Комплексы хлорида и иодида цинка (II) с карбами синтез, характеристика и биологическая активн

МИРЭА Московский технологический университет
МИТХТ
ИТХТ имени М.В. Ломоносова

Рукк Н.С.[1], Красноперова В.Н.[1], Давыдова Г.А.[2], Ретивов В.М.[3], Белусь С.К.[3], Волков П.А.[3]

[1]*Московский технологический университет (ИТХТ им. М.В Ломоносова), кафедра неорганической химии имени А.Н. Реформатского*

[2]*Институт Теоретической и Экспериментальной Биофизики РАН (ИТЭБ РАН)*

[3]*НИЦ "Курчатовский институт" - ИРЕА*

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

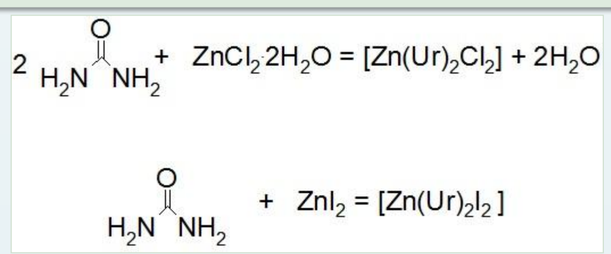
Актуальность исследования

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.

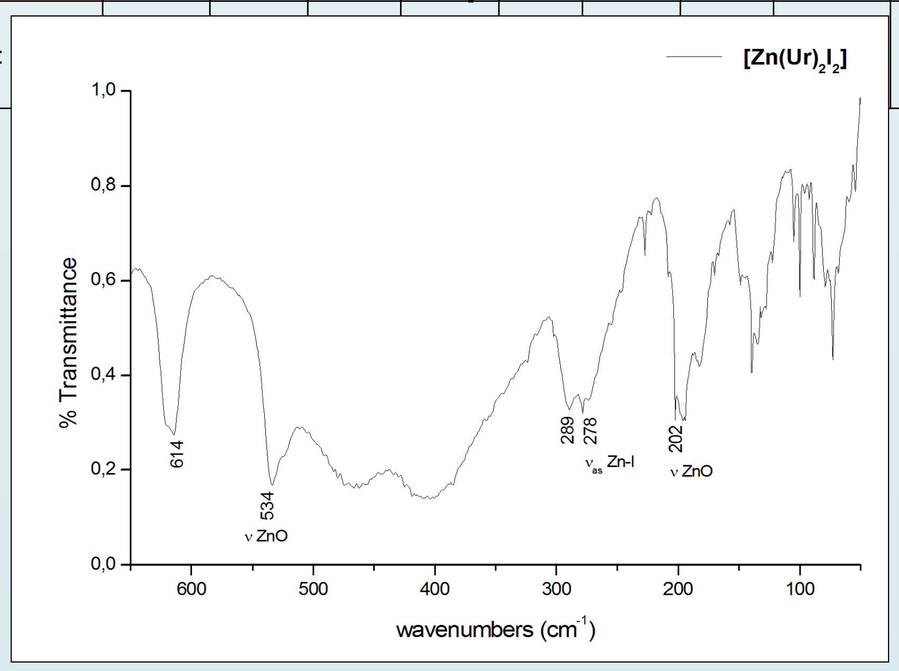
Схема синтеза

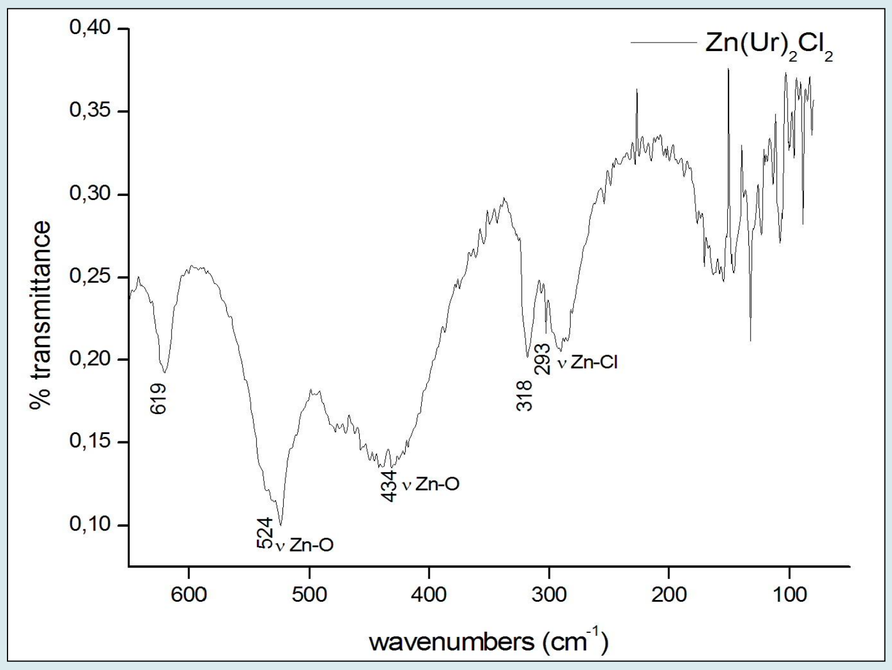


Результаты элементного анализа

Соединение	C, масс.%		N, масс.%		H, масс.%		Zn, масс.%		Cl, масс.%	
$[Zn(C_2H_4N_2O)Cl_2]$	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.%**	
$[Zn(C_2H_4N_2O)I_2]$	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.	Выч.	Найд.
Zn:Ur:I = 1:2:2	5,46	5,47	[illegible]	12,81	1,82	1,79	14,89	14,88	57,79	57,76
M, г/моль:										

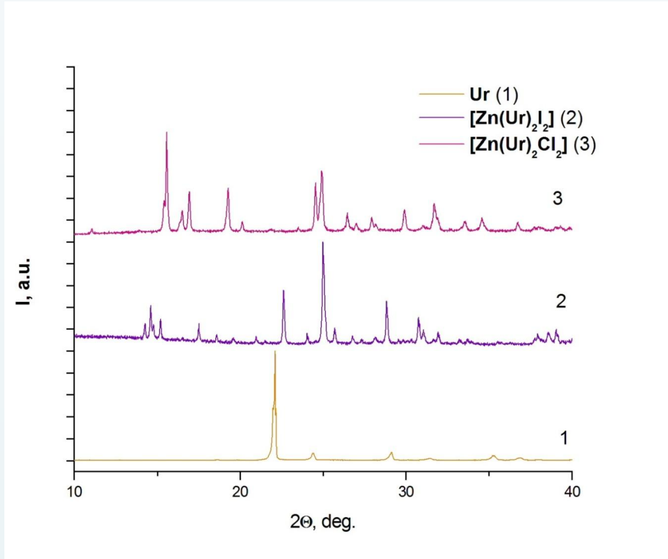
ИК-спектроскопия





Физико-химические исследования

Рентгенофазовый анализ

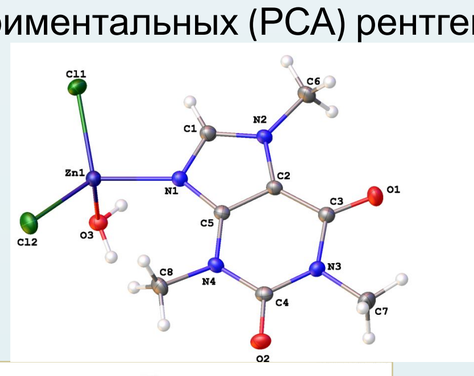


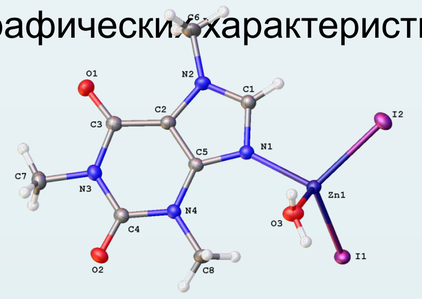
Порошкограммы образцов подтверждают однофазность полученных комплексов, не содержащих примесей исходных веществ.

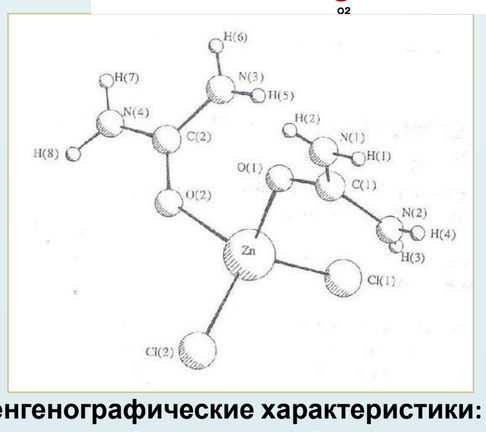
Рентгеновский дифрактометр Bruker D8 Advance, Cu Kα-излучение, Ni-фильтр, 2Θ=5-80º, шаг 0.01125º

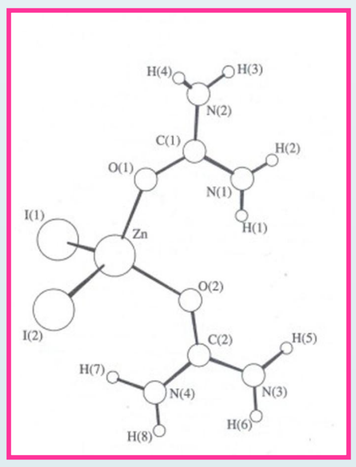
Рентгеноструктурный анализ

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





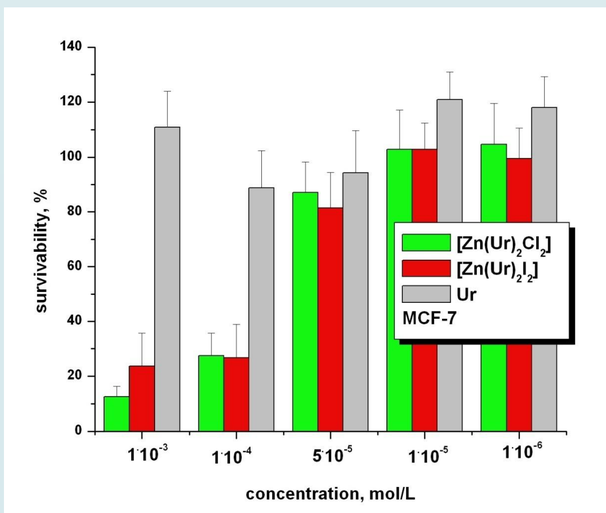


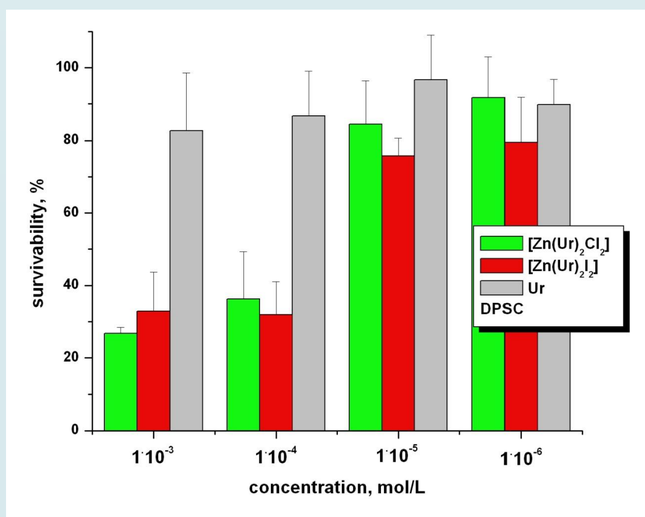


Ренгенографические характеристики:
$[Zn(C_2H_4N_2O)Cl_2]$
Триклинная сингония, Пр. гр. $P1^-$, Z = 2
a = 6.275(7), b = 6.835(5), c = 11.862(12) Å,
α = 79.19(9), β = 72.31(2) , γ = 67.21(7)º
(Фурманова Н.Г. и др. Кристаллография, 1998, т. 43. №2. с. 269-271.)

Ренгенографические характеристики:
$[Zn(C_2H_4N_2O)I_2]$
Моноклинная сингония, Пр. гр. $P2_1/a$, Z = 4
a =12.694(3), b = 6.886(2), c = 13.161(3) Å, β = 110.58(2)º
(Фурманова Н.Г. и др. Кристаллография, 2001, т. 46. №1. с. 58-66.)

Изучение цитотоксичности





Результаты и выводы

1. Синтезированы и идентифицированы молекулярные комплексы состава **$[Zn(Ur)_2X_2]$ (X = Cl, I)**.
2. 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.
3. В наибольшей степени цитотоксичность комплексов проявляется при концентрациях $c = 1\cdot10^{-4}$-$1\cdot10^{-3}$ моль/л.
4. В области концентраций $c = 1\cdot10^{-6}$-$1\cdot10^{-3}$ моль/л карбамид не оказывает угнетающего воздействия на клетки.
5. В области концентраций $c = 1\cdot10^{-4}$-$1\cdot10^{-3}$ 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 **$[Zn(caf)(H_2O)Cl_2]$** при $c = 5\cdot10^{-4}$-$1\cdot10^{-3}$ моль/л.

Список литературы

1. 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.
2. Фурманова Н.Г., Реснянский В.Ф. Сулайманкулов К.С., и др. Кристаллическая структура комплекса хлорида цинка с карбамидом $ZnCl_2 \cdot 2CO(NH_2)_2$ // Кристаллография. 1998. Т.43. Вып. 2. С. 269-271.
3. Фурманова Н.Г., Реснянский В.Ф., Сулайманкулов К.С., и др. Кристаллическая структура комплекса иодида цинка с карбамидом $ZnI_2 \cdot 2CO(NH_2)_2$. // Кристаллография. 2001. Т.46. Вып. 1. С. 58-62.