт-Петербургский Государственный Университет,
Санкт-Петербург, Россия, e-mail: aleksandra.protas@mail.ru

Тетразолсодержащие координационные соединения ионов металлов платиновой группы являются перспективными соединениями, проявляющими противоопухолевую активность [1]. В данном



исследовании с помощью анализа CHN, HRESI-MS, ^1H и $^{13}\text{C}\{^1\text{H}\}$ ЯМР и ИК-спектроскопии охарактеризованы две серии комплексов Pd(II) и Pt(II), содержащих сложные эфиры, амиды тетразолилуксусных кислот в качестве лигандов.

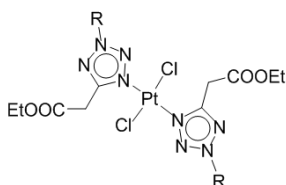


1

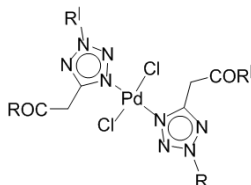


R = OH (2), OEt (3), OBu (4), O^tBu (5)


NH₂ (6), NH^tBu (7), NH- (8), NH- (9)



R = ^tBu (10), CH₂CH₂OH (11)



R = ^tBu (12), CH₂CH₂OH (13),

R = ^tBu, R' = NH- (15)

Взаимодействие между металлокомплексами с ДНК и бычьим сывороточным альбумином определяли экспериментально (УФ-спектроскопия, флуориметрические и электрофоретические методы) и теоретически (молекулярный докинг). В соответствии с полученными данными, константы связывания (K_b) всех металлокомплексов показывают высокую аффинность связывания с ДНК. Однако в случае комплексов платины это сродство несколько выше ($K_b = 2,58 \div 5,93 \times 10^5 \text{ M}^{-1}$ для комплексов Pd(II) и $K_b = 8,82 \div 13,30 \times 10^5 \text{ M}^{-1}$ для комплексов Pt(II)). Эффективность взаимодействия БСА с изученными комплексами металлов подтверждается соответствующими константами связывания (K_{bin}), которые находятся в оптимальном диапазоне ($K_{bin} = 0,83 \div 4,12 \times 10^5 \text{ L M}^{-1}$). Исследования методом молекулярного докинга согласуются с экспериментальными данными.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (грант 17-13-01124).

Список литературы

1. Е. А. Попова, А. В. Протас, Р. Е. Трифонов. *Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry*. 2017, 17. DOI: 10.2174/1871520617666170327143148.