

**ОРИГИНАЛЬНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ АЗОЛОАЗИНОВ КАК ХЕЛАТОРЫ ИОНОВ МЕДИ (II) И ЖЕЛЕЗА (II), (III) В РЕАКЦИИ ГЛИКИРОВАНИЯ**

*Муктасибова Р.Ф., Баженова К.А., Березовская И.А., Малыгин И.Д.,  
Свалова Т.С., Сапожникова И.М., Цмокалюк А.Н., Иванова А.В.,  
Козицина А.Н., Русинов В.Л.*

Уральский федеральный университет  
620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

Одну из важнейших ролей при образовании КПП играет реакция неферментативного катализируемого гликирования, которая включает в себя стадию гликооксидации. Катализаторами процесса выступают ионы переходных металлов: Cu (II) и Fe (II)/(III). Хелатировать металлы способны природные биологически активные вещества и синтетические, в том числе, оригинальные противодиабетические препараты. Так, перспективными молекулами с доказанной антигликирующей активностью являются синтезированные сотрудниками УрФУ производные азолоазинов. Они представляют интерес в качестве потенциальных хелаторов Cu (II) и Fe (II)/(III), в том числе, в живом организме, ввиду структурного сродства их гетероароматических каркасов с пиримидинами и наличием кислород- и азотсодержащих заместителей – потенциальных хелатирующих центров.

В рамках работы комплексно исследовано хелатирование ионов Cu (II) и Fe (II)/(III) некоторыми производными азолоазинов в водных буферных растворах. С применением совокупности спектроскопических методов показано, что взаимодействие производных азолоазинов с ионами Cu (II), Fe (III) приводит к изменению значения оптических плотностей, что может указывать на образование соединений с новой энергетической структурой. При этом, в случае с медью наблюдается гипсохромный сдвиг максимума поглощения. Взаимодействие молекул с Fe (II) в выбранных условиях не наблюдается. На координацию металлов вблизи связи N-N в гетероцикле с участием карбоксильных и нитрогрупп указывает появление интенсивной полосы колебаний при  $1037\text{ см}^{-1}$ , а также смещение и изменение интенсивности полос колебаний в область больших волновых чисел. Экспериментально определена стехиометрия образования комплексов: 1:1 для Cu (II) и 1:2 для Fe (III). Методом циклической вольтамперометрии установлено вероятное внутрикомплексное восстановление Cu (II) до Cu (I). Методом квантово-химических расчетов смоделированы возможные структуры образующихся комплексов: наибольшее изменение энергии Гиббса  $-9,049\text{ эВ}^*$ .

Дальнейшие исследования будут направлены на расширение ряда исследуемых производных, а также на установление взаимосвязей между хелатирующим действием производных азолоазинов в отношении выбранных переходных металлов и их биологической активностью посредством моделирования процессов комплексообразования и гликирования в условиях различного аминокислотного и пептидного окружения.

*\*В рассчитанных моделях атомы металлов рассматриваются в качестве свободных ионов*