

НЕКОТОРЫЕ ДОСТИЖЕНИЯ И ПЕРСПЕКТИВЫ БИОНЕОРГАНИЧЕСКОЙ ХИМИИ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

**Валерий Григорьевич Штырлин, Никита Юрьевич Серов,
Михаил Сергеевич Бухаров, Эдуард Махмутович Гилязетдинов,
Александр Александрович Крутиков, Ахмед Мохамед Али Мохамед,
Айрат Ризванович Гарифзянов, Ильдар Ирекович Мирзаянов,
Максим Александрович Жернаков, Антон Валерьевич Ермолаев,
Никита Сергеевич Аксенин, Кира Валерьевна Уразаева**

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: Valery.Shtyrlin@gmail.com

Ключевые слова: координационная химия, биологическая активность, стереоселективность, структура, термодинамика, кинетика, моделирование.

Понимание причин специфичности и селективности процессов в живой природе является крупнейшей проблемой науки, решение которой во многом зависит от достижений координационной и бионеорганической химии. В настоящей работе представлены результаты синтеза, исследований структуры, термодинамики и стереоселективности образования, а также кинетики реакций замещения гомо- и гетеролигандных комплексов ряда 3d- и 4f-металлов с энантимерно однородными и рацемическими формами аминокислот, ди- и трипептидами, ароматическими N-донорами, новыми изоникотиноил-гидразами и фосфорилированными дитиокарбаматами на фоне солей разной концентрации при нескольких температурах. Для этого использован комплекс взаимодополняющих спектральных методов, включая статическую СФ-метрию, КД-спектроскопию, ЭПР, ЯМР, ЯМР-релаксацию, метод остановленной струи и рН-потенциометрию в сочетании с математическим моделированием путем использования ряда современных программ, в том числе авторских программ STALABS и STALABS-M, метод РСА и расчеты методами DFT и MD. Выявлены основные факторы, определяющие структуру, стереоселективность комплексообразования и замещения лигандов, стабильность и лабильность комплексов, и оценена биологическая активность ряда из них. Рассмотрен вклад координационной химии в решение проблемы происхождения жизни.