**Биядерный нитрозильный комплекс железа с 4-ацетамидотиофенолилом: распад в различных растворителях и его взаимодействие с альбумином и глутатионом**

***Новикова В.О.,1 Покидова О.В.,1 Емельянова Н.С.,1 Куликов А.В.,1 Санина Н.А.1,2,3***

*Аспирант, 3 год обучения*

*1Федеральный исследовательский центр проблем химической физики и медицинской химии РАН, г. Черноголовка, Россия  
2Московский Государственный Университет имени М.В. Ломоносова, г. Москва, Россия  
3Научно-образовательный центр «Медицинская химия» Московского государственного областного университета, г. Мытищи, Россия  
E-mail: veronika@icp.ac.ru*

Нитрозильные комплексы железа (НКЖ) известны как потенциальные экзогенные спонтанные доноры монооксида азота (NO). Биологические эффекты, оказываемые NO, варьируются от положительных (регуляция просвета кровеносных сосудов, влияние на адгезию тромбоцитов, участие в передаче нейронных сигналов и др.) до негативных (цитотоксичность и т. д.).

В настоящей работе был изучен процесс распада НКЖ с 4-ацетамидотиофенольными лигандами состава [Fe2(C8H8NOS)2(NO)4] (комплекс 1) [1]. Тиол, входящий в состав комплекса, поглощает стабильные свободные радикалы, что позволяет прогнозировать потенциальную антирадикальную активность данного НКЖ, также он проявил антиагрегантный эффект.

Нитрозильные комплексы в водных растворах и ДМСО распадаются, а в биологических системах ряд НКЖ обменивает свои тиолиганды на аминокислотные группы белков [2]. В настоящем исследовании мы проанализировали основные пути трансформации комплекса 1. Для этого были рассмотрены бычий сывороточный альбумин (БСА) – транспортный белок, который является основным переносчиком НКЖ в живых системах, а также самый распространённый небелковый тиол в организме – восстановленный глутатион (GSH).

Исследование проводили с помощью теоретических квантово-химических расчетов и экспериментальных методов: УФ-, ЭПР- спектроскопии, а также по накоплению ионов NO2¯ (основных продуктов аэробного окисления NO в растворе) – реакции Грисса.

На основе полученных результатов были сделаны следующие выводы: в присутствии GSH стабильный биядерный комплекс с двумя глутатионовыми лигандами не образуется, на скорость высвобождения NO-групп, как и на глубину реакции, GSH не оказывает влияние; в реакционной смеси с БСА отсутствует высокомолекулярный НКЖ с алифатическими тиолигандами, при этом выделяется в 5 раз больше NO групп, чем без белка из-за стабилизации комплекса 1 на его поверхности.

Таким образом, было установлено, что БСА может взаимодействовать с комплексом 1 и модулировать его свойства как потенциального лекарственного препарата в процессе его биотрансформации.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-73-10049, https://rscf.ru/en/project/22-73-10049/. Исследование распада комплекса в ДМСО выполнено по теме Государственного задания № 124020500019-2.*

**Литература**

1. Pokidova O.V., Novikova V.O., Emel’yanova N.S., Mazina L.M., Konyukhova A.S., Ovanesyan N.S., Kulikov A.V., Balakina A.A., Sanina N.A. Binuclear nitrosyl iron complex with 4-acetamidothiophenolyl: Synthesis and study of its decomposition in a system with glutathione and albumin // Polyhedron. 2024. Vol. 250. P. 116819.
2. Wu C.R., Huang Y. Da, Hong Y.H., Liu Y.H., Narwane M., Chang Y.H., Dinh T.K., Hsieh H.T., Hseuh Y.J., Wu P.C., Pao C.W., Chan T.S., Hsu I.J., Chen Y., Chen H.C., Chin T.Y., Lu T. Te. Endogenous Conjugation of Biomimetic Dinitrosyl Iron Complex with Protein Vehicles for Oral Delivery of Nitric Oxide to Brain and Activation of Hippocampal Neurogenesis // JACS Au. 2021. Vol. 1, № 7. P. 998–1013.