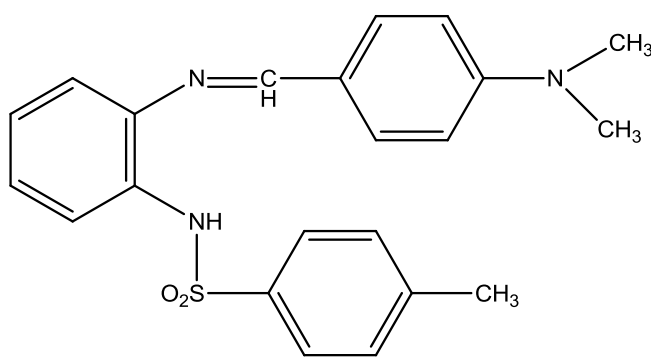


**ИССЛЕДОВАНИЕ РАВНОВЕСИЙ
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ КОБАЛЬТА
С N-(2-((4-(ДИМЕТИЛАМИНО)БЕНЗИЛИДЕН)АМИНО)ФЕНИЛ)-4-
МЕТИЛБЕНЗЕНСУЛЬФАМИДОМ В РАСТВОРАХ
И ИЗУЧЕНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ И ТОКСИЧНОСТИ**

Ермолаева А.А., Лаверова О.М., Сайфутдинов А.М.

Казанский национальный исследовательский технологический университет
420015, г. Казань, ул. К. Маркса, д. 68

Объектами исследования были выбраны лиганд (1) и соль металла (2)



(1), CoCl_2 (2)

Был вычислен диапазон концентраций, в котором концентрация компонентов изучаемого комплексообразования (т. е. органический лиганд и соль металла) находилась в линейной зависимости от поглощения света (т. е. соблюдался закон Бугера-Ламберта-Бера). Оптическая плотность веществ укладывалась в диапазоне $D = 0,15 - 0,80$.

С помощью УФ-спектроскопии были произведены исследования равновесий комплексообразования в растворах. Затем при помощи программного пакета MathLab с использованием методов абстрактного (AFA) и эволюционного (EFA) факторного анализом спрогнозированы количество участников химического равновесия и их концентрационное распределение. Для доказательства составов комплексов были смоделированы их структуры квантово-химическими методами расчёта. Так как расчётные УФ спектры и полученные в ходе эксперимента совпали, то мы считаем, что нашли структуру комплекса.

Затем в программах PASS и GUSAR были исследованы биологическая активность и токсичность как самого лиганда, так и комплекса.

Расчёты показали, что лиганд (1) может использоваться как ингибитор инсулина, НАДФН, ингибитор пероксидазы и глутамил-эндопептидаза ингибитора II при низкой токсичности. При расчётах комплекса кобальта оказалось, что биологическая активность почти не изменилась, а токсичность стала ещё меньше.