

**ФОРМУВАННЯ ФУНДАМЕНТАЛЬНИХ ОСНОВ ХІМІЧНОГО
КОНСТРУЮВАННЯ НОВИХ ТИПІВ МЕТАЛОКОМПЛЕКСНИХ
СУПРАМОЛЕКУЛЯРНИХ АРХІТЕКТУР БІМЕДИЧНОГО ПРИЗНАЧЕННЯ
ЯК ВЕКТОР ДОСЛІДЖЕНЬ В ОНУ імені І.І. МЕЧНИКОВА**

Інна Сейфулліна¹, Олена Марцінко¹

¹Одеський національний університет імені І.І. Мечникова, Одеса, Україна
e-mail: seiful@ukr.net

Координаційні сполуки металів як медико-біологічні засоби складають основу багатьох сучасних соціально, технологічно значущих інноваційних розробок та патентів, спрямованих на підвищення імунітету, лікування та профілактику цілого ряду патологічних станів населення України, викликаних стресами, епідеміями, екологічними та гуманітарними катастрофами, в тому числі пов'язаних з військовим станом.

За останні роки авторами визначено найбільш перспективний шлях створення органо-неорганічних матеріалів на основі складних гетерометалічних і одночасно різнолігандних супрамолекулярних архітектур, які за природою максимально наближені до існуючих в біосистемах. Знайдено способи ефективного керування комплексоутворенням іонів s-, p-, d-металів з N-, O-, P-вмісними лігандами, отримано масив експериментальних даних про склад, будову, термічні і спектральні властивості біля 200 нових структур (моно-, бі-, поліядерних та кластерних). Одержано ряд різнометальних комплексів Ge(IV), Sn(IV) з комплексонами, лимонною, винною, яблучною, ксиларовою, глюконою, 1-гідроксіетилідендифосфоною кислотами та s-, d-, f-металами, протонованими молекулами нікотинової кислоти, нікотинамідом, ізоніазидом тощо, а також 2,2-біпіридиновими, 1,10-фенантроліновими катіонами 3d-металів. Всебічно охарактеризовано моноядерні комплекси Ge(IV) з піридиноїл- і амінобензоїлгідрозонами 2-гідроксиарилальдегідів. Встановлено, що ліганди зв'язуються з германієм O, N, O-трідентатно-циклічно в гідрохлоридній формі, утворення якої відбувається в результаті протонування вакантних екзохелатних атомів нітрогену піридинового кільця і аміно-груп гідразонів. Підібрано умови (метод синтезу, розчинник, концентрація), виділено в твердому стані та визначено структуру комплексів 3d-металів з тіокарбамоїлсульфенамідами, дитіокарбаматами, 2-(7-бromo-2-оксо-5-фенил-3H-1,4-бенздіазепин-1-ил)ацетогідразидом (денний транквілізатор – гідазепам), а також координаційних сполук Sn(IV) і 3d-металів з продуктами конденсації гідазепаму та заміщених бенз- і нафталальдегідів.

Із застосуванням сучасних методів (ІЧ-, ЯМР ¹H, EXAFS-спектроскопії, мас-спектрометрії, вимірювання магнітної сприйнятливості та молярної електропровідності, ДТА, РСА, аналізу кристалічної структури методом поверхонь Хіршфельда) визначено способи координації функціональних груп лігандів, їх місткової ролі в утворенні гетерометалічних комплексів, особливостей упаковки молекул комплексів в кристалічних ґратках, системи водневих зв'язків за участю молекул розчинника і вплив на них хімічної і просторової будови усіх складових. На основі скринінгу на біологічну та фармакологічну активність нових сполук (гепатопротекторну, серцево-судинну, протигіпоксичну, нейротропну, іміностимулюючу, протимікробну, противірусну, церебропротекторну, анальгетичну, впливу на біосинтез та активність ферментів) простежено зв'язок між їх складом, структурою, властивостями і видами активності. Створено базу експериментальних даних, необхідних для хемоінформатики (в тому числі і структурних для Кембриджського банку). Розвинуто теорію селективної взаємодії комплексних аніонів і катіонів металів різних електронних блоків з відповідними органічними лігандами на підставі даних щодо умов аніонтемплатних реакцій, спрямованого утворення поодиноких ансамблів, іонних пар, функцій аніонів в супрамолекулярній хімії. Отримані результати є цінними як для створення нового покоління фармакологічних препаратів без прояву негативної побічної дії, в тому числі на основі відомих лікарських засобів, так і для підготовки здобувачів вищої освіти, висококваліфікованих конкурентноспроможних фахівців в галузі хімії.