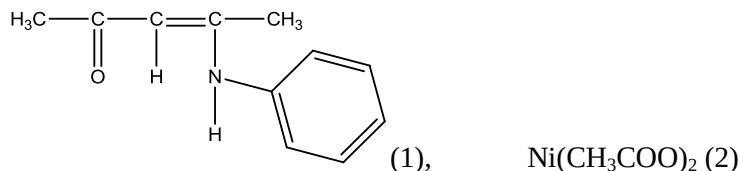


ИССЛЕДОВАНИЕ РАВНОВЕСИЙ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ НИКЕЛЯ С 4-(ФЕНИЛАМИНО)ПЕНТА-3-ЕН-2-ОНОМ В РАСТВОРАХ И ИЗУЧЕНИЕ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ И ТОКСИЧНОСТИ

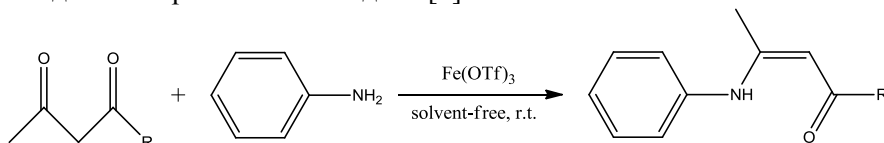
Товкалева Е.В., Лаврова О.М., Сайфутдинов А.М.

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

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



Лиганд синтезировали по методике [1]



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). И 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 анализ 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 при лечении фобических расстройств, а также как ингибитор химозина и тестостерона 17-бета-дегидрогеназы (НАДФ +), при низкой токсичности. При расчётах комплекса никеля, оказалось, что биологическая активность почти не изменилась, а токсичность стала ещё меньше.

1. Feng C.-L., Chu N.-N., Zhang S.-G. et al. Solvent-free synthesis of β -enamino ketones and esters catalysed by recyclable iron(III) triflate // Chemical Papers. 2014. 68(8).