## = КООРДИНАЦИОННЫЕ СОЕДИНЕНИЯ —

УДК 546.4+546.02+546.05+546.43+547.7+579.8

# КООРДИНАЦИОННЫЙ ПОЛИМЕР Ва<sup>2+</sup> С АНИОНАМИ 2-ФУРАНКАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ: СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И ТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

© 2021 г. М. Е. Никифорова<sup>*a*, \*</sup>, И. А. Луценко<sup>*a*</sup>, М. А. Кискин<sup>*a*</sup>, Ю. В. Нелюбина<sup>*b*</sup>, П. В. Примаков<sup>*b*</sup>, О. Б. Беккер<sup>*c*</sup>, А. В. Хорошилов<sup>*a*</sup>, И. Л. Еременко<sup>*a*</sup>

<sup>а</sup>Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Ленинский пр-т, 31, Москва, 119991 Россия <sup>b</sup>Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, ул. Вавилова, 28, Москва, 119991 Россия <sup>c</sup>Институт общей генетики им. Н.И. Вавилова РАН, ул. Губкина, 3, Москва, 119991 Россия

> \*e-mail: nikiforova.marina@gmail.com Поступила в редакцию 12.03.2021 г. После доработки 16.04.2021 г. Принята к публикации 20.04.2021 г.

Взаимодействием гидроксида бария(II) и 2-фуранкарбоновой кислоты (пирослизевая кислота, Hfur) получен 1D-координационный полимер состава { $[Ba_3(fur)_6(Hfur)_2(H_2O)_8]_n \cdot 4nH_2O$  (I). По данным PCA, I содержит два симметрически независимых катиона бария, каждый из которых имеет различное окружение: Ba(1) координирует шесть анионов fur<sup>-</sup>, тогда как Ba(2) представляет фрагмент гетеролептической координации (fur<sup>-</sup>, Hfur и H<sub>2</sub>O) (CIF files CCDC № 2063380). Супрамолекулярная полимерная организация I определена мостиковыми молекулами воды и многочисленными водородными связями между координированными и сольватными молекулами воды с формированием 1D-мотива. Расположение ионов Ba<sup>2+</sup> в трехъядерном фрагменте {Ba<sub>3</sub>(fur)<sub>6</sub>(Hfur)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>8</sub>} полимера практически линейное. Термическое поведение I, исследованное методом синхронного термического анализа (атмосфера аргона), показало ступенчатый характер термолиза, обусловленный постепенным разрушением водородно-связанного каркаса и последующей частичной деструкцией органической части. Анализ биологической активности I в отношении непатогенного штамма *Mycolicibacterium smegmatis* показал низкую чувствительность бактериальной стенки к исследуемому комплексу.

*Ключевые слова:* барий, структура, дифференциальная сканирующая калориметрия, биологическая активность

DOI: 10.31857/S0044457X21090105

#### введение

Химия соединений щелочноземельных металлов относится к числу активно развивающихся областей неорганической химии [1-7]. Например, катионы бария, обладая большими координационными возможностями, с успехом используются для построения металлорганических координационных полимеров (МОКП) [8-11]. Устойчивый интерес к пористым МОКП на основе *s*-блоков обусловлен их способностью высокоселективного люминесцентного зондирования органических молекул [12-14]. По результатам исследований биологической активности комплексов на основе Ва, они обладают высокой токсичностью, в отличие от соединений Са и Мд, что делает их перспективными для получения компонентов пестицидов, гербицидов и др. [9]. Барий не относится к эссенциальным (жизненно необходимым) металлам, но в небольших количествах находится во всех органах и тканях (среднее содержание ~20 мг для взрослого человека [15]). Несмотря на токсичность большинства соединений, некоторые все-таки нашли свое применение в медицине, например, в качестве контрастных агентов при рентгенографическом исследовании внутренних органов. Однако при синтезе комплексов бария возникают трудности, вызванные малым зарядом и большим атомным радиусом. Данную проблему позволяют решить карбоксилатные лиганды, обеспечивающие различные варианты координационного связывания и возможность реализации разнообразных КЧ(Ва) (от 7 до 12) [16, 17]. Цель настоящего исследования - синтез соединения бария(II) с 2-фуранкарбоновой кислотой, определение структуры, термических свойств и установление биологической активности in vitro в отношении Mycolicibacterium smegmatis.

## ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Синтез нового комплексного соединения проводили на воздухе с использованием дистиллированной воды. Для синтеза использовали коммерчески доступные реактивы: 2-фуранкарбоновую кислоту (Hfur) (Acros Organics, 98%) и моногидрат гидроксида бария(II) (Acros Organics, 98%).

Элементный анализ выполняли на автоматическом C, H, N-анализаторе Carlo Erba EA 1108. ИК-спектры соединения регистрировали на ИК-спектрофотометре с Фурье-преобразованием Perkin–Elmer Spectrum 65 методом нарушенного полного внутреннего отражения (НПВО) в интервале частот 400–4000 см<sup>-1</sup>.

Биологическую активность определяли в тестсистеме M. smegmatis  $mc^2$  155 методом бумажных дисков. Фиксировали величину зоны подавления роста штамма, засеянного газоном на агаризованной среде, вокруг бумажных дисков, содержащих вещество в различных концентрациях. Бактерии, смытые с чашек Петри со средой Триптон-соевый arap M-290 (Himedia), выращивали в течение ночи в жидкой среде Lemco-TW (Lab Lemco' Powder 5 g  $L^{-1}$  (Oxoid), Peptone special 5 g  $L^{-1}$  (Oxoid), NaCl 5 g  $L^{-1}$ . Tween-80) при +37°C до среднелогарифмической фазы роста при оптической плотности OD600 = 1.5, затем смешивали с расплавленной агаризованной средой М-290 в соотношении 1:9:10 (культура: Lemco-TW: М-290). Культуру инкубировали в течение 24 ч при +37°С. Минимальной ингибирующей концентрацией (МИК) считали концентрацию вещества, при которой зона подавления роста минимальна. Тест-система *M. smegmatis* проявляет более высокую степень устойчивости к антибиотикам и противотуберкулезным агентам, чем M. tuberculosis, поэтому критерием отбора является концентрация вещества <100 мкг/диск. Метод испытания включает количественную оценку диаметра зоны подавления роста культуры *M. smegmatis*, выращенной газоном на агаризованной среде, вокруг бумажных дисков, пропитанных испытуемыми соединениями. Исследуемое соединение наносили на диски в разных концентрациях и регистрировали диаметр halo (зона ингибирования роста).

Синтез { $[Ba_3(fur)_6(Hfur)_2(H_2O)_8]$ }<sub>n</sub> · 4nH<sub>2</sub>O (I). Навески Ba(OH)<sub>2</sub> · H<sub>2</sub>O (0.2534 г, 1.34 ммоль) и Нfur (0.30 г, 2.68 ммоль) растворяли в 15 мл дистиллированной воды. Реакционную смесь перемешивали в течение 30 мин при 65°С. Полученный раствор выдерживали при комнатной температуре. Образовавшиеся через 2 мес. бесцветные шестигранные кристаллы, пригодные для PCA, отделяли от маточного раствора декантацией и сушили на воздухе. Выход соединения I составил 0.424 г (63% в расчете на  $Ba(OH)_2 \cdot H_2O$ ).

	С	Н
Найдено, %:	32.03;	3.22.
Для С <sub>40</sub> Н <sub>50</sub> Ва <sub>3</sub> О <sub>36</sub> (I)		
вычислено, %:	31.63;	3.32.

ИК-спектр (НПВО), v, см<sup>-1</sup>: 3547 сл, 3367 ш. ср, 3143 сл, 3123 сл, 3099 сл, 2641 ш. сл, 2537 ш. сл, 1693 ср, 1586 с, 1548 ш. оч. с, 1472 ш. оч. с, 1409 с, 1388 оч. с, 1360 оч. с, 1288 с, 1235 сл, 1223 ср, 1186 с, 1128 с, 1077 с, 1010 оч. с, 932 с, 884 с, 795 с, 775 с, 754 оч. с, 740 с, 594 с, 524 ср, 472 оч. сл, 451 сл, 439 сл, 431 сл, 415 сл, 408 сл, 403 сл.

Рентгеноструктурный анализ координационного полимера I проводили при 120 К на дифрактометре Bruker ApexII DUO (ССD-детектор,  $MoK_{\alpha}$ ,  $\lambda = 0.71073$  Å, графитовый монохроматор). Структура расшифрована с использованием программы ShelXT [18] и уточнена полноматричным МНК с помощью программы Olex2 [19] в анизотропном приближении для неводородных атомов. Атомы водорода ОН-групп локализованы из разностных синтезов Фурье, положения остальных атомов водорода рассчитаны геометрически, все они уточнены в изотропном приближении в модели "наездника". Кристаллографические параметры и детали уточнения для соединения I следующие: C<sub>40</sub>H<sub>50</sub>Ba<sub>3</sub>O<sub>36</sub>, *M* = 1518.82 г/моль, кристаллы – бесцветные параллелепипеды, пр. гр.  $C2/c, a = 18.778(5), b = 12.079(3), c = 25.052(9) \text{ Å}, \beta =$ = 106.402(5)°, V = 5451(3) Å<sup>3</sup>, Z = 4,  $\rho_{BBIY} = 1.851$  г/см<sup>3</sup>,  $\mu = 22.46 \text{ см}^{-1}$ , 15713 измеренных рефлексов, 4200 рефлексов с  $I > 2.0\sigma(I)$ ,  $R_{int} = 0.0775$ , GOOF == 1.236,  $R_1$  ( $I > 2\sigma(I)$ ) = 0.1254,  $wR_2$  ( $I > 2\sigma(I)$ ) = = 0.2915,  $T_{\min/\max}$  = 0.956/0.976. Координаты атомов и другие параметры структуры I депонированы в Кембриджском банке структурных данных (№ 2063380; deposit@ccdc.cam.ac.uk или http:// www.ccdc.cam.ac.uk/data request/cif).

Термическое поведение соединения I изучали методом синхронного термического анализа (СТА) в атмосфере аргона с одновременной регистрацией кривых термогравиметрии (ТГ) и дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). Исследование проводили на приборе СТА 449 F1 Jupiter (фирмы Netzsch) в алюминиевых тиглях под крышкой с отверстием, обеспечивающим давление паров при термическом разложении образцов в 1 атм. Скорость нагрева до 500°С составляла 10 град/мин. Масса навески 1.64 мг (I). Точность измерения температуры  $\pm 0.7^{\circ}$ С, изменение массы  $\pm 1 \times 10^{-2}$  мг. При съемке кривых ТГ и ДСК использовали файл коррекции, а также калибровки по температуре и чувствительности для заданной температурной программы и скорости



**Рис. 1.** Общий вид фрагмента  $\{Ba_3(fur)_6(Hfur)_2(H_2O)_8\}$  в кристалле I, в котором ион бария Ba(1) занимает частное положение — центр инверсии. Нумерация приведена для гетероатомов симметрически независимой части элементарной ячейки. Здесь и далее атомы водорода H(C), сольватные молекулы воды и вторые компоненты разупорядоченных молекул воды и анионов фуранкарбоновой кислоты не показаны. Неводородные атомы представлены в виде эллипсоидов тепловых колебаний (p = 30%), а водородные связи изображены пунктирными линиями.

нагрева. После проведения термического анализа качественное определение химического состава и микроморфологию остаточного вещества анализировали с помощью растрового электронного микроскопа Carl Zeiss NVision 40, оснащенного рентгеноспектральным детектором Oxford X-Max, при ускоряющем напряжении 1 и 20 кВ соответственно. Увеличение составляло ×30000.

### РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Полученный продукт взаимодействия гидроксида бария(II) и фуранкарбоновой кислоты в водном растворе был выделен в виде монокристаллов и структурно охарактеризован. Он представляет собой 1D-координационный полимер состава { $[Ba_3(fur)_6(Hfur)_2(H_2O)_8]$ }<sub>n</sub> · 4nH<sub>2</sub>O (I) и кристаллизуется в моноклинной пр. гр. *C2/c* с двумя симметрически независимыми ионами бария Ba(1) и Ba(2), первый из которых занимает в кристалле частное положение — центр инверсии (рис. 1), и двумя сольватными молекулами воды в симметрически независимой части элементарной ячейки, имеющей состав [Ba<sub>1.5</sub>(fur)<sub>3</sub>(Hfur)(H<sub>2</sub>O)<sub>4</sub>] · · 2H<sub>2</sub>O.

В трехъядерных фрагментах {Ba<sub>3</sub>(fur)<sub>6</sub>(Hfur)<sub>2</sub>(H<sub>2</sub>O)<sub>8</sub>} исследуемого 1D-координационного полимера ионы бария лежат на одной прямой (угол Ba(2)...Ba(1)...Ba(2) равен 180.0°) и связаны друг с другом тремя атомами кислорода трех мостиковых карбоксилатных групп (Ba–O 2.760(13)–2.836(13) Å) (табл. 1). Между собой фрагменты  $\{Ba_3(fur)_6(Hfur)_2(H_2O)_8\}$  связаны двумя мостиковыми молекулами воды (Ba(2)–O 2.797(14)–2.908(15) Å) с углом Ba(2)O(14)Ba(2) 99.5(4)°–100.1(4)° (рис. 2).

Один из двух симметрически независимых ионов бария — Ba(1) — находится в координационном окружении двенадцати атомов кислорода (KЧ = 12): шести атомов кислорода карбоксилатных групп (Ba(1)—O 2.760(13)—2.836(13) Å) и ше-

Таблица 1. Основные длины связей (*d*) и валентные углы (ω) в структуре I

Связь	<i>d</i> , Å	Связь	<i>d</i> , Å	
Ba(1)				
Ba(1)–O(1)	2.836(13)	Ba(1)–O(6)	2.943(13)	
Ba(1)–O(3)	3.004(15)	Ba(1)–O(7)	2.813(13)	
Ba(1)–O(4)	2.806(13)	Ba(1)–O(9)	2.902(14)	
	B	a(2)		
Ba(2)–O(1)	2.760(13)	Ba(2)–O(13)	2.97(3), 2.70(4)	
Ba(2)–O(4)	2.786(13)	Ba(2)–O(14)	2.908(15), 2.797(14)	
Ba(2)–O(7)	2.805(13)	Ba(2)–O(15)	2.78(3), 2.90(2)	
Ba(2)–O(10)	2.845(14)	Ba(2)–O(16)	2.68(3), 3.08(3)	



Рис. 2. Фрагмент кристаллической упаковки І, иллюстрирующий образование 1D-координационного полимера.

сти атомов кислорода фурановых колец (Ва(1)-О 2.902(14)-3.004(15) Å), расположенных в вершинах практически идеального икосаэдра. Координационное окружение второго симметрически независимого иона бария – Ва(2) – имеет форму, близкую к трехшапочной тригональной призме (КЧ = 9). Она образована тремя мостиковыми атомами кислорода трех карбоксилатных групп (Ba(2)-O 2.760(13)-2.805(13) Å), атомом кислорода молекулы фуранкарбоновой кислоты (Ba(2)-O(10) 2.845(14) Å), в которой гидроксильная группа образует водородную связь с атомом кислорода одного из таких анионов (O(11)...O(2) 2.61(2) Å, O(11)H(11)O(2) 169.2(11)°, табл. 2), и пятью молекулами воды (Ba(2)-O 2.68(3)-3.08(3) Å), две из которых выполняют роль мостиковых лигандов между соседними фрагментами (рис. 2, табл. 1). Они же участвуют в образовании водородных связей (табл. 2) с двумя атомами кислорода молекулы фуранкарбоновой кислоты и одним атомом кислорода мостикового аниона фуранкарбоновой кислоты (О...О 2.63(4)-3.54(2) Å, OHO 134.5(10)°−159.4(17)°). Остальные молекулы воды, координированные к иону бария Ва(2), образуют водородные связи друг с другом (O(15)...O(16') 2.47(4) Å, ОНО 160(2)°) и с карбоксильными группами мостиковых анионов фуранкарбоновой кислоты (О...О 2.68(3)–3.37(6) Å, ОНО 118(3)°–168(2)°). Четыре сольватные молекулы воды, приходящиеся на один фрагмент  ${Ba_3(fur)_6(Hfur)_2(H_2O)_8}$ , соединяют между собой соседние 1D-координационные цепочки посредством аналогичных водородных связей (О...О 2.72(3)-3.25(4) Å, ОНО 138(3)°-172.5(15)°), приводя к формированию в кристалле I водородносвязанного трехмерного каркаса (табл. 2).

Термическое поведение I было исследовано методом СТА в атмосфере аргона с одновременной регистрацией кривых ТГ и ДСК до 500°С (рис. 3). Количественную характеристику термолиза рассмотрим на примере  $[Ba_{1,5}(fur)_3(Hfur)(H_2O)_4]$ · 2H<sub>2</sub>O, представляющего симметрически независимую часть элементарной ячейки. Процесс термолиза складывается из трех основных стадий. Первая связана с десорбцией двух сольватных и одной координированной молекулы воды ( $m_{\text{теор/эксп}} = 3.6\%$ ). На кривой ДСК (рис. 3, кривая б) присутствует составной эндотермический пик с близкими экстремумами при 60 и 64°С. Небольшой эндотермический эффект при 110°С соответствует плавлению десольватированного комплекса (табл. 3). Следующий этап характеризуется десорбцией двух координированных Hfur и четырех молекул воды (*m*<sub>теор/эксп</sub> = 18.6/18.9%) (рис. 3, кривая *a*). При этом на кривой ДСК (рис. 3, б) этому процессу соответствует сложный эндотермический эффект с экстремумами при 186 и 204°С (выделение  $H_2O$  и Hfur соответственно;  $T_{\kappa\mu\pi}$ (Hfur) = 230°C). Интегральные интенсивности данного эффекта количественно соотносятся с десорбирующимися молекулами. Заключительный этап является более продолжительным, чем два предшествующих (215-496°С). На кривой ДСК (рис. 3, кривая б) присутствует мощный экзотермический эффект поверхностного окисления с экстремумом при

	· ·	-			
Контакт D–Н…А	d, Å			Угол DHA,	Преобразование
	D–H	Н…А	D…A	град	симметрии
O(11)-H(11)O(2)	0.941	1.683	2.613	169.19	
O(14)-H(14A)O(10)	0.984	2.043	2.821	134.45	-x, y, -z + 1/2
O(14)-H(14A)O(12)	0.984	2.625	3.543	155.23	-x, y, -z + 1/2
O(14)-H(14B)O(8')	0.920	1.924	2.694	139.91	-x, y, -z + 1/2
O(14)-H(14B)O(8)	0.920	1.783	2.665	159.51	-x, y, -z + 1/2
O(15)-H(15A)O(5)	0.842	1.997	2.680	137.71	
O(15)-H(15B)O(17)	0.994	1.842	2.758	151.82	-x, y, -z + 1/2
O(16')-H(16A)O(15)	0.932	1.568	2.465	160.35	-x, y, -z + 1/2
O(16')-H(16B)O(8')	0.843	2.534	3.363	168.17	
O(13')-H(13A)O(2)	1.042	2.120	2.988	139.34	
O(13)-H(13A)O(2)	0.874	2.120	2.644	117.88	
O(13')-H(13B)O(18)	0.918	2.078	2.910	150.06	-x, y, -z + 1/2
O(13)-H(13B)O(18)	0.783	2.078	2.711	138.02	-x, y, -z + 1/2
O(15')-H(15C)O(17')	0.849	2.479	3.251	151.66	-x, y, -z + 1/2
O(15')-H(15D)O(5)	0.893	1.866	2.706	155.97	
O(16)-H(16C)O(5)	0.921	2.064	2.881	147.04	
O(17)-H(17A)O(8)	0.900	2.194	3.040	156.24	
O(17)-H(17B)O(2)	0.950	1.941	2.715	137.18	x-1/2, y+1/2, z
O(17)-H(17B)O(2)	0.905	1.941	2.734	145.28	x-1/2, y+1/2, z
O(18)-H(18A)O(8')	0.998	2.029	2.892	143.45	
O(18)-H(18A)O(8)	0.998	2.092	2.811	127.30	
O(18)-H(18B)O(17)	0.829	1.923	2.747	172.55	

Таблица 2. Геометрические параметры водородных связей в структуре I

Таблица 3. Данные СТА для комплекса I (атмосфера аргона)

Комплекс	Этап/ $\Delta T$ , °C	$\Delta m$ (TГ), %	$T_{ m эндо/экзо},$ °С	т <sub>фин</sub> , %
	1/52-82	3.6	$60 \pm 0.7; 68 \pm 0.7$	
	2/82-215		$110 \pm 0.7$	
Ι		18.9	(плавление)	
	3/215-496	23.4	$186 \pm 0.7$	53.1
			$461\pm0.7$	

461°С, характерный для О-насыщенных комплексов бария [20]. Всего к 500°С десорбируется лишь 47% от первоначальной массы соединения, поэтому масса остатка после термолиза свидетельствует о сильно зауглероженном продукте. Для определения состава финального вещества I был проведен EDX-анализ и проанализирована микроморфология (рис. 4). Результаты эксперимента показывают наличие в продукте термолиза Ва (13.58%), О (11.75%) и С (74.67%).

Антибактериальная активность I была определена в отношении непатогенного штамма *M. smegmatis*. Полученные результаты биоактивности *in vitro* соотносились с активностью для изониазида (INH) и рифампицина (Rif) в данных условиях эксперимента. Противомикробная активность индивидуальной Hfur в отношении *M. smegmatis* незначительна (табл. 4). Известно, что устойчивость микобактерий к химиотерапевтическим агентам связана с низкой проницаемостью микобактериальной клеточной стенки, с ее необычной структурой. *M. smegmatis* — быстрорастущие непатогенные бактерии и поэтому используются в качестве модельного организма для медленно растущих бактерий *M. tuberculosis*, а также для первичного скрининга противотуберкулезных препаратов [21]. Результаты антибактериальной активности в тестовой системе *M. smeg*-



**Рис. 3.** Кривые ТГ (*a*) и ДСК (б) І.



Рис. 4. Энергодисперсионный спектр (а) и фотография микроморфологии остатка I (б), увеличение ×30000.

*matis*  $mc^2$  155 и ее изменение с течением времени для I приведены в табл. 4. Ранее [22–25] была исследована биологическая активность *in vitro* для соединений с *d*-металлами-комплексообразователями Fe<sup>3+</sup>, Cu<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup>, Co<sup>2+</sup> и анионами Hfur, а также дополнительными N-донорными лигандами (табл. 4). Результаты экспериментов показывают, что наибольшую биоактивность проявляют

Соетицение	МИК, мкг/диск	Зона ингибирования, мм		Питоротуро
Соединение	24 ч	24 ч	120 ч	литература
Ι	>1000	0	0	Наст. работа
[Fe <sub>3</sub> O(fur) <sub>6</sub> (THF) <sub>3</sub> ] · 3THF	13	7**	0	[22]
$([Co_3O(fur)_6(H_2O)_3])$	120	$6.5 \pm 0.3^{**}$	$6.5 \pm 0.3^{**}$	[22]
$[Co_6(piv)_8(Hpiv)_4(fur)_2(OH)_2]$	143	$6.5 \pm 0.3^{**}$	0	[22]
[Cu(fur) <sub>2</sub> (phen)]	2	$7 \pm 0.5^{**}$	$7 \pm 0.5^{**}$	[23]
$[Zn_2(fur)_4phpy_2]$	41	$6.5 \pm 0.5^{**}$	$6.5 \pm 0.5^{**}$	[23]
$[Zn(fur)_2(bpy)]$	44	$6.5 \pm 0.5^{**}$	$6.5 \pm 0.5^{**}$	[24]
$[Cu(fur)_2(bpy)(H_2O)]$	46	$7\pm0.5$	$7 \pm 0.5^*$	[24]
$[Co_3(fur)_6(phen)_2]$	60	$7\pm0.5$	$7 \pm 0.5^*$	[22]
$[Cu_2(fur)_4(py)_2]$	146	$7\pm0.5$	$7 \pm 0.5^*$	[23]
$[Cu(fur)_2(py)_2(H_2O)]$	153	$7\pm0.5$	$7 \pm 0.5^*$	[23]
$[Cu(fur)_2(phpy)_2(H_2O)] \cdot phpy$	224	$7.0 \pm 0.5$	$7.0 \pm 0.5^*$	[25]
$[Zn_2(fur)_4py_2]$	366	$6.5 \pm 0.3^{**}$	$6.5 \pm 0.3^{**}$	[23]
INH	100	7**	6.5**	
Rif	10	6.5	6.5*	

Таблица 4. Результаты антибактериальной активности in vitro в отношении Mycolicibacterium smegmatis

\* Зона ингибирования роста культуры не зарастает в течение указанного времени.

\*\* Зона ингибирования роста культуры бактерий, изначально возникшая после нескольких часов роста, начинает зарастать по всей поверхности зоны.

комплексы на основе Cu<sup>2+</sup>, Zn<sup>2+</sup> и Fe<sup>3+</sup>. Прослеживается характерная тенденция зависимости эффективности воздействия на культуру от дополнительных лигандов, входящих в состав комплексов. Очевидно, что 2,2'-бипиридин (bpy), 4фенилпиридин (phpy) и в наибольшей степени 1,10'-фенантролин (phen) способны значительно повышать биологическую активность. Для соединения I, у которого в качестве комплексообразователя выступает *s*-элемент и отсутствуют солиганды, биологической активности не наблюдается. Таким образом, клеточная стенка *M. smegmatis* является индифферентной по отношению к исследуемому веществу I.

#### БЛАГОДАРНОСТЬ

Рентгенодифракционное исследование соединения I проведено с использованием оборудования Центра исследования строения молекул ИНЭОС РАН при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации. Элементный анализ, СТА и ИК-спектроскопия выполнены с использованием оборудования ЦКП ФМИ ИОНХ РАН, функционирующего при поддержке государственного задания ИОНХ РАН в области фундаментальных научных исследований.

#### ФИНАНСИРОВАНИЕ РАБОТЫ

Работа выполнена в рамках государственного задания ИОНХ РАН в области фундаментальных научных исследований и программ Российской академии наук. Рентгенодифракционное исследование соединения I проведено при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации с использованием оборудования Центра исследования строения молекул ИНЭОС РАН.

#### КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют, что у них нет конфликта интересов.

## ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ИНФОРМАЦИЯ

Дополнительная информация для этой статьи доступна по https://doi.org/10.31857/S0044457X21090105 для авторизованных пользователей.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- Dimé K.D.A., Cattey H., Lucas D., Devillers Ch.H. // Eur. J. Inorg. Chem. 2018. V. 2018. P. 4834. https://doi.org/10.1002/ejic.201801142
- Bhattacharjee J., Harinath A., Sarkar A., Panda T.K. // ChemCatChem. 2019. V. 11. P. 3366. https://doi.org/10.1002/cctc.201900920

- 3. *Nandi S., Luna Ph., Maity R. et al.* // Mater. Horiz. 2019. V. 6. P. 1883. https://doi.org/10.1039/C9MH00133F
- Paluchowska B., Maurin J.K., Leciejewicz J. // J. Chem. Crystall. 1997. V. 27. P. 177. https://doi.org/10.1007/BF02575986
- Yang J., Yin Xin, Wu Le et al. // Inorg. Chem. 2019. V. 57. P. 150105. https://doi.org/10.1021/acs.inorgchem.5b00113
- Wan Ke-Ke, Yu Jie-Hui, Yang Qing-Feng et al. // Eur. J. Inorg. Chem. 2019. P. 3094. https://doi.org/10.1002/ejic.201900558
- Roueindeji H., Ratsifitahina A., Roisnel T. // Chem. Eur. J. 2019. V. 25. P. 8854. https://doi.org/10.1002/chem.201901262
- Maity T., Saha D., Das S., Koner S. // Eur. J. Inorg. Chem. 2012. V. 30. P. 4914. https://doi.org/10.1002/ejic.201200417
- 9. Xu X., Hu F., Shuai Q. // New J. Chem. 2017. V. 41. P. 13319. https://doi.org/10.1039/C7NJ03046K
- Su W., Shi Y., Hao X. et al. // Inorg. Chim. Acta. 2019. V. 490. P. 29. https://doi.org/10.1016/j.ica.2019.02.037
- Liu F., Xu Y., Zhao L. et al. // J. Mater. Chem. A. 2015. V. 3. P. 21545. https://doi.org/10.1039/C5TA03680A
- Kreno L.E., Leong K., Farha O.K. et al. // Chem. Rev. 2012. V. 112. P. 1105. https://doi.org/10.1021/cr200324t
- Wang J.H., Li M., Li D. // Chem. Sci. 2013. V. 4. P. 1793. https://doi.org/10.1039/C3SC00016H

- 14. Xiao J., Wu Y., Li M. et al. // Chem. Eur. J. 2013 V. 19. P. 1891. https://doi.org/10.1002/chem.201203515
- 15. Муравьева Д.А., Самылина И.А., Яковлева Г.П. Фармакогнозия. М.: Медицина, 2007. 654 с.
- Bartolome E., Bartolome J., Melnic S. et al. // Dalton Trans. 2014. V. 43. P. 10999. https://doi.org/10.1039/C4DT00538D
- Bhargao P.H., Srinivasan B.R. // J. Coord. Chem. 2019. V. 72. P. 2599. https://doi.org/10.1080/00958972.2019.1666980
- Sheldrick G.M. // Acta Crystallogr., Sect. A. 2015. V. 71. P. 3.
- https://doi.org/10.1107/S2053273314026370
  19. Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J. et al. // J. Appl. Crystallogr. 2009. V. 42. P. 339.
- https://doi.org/10.1107/S0021889808042726
- Chabira S.F., Sebaa M. // Rev. Sci. Technol. Synthese. 2012. V. 24. P. 44.
- Bekker O.B., Sokolov D.N., Luzina O.A. et al. // Med. Chem. Res. 2015. V. 24. P. 2926. https://doi.org/10.1007/s00044-015-1348-2
- Lutsenko I.A., Yambulatov D.S., Kiskin M.A. et al. // Chem. Select. 2020. V. 5. P. 11837. https://doi.org/10.1002/slct.202003101
- Луценко И.А., Баравиков Д.Е., Кискин М.А. и др. // Коорд. химия. 2020. Т. 46. № 6. С. 366. https://doi.org/10.31857/S0132344X20060055
- 24. Луценко И.А., Ямбулатов Д.С., Кискин М.А. и др. // Коорд. химия. 2020. Т. 46. № 12. С. 715. https://doi.org/10.31857/S0132344X2012004X
- 25. Луценко И.А., Кискин М.А., Кошенскова К.А. и др. // Изв. АН. Сер. хим. 2021. Т. 70. № 3. С. 463. https://doi.org/10.1007/s11172-021-3109-3