

## SYNTHESIS, CHARACTERIZATION AND BIOLOGICAL STUDY OF NEW DINUCLEAR ZINC(II) AND NICKEL(II) OCTAAZA MACROCYCLIC COMPLEXES

Milena P. Krstić<sup>1\*</sup>, Branka B. Petković<sup>2</sup>, Miloš Milčić<sup>3</sup>, Dušan Mišić<sup>1</sup>, Juan Francisco Santibanez<sup>4,5</sup>

<sup>1</sup>Faculty of Veterinary Medicine, University of Belgrade, Bulevar oslobođenja 18, 11000 Belgrade, Serbia

<sup>2</sup>Department of Chemistry, Faculty of Natural Sciences and Mathematics, University of Priština, Lole Ribara 29, 38220 Kosovska Mitrovica, Serbia

<sup>3</sup>Center for Computational Chemistry and Bioinformatics, University of Belgrade – Faculty of Chemistry, Studentski trg 12–16, Belgrade, Serbia

<sup>4</sup>Institute for Medical Research, P.O. Box 102, 11129 Belgrade, Serbia

<sup>5</sup>Centro Integrativo de Biología y Química Aplicada (CIBQA), Universidad Bernardo O'Higgins, General Gana 1780, Santiago 8370854, Chile

milena@vet.bg.ac.rs

Two new nitrate complexes of zinc and nickel with 1,4,8,11-tetrakis(2-pyridylmethyl)-1,4,8,11-tetraazacyclotetradecane (tpmc), have been synthesized and characterized. The IR spectral peaks showed that the coordinated and ionic nitrate ions are in agreement with the formula proposed by elemental analysis. Conductometric titrations predicted methanol to be a convenient solvent for synthesis and revealed the stoichiometry of the complexes, while molar electrical conductivities indicated a 1 : 3 complex electrolyte type for the zinc complex, and a 1 : 2 complex electrolyte type for the nickel complex. The optimized complex structure was obtained by molecular modeling and density functional theory calculations. The biological activity of the novel complexes was examined by screening eight different bacterial strains and two cancer cell lines. The zinc complex showed better antimicrobial activity against the bacterial strains, while the complexes did not show significance antiproliferative activity toward cancer cells MCF-7 and MDA-MB-231.

**Keywords:** zinc; nickel; tpmc; complex; biological activity

### СИНТЕЗА, КАРАКТЕРИЗАЦИЈА И БИОЛОШКО ИСПИТУВАЊЕ НА НОВИ ДИНУКЛЕАРНИ ЦИНК(II) И НИКЕЛ(II) ОКТААЗА МАКРОЦИКЛИЧНИ КОМПЛЕКСИ

Синтетизирани и карактеризирани се два нови комплекса со 1,4,8,11-тетракис(2-пиридилметил)-1,4,8,11-тетраазациклотетрадекан (tpmc) како лиганд. Спектралните IR пикови покажуваат дека координираните и јонските нитратни јони се во согласност со формулата што произлегува од елементната анализа. Кондуктометриските титрации предвидуваат дека метанолот е соодветен растворувач за синтеза и ја даваат стехиометријата на комплексите, додека моларните електрични кондуктивности укажуваат на 1 : 3 електролитен тип на комплекс за комплексот на цинк и 1 : 2 електролитен тип на комплекс за комплексот на никел. Оптимизираната комплексна структура е добиена со молекулско моделирање и теоретски пресметки на функционалот на густина. Биолошката активност на новите комплекси беше испитана со анализа на осум различни бактериски видови и со размножување на два вида канцерогени клетки. Комплексот на цинк покажува подобра антимикуробна активност кон бактериските видови, додека комплексите немаат значајна антиразмножувачка активност кон клетките на рак MCF-7 и MDA-MB-231.

**Клучни зборови:** цинк; никел; tpmc; комплекс; биолошка активност