

*«Наш проект направлен на исследование взаимосвязи между строением комплексных соединений и их динамическим поведением в растворе, – рассказал **Михаил Бухаров**. – В качестве модельных соединений мы взяли комплексы меди с аминокислотами и некоторыми олигопептидами, и этот выбор совсем не случаен. Если говорить об аминокислотах, то они являются структурными единицами нашего организма и присутствуют во всех белках. Так же значимы для организма человека и ионы меди, которые служат активными центрами в некоторых медьсодержащих ферментах. Соответственно, изучая модельные соединения, можно судить о структуре таких ферментов и приблизиться к пониманию их функционирования».*

Если говорить о практическом применении получаемых учеными результатов, то следует отметить, что в Научно-исследовательской лаборатории координационных соединений Химического института им. А.М. Бутлерова ведутся исследования потенциальных противоопухолевых препаратов, которые состоят из композиций аминокислот с микроэлементами, и, таким образом, проводимые исследования помогут объяснить механизм действия этих композиций, а значит, и добиться определенных результатов в лечении онкологических заболеваний.

Кстати, принципиальная новизна реализуемого проекта заключается, во-первых, в том, что исследователи применяют совокупность методов при изучении комплексов меди с аминокислотами, а во-вторых, в том, что казанские ученые одни из немногих, кто стремится понять механизмы действия лекарств, понять происходящие при этом химические процессы.

*«На сегодняшний день мы уже исследовали комплексы меди с некоторыми аминокислотами, и по результатам этих работ опубликованы статьи в таких крупных журналах, как «Physical Chemistry Chemical Physics» и «Inorganic Chemistry», – рассказал **Михаил Бухаров** о полученных результатах. – Кроме того, нам удалось доказать, что координационное число меди(II) в растворе, то есть конкретное число лигандов (атомов, молекул, ионов), которые присоединяются к иону меди, зависит*

от самих лигандов. Раньше традиционно считалось, что медь(II) в растворе имеет шесть координационных положений для связывания с лигандами, поскольку именно такая схема чаще всего реализуется в кристаллах, однако с начала 2000 г. в литературе часто появляется информация о возможной пента- или тетракоординации меди(II). В наших работах мы показали, что количество мест для координации зависит от самих координирующихся лигандов: чем сильнее связываются лиганды, тем более вероятна пентакоординационная структура». Такие знания необходимы ученым, чтобы понять механизмы фермент-субстратных взаимодействий и, соответственно, они могут быть полезными при разработке новых биологически активных соединений.

В дальнейшем исследователи планируют расширить количество рассматриваемых аминокислот и олигопептидов, понять, от каких именно особенностей структуры лигандов зависит динамическое поведение комплексов в растворе.

О значимости реализуемого проекта свидетельствует тот факт, что его результаты были доложены на крупных международных конференциях: например, Международной Чугаевской конференции, Международной школе-конференции студентов, аспирантов и молодых ученых «Биомедицина, материалы и технологии XXI века». «Ежегодно наша научная группа ездит в город Саров на конференцию по математическому моделированию – «Математика и математическое моделирование», – подчеркнул **Михаил Бухаров**. – Дело в том, что в нашей работе широко используются методы математического моделирования: мы не только экспериментально исследуем выбранные соединения, но и моделируем их структуру и поведение методами квантовой химии и молекулярной динамики».

В реализации проекта задействованы четыре сотрудника лаборатории координационных соединений, включая заведующего лабораторией В.Г. Штырлина, главного инженера проекта Э.М. Гилязетдинов и аспиранта Н.Ю. Серова, однако в проведении исследований помогают и представители кафедры квантовой электроники и радиоспектроскопии Института физики КФУ и

немецкие коллеги из Технического университета Ильменау.