

# Комплексы хлорида и иодида цинка (II) с карбамидом: синтез, характеристика и биологическая активность

Рукк Н.С.<sup>1</sup>, Красноперова В.Н.<sup>1</sup>, Давыдова Г.А.<sup>2</sup>, Ретивов В.М.<sup>3</sup>, Белусь С.К.<sup>3</sup>, Волков П.А.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Московский технологический университет (ИТХТ им. М.В. Ломоносова), кафедра неорганической химии имени А.Н. Реформатского

<sup>2</sup>Институт Теоретической и Экспериментальной Биофизики РАН (ИТЭБ РАН)

<sup>3</sup>НИЦ "Курчатовский институт" - ИРЕА

e-mail: roukkn@inbox.ru, v-ki

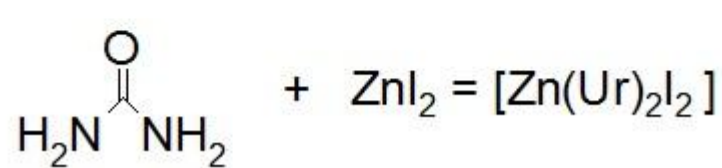
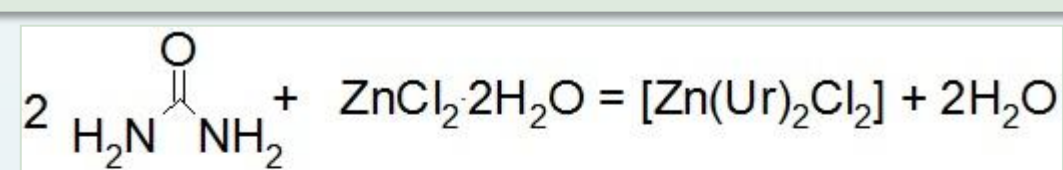
## Актуальность исследования

Ранее было проведено исследование комплексов галогенидов переходных металлов с кофеином, поэтому есть реальный интерес в сравнении не только строения комплексов карбамида и кофеина, но и их цитотоксичности.

## Цель работы

Изучить строение, свойства комплексов хлорида и иодида цинка с карбамидом, провести сравнение литературных и экспериментальных данных.

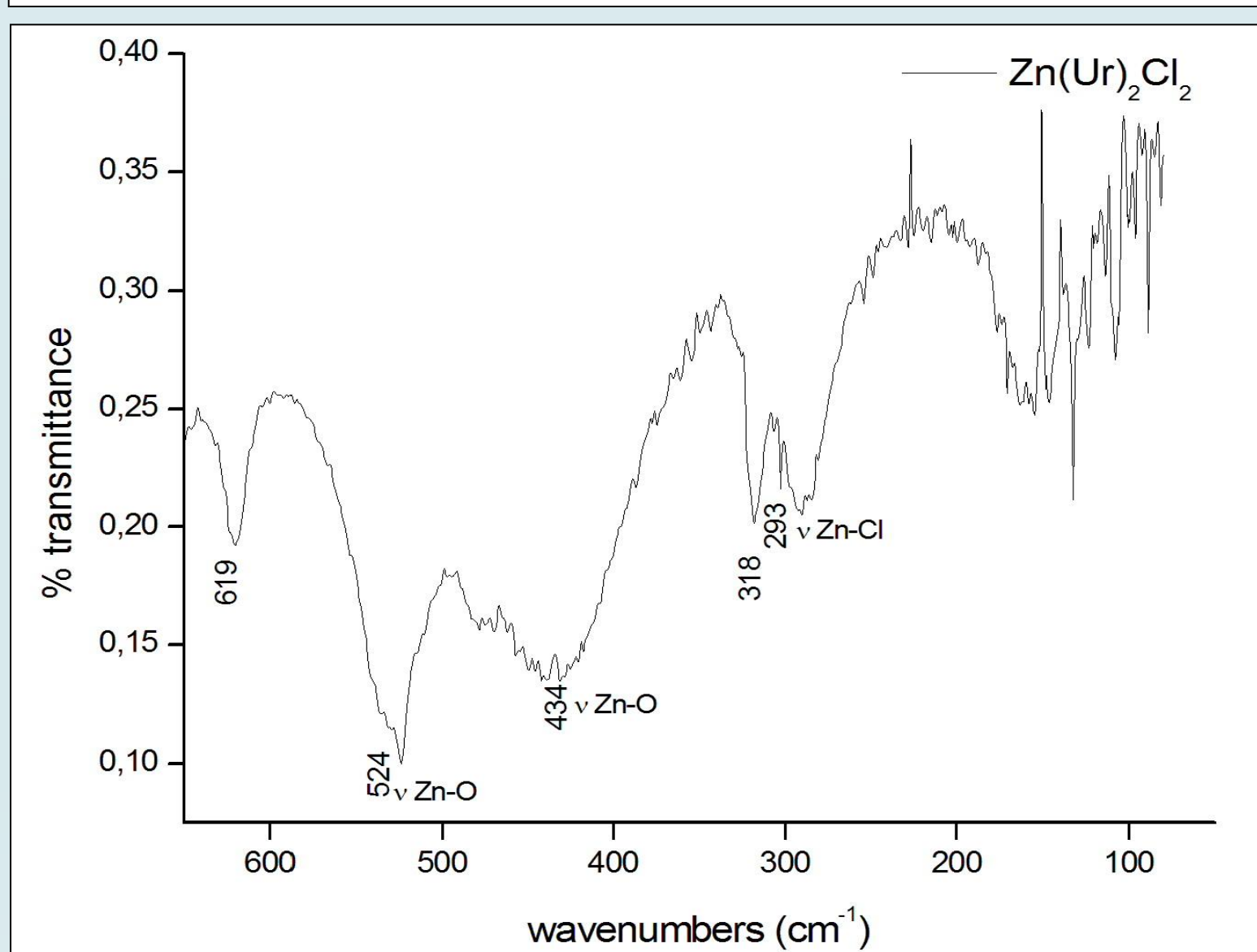
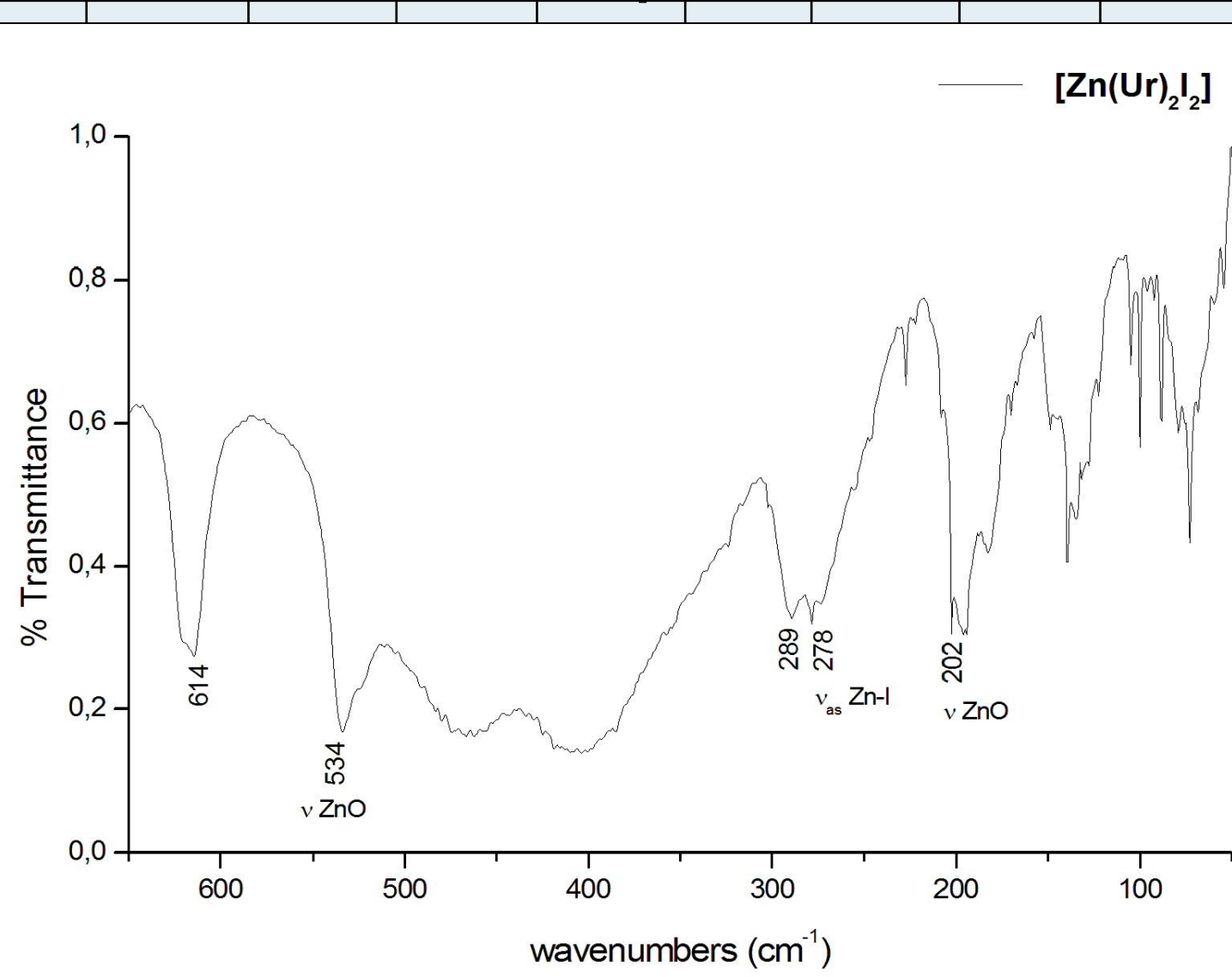
## Схема синтеза



## Результаты элементного анализа

Соединение	C, масс.%		N, масс.%		H, масс.%		Zn, масс.%		Cl, масс.%	
	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.
$[\text{Zn}(\text{C}_2\text{H}_4\text{N}_2\text{O})\text{Cl}_2]$	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.
Zn:Ur:Cl = 1:2:2	9,36	9,41	21,84	21,45	3,12	3,88	25,50	24,94	27,69	27,83
M, г/моль: 256,39										
Соединение	C, масс.%		N, масс.%		H, масс.%		Zn, масс.%		I, масс.%	
	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.
$[\text{Zn}(\text{C}_2\text{H}_4\text{N}_2\text{O})\text{I}_2]$	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.
Zn:Ur:I = 1:2:2	5,46	5,47	12,75	12,81	1,83	1,79	14,89	14,88	57,79	57,76
M, г/моль:										

## ИК-спектроскопия

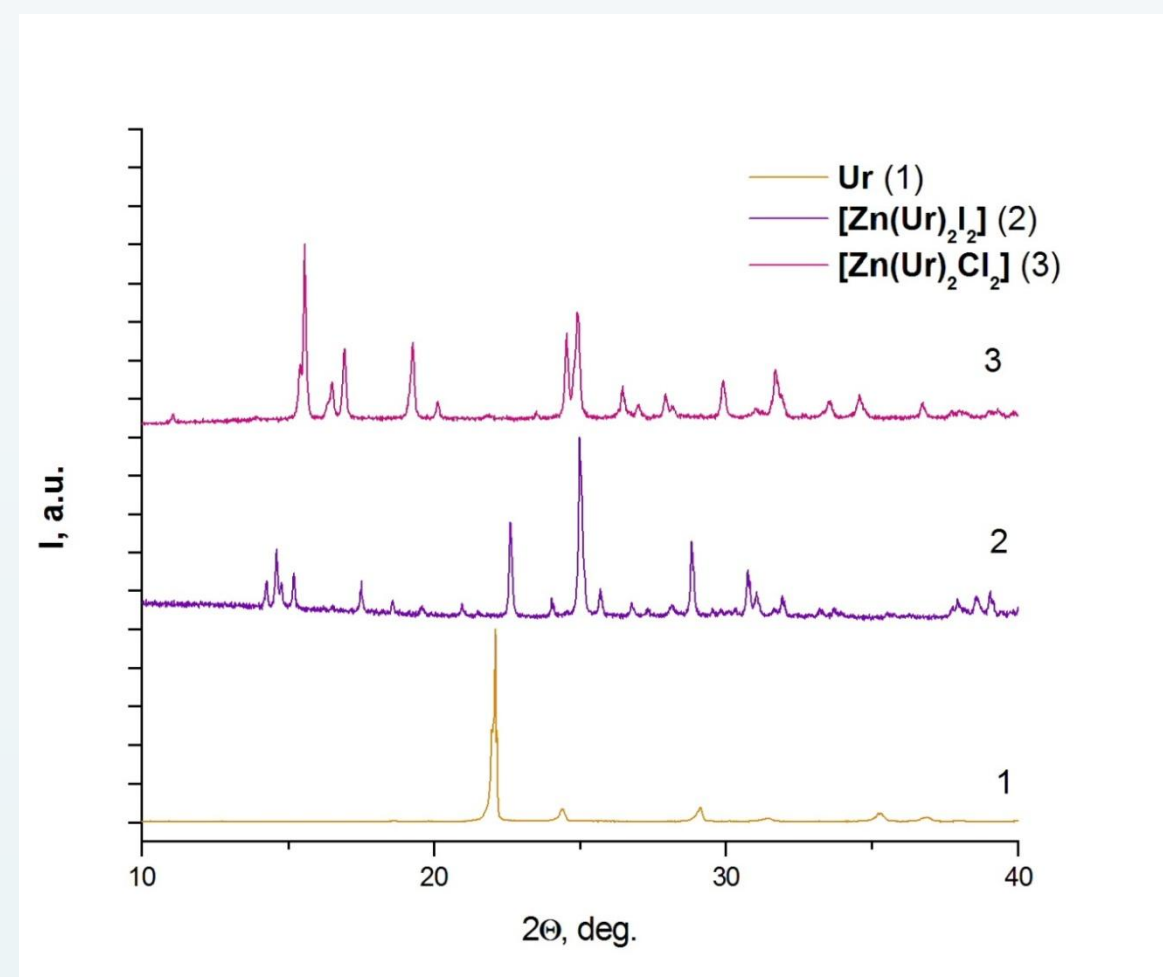


## Список литературы

- Mallela R., Konakanchi R., Guda R. et al. Zn(II), Cd(II) and Hg(II) metal complexes of 2-aminonicotinaldehyde: Synthesis, crystal structure, biological evaluation and molecular docking study // Inorg. Chim. Acta. 2018. V. 469. P. 66–75.
- Фурманова Н.Г., Реснянский В.Ф., Сулайманкулов К.С., и др. Кристаллическая структура комплекса хлорида цинка с карбамидом  $\text{ZnCl}_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2$  // Кристаллография. 1998. Т.43. Вып. 2. С. 269-271.
- Фурманова Н.Г., Реснянский В.Ф., Сулайманкулов К.С., и др. Кристаллическая структура комплекса иодида цинка с карбамидом  $\text{ZnI}_2 \cdot 2\text{CO}(\text{NH}_2)_2$  // Кристаллография. 2001. Т.46. Вып. 1. С. 58-62.

## Физико-химические исследования

### Рентгенофазовый анализ

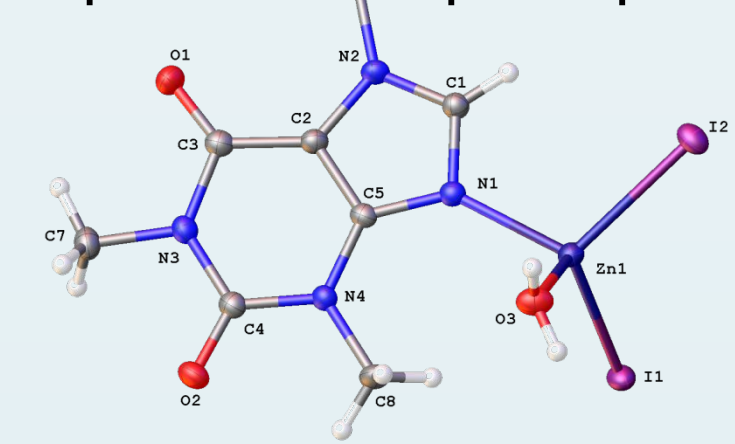
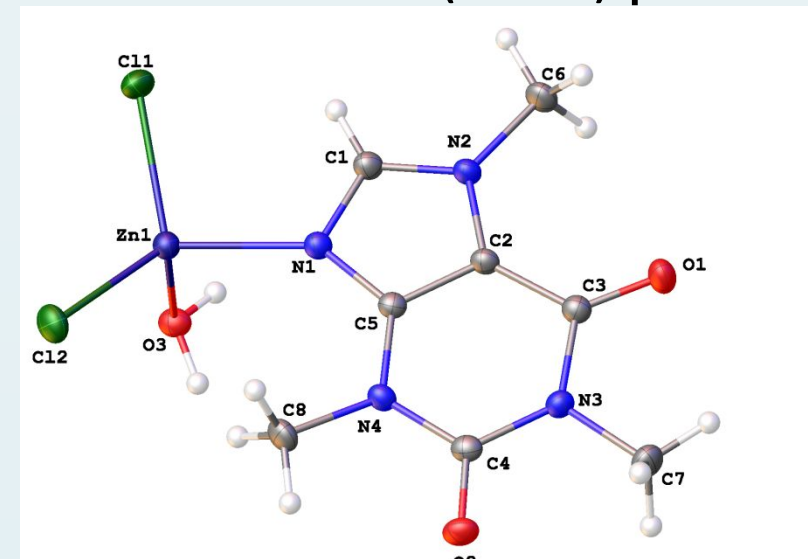


Порошковые дифрактограммы образцов подтверждают однофазность полученных комплексов, не содержащих примесей исходных веществ.

Рентгеновский дифрактометр Bruker D8 Advance, Cu Kα-излучение, Ni-фильтр,  $2\Theta=5-80^\circ$ , шаг  $0.01125^\circ$

### Рентгеноструктурный анализ

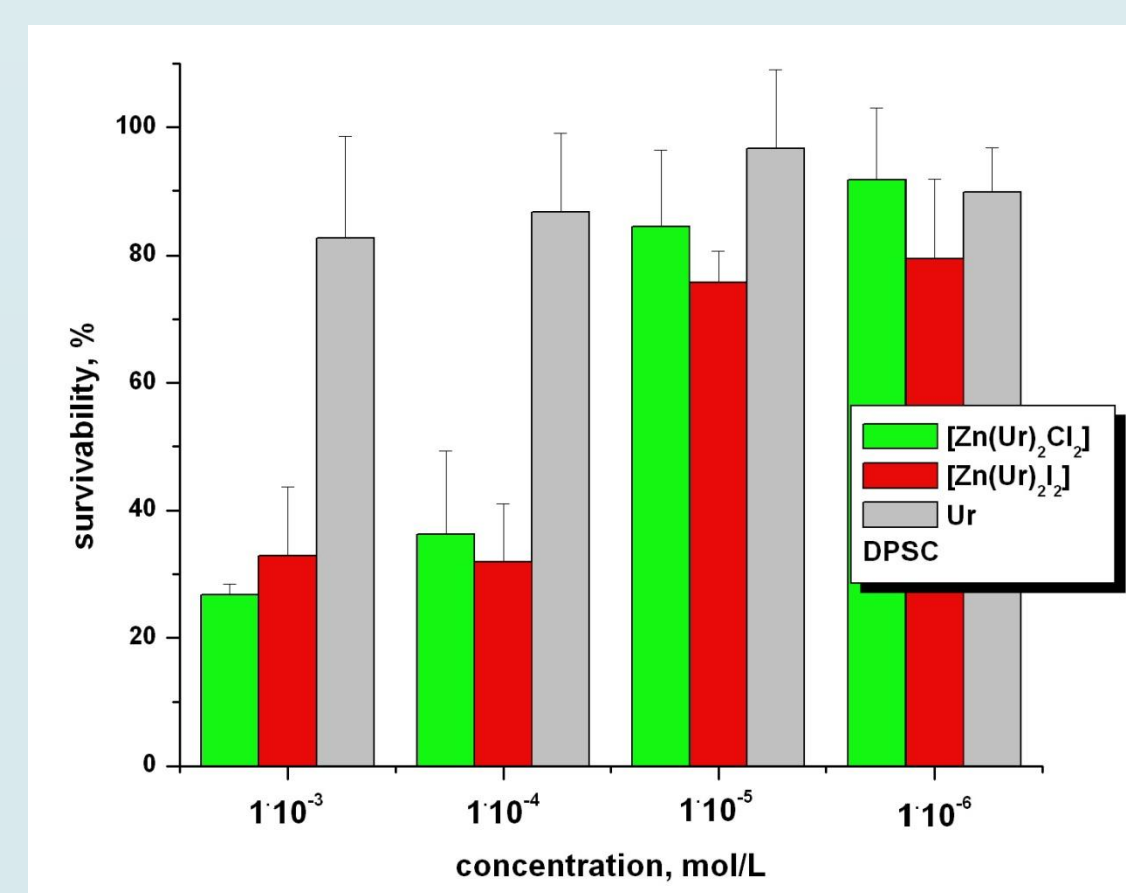
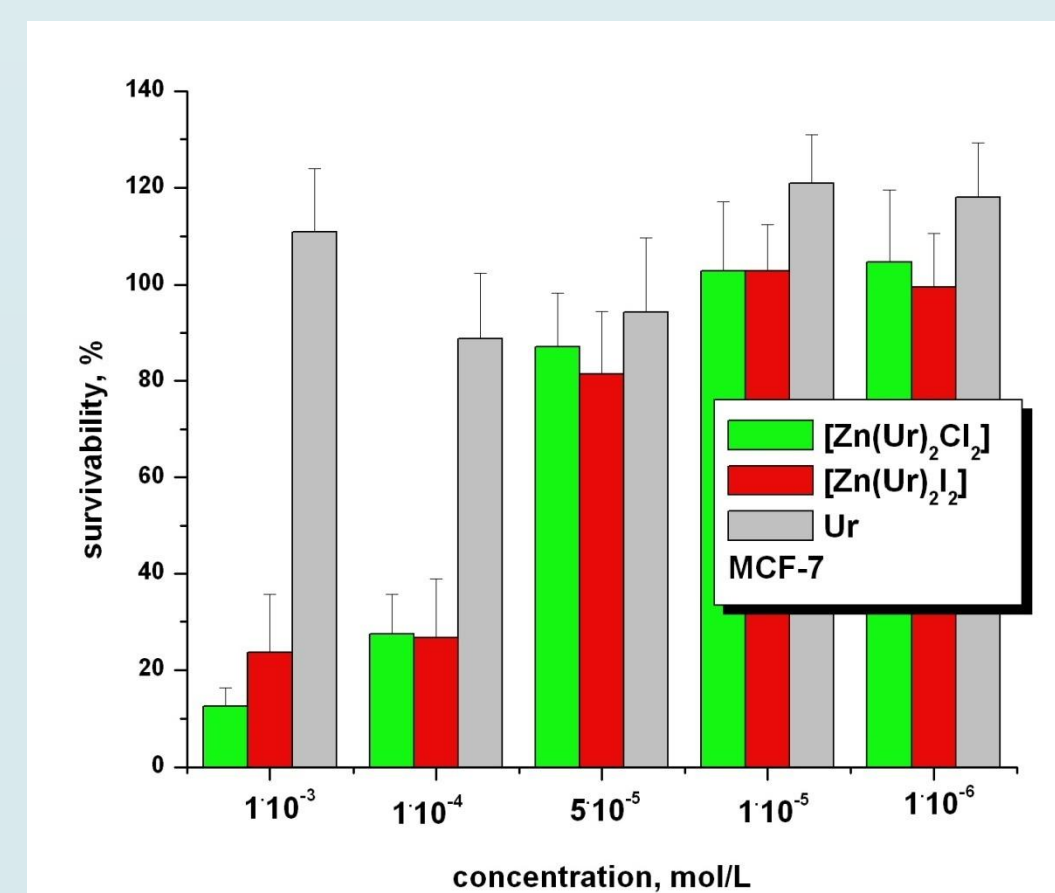
Индексирование рентгенограмм с помощью программы FullProf продемонстрировало отсутствие примесей в выделенных соединениях, а также близкое соответствие расчетных и экспериментальных (PCA) рентгенографических характеристик.



Рентгенографические характеристики:  
 $[\text{Zn}(\text{C}_2\text{H}_4\text{N}_2\text{O})\text{Cl}_2]$   
Триклинная сингония, Пр. гр.  $P1\bar{1}$ ,  $Z = 2$   
 $a = 6.275(7)$ ,  $b = 6.835(5)$ ,  $c = 11.862(12)$  Å,  
 $\alpha = 79.19(9)$ ,  $\beta = 72.31(2)$ ,  $\gamma = 67.21(7)^\circ$   
(Фурманова Н.Г. и др. Кристаллография, 1998, т. 43. №2. с. 269-271.)

Рентгенографические характеристики:  
 $[\text{Zn}(\text{C}_2\text{H}_4\text{N}_2\text{O})\text{I}_2]$   
Моноклиная сингония, Пр. гр.  $P2_1/a$ ,  $Z = 4$   
 $a = 12.694(3)$ ,  $b = 6.886(2)$ ,  $c = 13.161(3)$  Å,  $\beta = 110.58(2)^\circ$   
(Фурманова Н.Г. и др. Кристаллография, 2001, т. 46. №1. с. 58-66.)

## Изучение цитотоксичности



## Результаты и выводы

- Синтезированы и идентифицированы молекулярные комплексы состава  $[\text{Zn}(\text{Ur})_2\text{X}_2]$  ( $\text{X} = \text{Cl}, \text{I}$ ).
- Выделенные соединения проявили дозозависимую активность по отношению как к стволовым клеткам зубной пульпы (DPSC, dental pulp stem cells), так и к раковым клеткам MCF-7.
- В наибольшей степени цитотоксичность комплексов проявляется при концентрациях  $c = 1 \cdot 10^{-4} - 1 \cdot 10^{-3}$  моль/л.
- В области концентраций  $c = 1 \cdot 10^{-6} - 1 \cdot 10^{-3}$  моль/л карбамид не оказывает угнетающего воздействия на клетки.
- В области концентраций  $c = 1 \cdot 10^{-4} - 1 \cdot 10^{-3}$  моль/л цитотоксичность соединений по отношению к раковым клеткам, в сравнении со стволовыми клетками, оказалась более выраженной, подобно тому, как это имело место для ранее изученного комплекса хлорида цинка с кофеином  $[\text{Zn}(\text{caf})(\text{H}_2\text{O})\text{Cl}_2]$  при  $c = 5 \cdot 10^{-4} - 1 \cdot 10^{-3}$  моль/л.