

一个镍(II)配合物的合成、晶体结构及其与 鲑鱼精 DNA/BSA 作用的光谱学研究

彭程佳¹, 王克华^{1*}, 陆为学¹, 管纯倩¹, 胡雅静¹, 马双¹, 朱明昌², 高恩君²

1. 鞍山师范学院化学与生命科学学院, 辽宁 鞍山 114007

2. 沈阳化工大学配位化学研究室, 辽宁 沈阳 110142

摘要 合成了配合物 $[\text{Ni}(2,2'\text{-biby})(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot (\text{Htba})_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ 单晶, 分子式中 2,2'-biby 为 2,2'-联吡啶, H_2tba 为 2-硫代巴比妥酸。通过红外光谱、元素分析和单晶 X-射线衍射表征其结构, 单晶 X-射线衍射结果表明, 该配合物单晶属于正交晶系, Pbca 空间群, 晶胞参数为 $a=13.662(2) \text{ \AA}$, $b=19.470(4) \text{ \AA}$, $c=21.590(4) \text{ \AA}$ 。应用紫外光谱和荧光光谱研究了其与鲑鱼精 DNA/牛血清白蛋白(BSA)的相互作用, 研究表明, 标题化合物与 DNA 为静电结合, 对牛血清白蛋白发生静态猝灭作用。

关键词 配合物; DNA 作用; BSA 作用; 晶体结构

中图分类号: O611.3 **文献标识码:** A **DOI:** 10.3964/j.issn.1000-0593(2019)02-0559-06

引言

DNA 是重要的基因遗传物质, 控制着蛋白质合成、细胞分裂和器官生长等生命过程, 同时也是抗肿瘤药物的主要靶标分子之一, 小分子与 DNA 相互作用方式主要分为共价键合和非共价键合两种作用模式, 其中非共价键合又分为嵌插作用、静电结合和沟内结合等^[1-3]。小分子化合物与 DNA 相互作用研究对发现高效低毒抗肿瘤药物和 DNA 的结构探针分子具有重要的科学意义, 并且为从分子水平上解释抗癌药物的作用机理提供重要理论依据。顺铂(顺式二氯二氨合铂)是无机类抗肿瘤药物的里程碑式化疗药物, 其作用机理是与 DNA 的鸟嘌呤碱基 N7 发生共价键合, 形成 1,2-链内交叉的加合物, 改变了 DNA 的构型, 阻止了癌细胞转录和复制, 从而发挥了其抗癌活性^[4-5]。为解决顺铂的肾毒性、癌细胞耐药性等毒副作用而研发成功的卡铂、奥沙利铂和洛铂等铂类抗癌药物, 都是在 DNA 共价键合的相似作用机理基础上对顺铂在结构上进行修饰, 从而降低了顺铂某些方面的毒副作用。

2,2'-联吡啶是经典的螯合配体, 2-巯基巴比妥酸及其衍生物是重要的医药中间体, 部分化合物具有抗肿瘤、抗菌等生物活性, 同时它含有的巯基、嘧啶和羟基基团能与过渡金

属离子和稀土金属离子形成丰富多样的配位模式^[6-8], 另外, 2-巯基巴比妥酸在结构上与 DNA 的碱基对具有相似性, 使其在生物化学研究中具有了特殊意义。本研究以 2,2'-联吡啶和 2-巯基巴比妥酸为配体与硫酸镍反应, 成功合成了镍配合物单晶, 应用红外光谱、元素分析和 X-射线单晶衍射表征了化合物结构, 采用吸收光谱和荧光光谱研究了其与鱼精 DNA 和牛血清白蛋白(BSA)的作用模式, 研究表明标题化合物与 DNA 发生静电作用, 对牛血清白蛋白具有静态猝灭作用。

1 实验部分

1.1 试剂与仪器

六水硫酸镍(AR), 2-巯基巴比妥酸(AR), 氢氧化钠(AR), 无水乙醇等试剂购自国药集团化学试剂有限公司, 鲑鱼精 DNA(BR), 牛血清白蛋白(BR), 溴化乙锭(BR)等试剂购自 Sigma-Aldrich 公司。

IR-470 傅里叶变换红外光谱仪(美国, Nicolet 公司), SMART CCD 1000 X-射线单晶衍射仪(美国, Bruker 公司), Cary 50 Conc 紫外-可见吸收光谱仪(美国, Varian 公司), Cary Eclipse 荧光光谱仪(美国, Varian 公司), 240C 元素分析仪(美国, Perkin-Elmer 公司)。

收稿日期: 2017-10-25, 修订日期: 2018-03-11

基金项目: 国家自然科学基金项目(21671138), 鞍山市科技计划项目(2014MS15)和辽宁省大学生创新创业项目(201610169004)资助

作者简介: 彭程佳, 1990 年生, 鞍山师范学院化学与生命科学学院本科生 e-mail: 1667277850@qq.com

* 通讯联系人 e-mail: khwang16@163.com

1.2 配合物的合成

在搅拌状态下,向 20 mL 0.1 mol · L⁻¹ 的 2-巯基巴比妥酸水溶液中逐滴加入 0.1 mol · L⁻¹ 的硫酸镍水溶液 10 mL,再向混合液中滴加 0.1 mol · L⁻¹ 的 2,2'-联吡啶的乙醇溶液 10 mL,用氢氧化钠溶液调节 pH 为 5.0,滴加完成后反应 30 min. 过滤静止 2 周后有粉色块状晶体析出. IR 检测 (KBr, cm⁻¹): 3 072 (s), 1 600 (m), 1 529 (m), 1 442 (s), 1 371 (s), 1 307 (s), 1 168 (m), 1 016 (s), 769 (s), 524 (s). 按 C₁₈H₃₂N₆NiO₁₃S₂ (663.33), 元素分析理论值 (%): C, 32.59; N, 12.67; H, 4.86. 实际值 (%): C, 32.52; N, 12.59; H, 4.80.

1.3 单晶结构的测定

挑选尺寸为 0.2 mm × 0.2 mm × 0.2 mm 大小的晶体置于单晶衍射仪上,在 296.15 K 温度下,经石墨单色器纯化后的 Mo-Kα(λ=0.710 73) 射线进行衍射实验,共收集 33 255 个衍射点,其中独立衍射点为 6 603 个(R_{int}=0.092 3),衍射数据经 LP 吸收校正后,使用 OLEX 1.2 和 SHELXTL 软件解析晶体结构^[9-10]. 标题配合物的晶体学数据列于表 1,主要键长键角见表 2. CCDC: 1581679.

表 1 配合物的晶体学数据

Table 1 Crystal data and refinement for [Ni(2,2'-bipy)(H₂O)₄] · (Htba)₂ · 5H₂O

Empirical formula	C ₁₈ H ₃₂ N ₆ NiO ₁₃ S ₂
Formula weight	663.33
Temperature/K	296.15
Crystal system	orthorhombic
Space group	<i>Pbca</i>
<i>a</i> /Å	13.662(2)
<i>b</i> /Å	19.470(4)
<i>c</i> /Å	21.590(4)
α/(°)	90.00
β/(°)	90.00
γ/(°)	90.00
Volume/Å ³	5 743.2(17)
<i>Z</i>	8
ρ _{calc} /(g · cm ⁻³)	31.534
μ/mm ⁻¹	0.892
Crystal size/mm ³	0.2 × 0.2 × 0.2
Radiation	MoKα(λ=0.710 73)
θrange/(°)	4.18~55.18
Reflections	33 255/6 603
Collected/unique/R _{int}	33 255/6 603/0.092 3
Data/restraints/parameters	6 603/1/362
Goodness-of-fit on F ²	1.041
R ₁ , wR ₂ (I ≥ 2σ(I))	0.061 1, 0.150 9
R ₁ , wR ₂ (all data)	0.133 8, 0.195 3
Largest diff. peak/hole/(e · Å ⁻³)	0.64/-0.41

1.4 配合物与 DNA 相互作用研究

1.4.1 紫外-可见吸收光谱测定

向比色皿参比池和样品池中分别加入等体积的 Tris-

HCl 缓冲液 (tris 浓度为 5 mmol · L⁻¹, NaCl 浓度为 50 mmol · L⁻¹) 和配合物溶液,依次用等量的 DNA 的溶液加入参比溶液和样品溶液中,反应 30 min 后,在 200~400 nm 进行紫外光谱扫描。

表 2 配合物的部分键长和键角

Table 2 Selected bond distances (Å) and bond angles (°) for [Ni(2,2'-bipy)(H₂O)₄] · (Htba)₂ · 5H₂O

Ni(1)-O(5)	2.048(3)	Ni(1)-O(7)	2.071(3)
Ni(1)-O(6)	2.073(3)	Ni(1)-O(8)	2.053(4)
Ni(1)-N(5)	2.078(4)	Ni(1)-N(6)	2.083(4)
S(2)-C(5)	1.677(4)	S(1)-C(1)	1.681(4)
O(2)-C(4)	1.255(5)	O(4)-C(8)	1.280(5)
O(1)-C(2)	1.264(5)	O(3)-C(6)	1.267(5)
N(4)-C(8)	1.371(5)	N(4)-C(5)	1.349(5)
N(2)-C(4)	1.396(5)	N(2)-C(1)	1.336(5)
N(3)-C(5)	1.348(5)	N(3)-C(6)	1.392(5)
N(1)-C(1)	1.344(5)	N(1)-C(2)	1.384(5)
N(6)-C(18)	1.321(7)	N(6)-C(14)	1.345(7)
N(5)-C(13)	1.358(7)	N(5)-C(9)	1.335(7)
O(5)-Ni(1)-O(7)	84.36(12)	O(5)-Ni(1)-O(6)	87.98(13)
O(5)-Ni(1)-N(5)	93.60(17)	O(6)-Ni(1)-O(7)	170.69(12)
O(7)-Ni(1)-N(6)	93.95(13)	O(7)-Ni(1)-N(5)	94.37(13)
O(7)-Ni(1)-O(8)	88.78(13)	O(6)-Ni(1)-O(8)	86.18(14)

1.4.2 荧光猝灭测定

向比色皿中加入 3 mL EB-DNA 溶液,依次加入等量的配合物溶液,反应 30 min 后,以 525 nm 作为激发波长,扫描 550~700 nm 的荧光光谱。

1.5 配合物与 BSA 相互作用研究

1.5.1 BSA 荧光猝灭滴定

将 BSA 溶于 Tris-HCl 缓冲液 (tris 浓度为 5 mmol · L⁻¹, NaCl 浓度为 50 mmol · L⁻¹) 中配置成 1.5 mmol · L⁻¹ 的溶液,取 0.2 mL BSA 溶液、一定量的配合物溶液并用 Tris-HCl 缓冲液定容为 10 mL (BSA 的浓度为 30 μmol · L⁻¹),以 295 nm 波长为激发波长,扫描 300~500 nm 的荧光发射光谱。

1.5.2 BSA 紫外光谱滴定

取 10 μL BSA 溶液、一定量的配合物溶液并用 Tris-HCl 缓冲液定容为 10 mL (BSA 的浓度为 15 μmol · L⁻¹),以 Tris-HCl 缓冲液为参比溶液,在 200~350 nm 之间进行紫外光谱扫描。

2 结果与讨论

2.1 晶体结构

如图 1, X-射线单晶衍射结果表明,标题配合物单晶为正交晶系, *Pbca* 空间群,在一个非对称单元中存在一个二价阳离子配合物 [Ni(2,2'-bipy)(H₂O)₄] 和 2 个一价 2-巯基巴比妥酸配体结晶以及 5 个结晶水. 镍中心离子与 2 个来自于一个 2,2'-联吡啶的 N 原子及 4 个配位水分子的氧原子配位,

形成了一个六配位八面体构型。Ni(1)-N(5)和 Ni(1)-N(6)的键长分别为 2.078(4)和 2.083(4) Å, Ni—O 键长在 2.048(3)和 2.073(3) Å 之间,这与文献[11]报道的镍配位化合物中 Ni—N 键长和 Ni—O 键长相近。2-巯基巴比妥酸脱质子化后并未参与配位,但在形成三维超分子结构中起到重要作用,其嘧啶环与 2,2'-联吡啶的吡啶环形成较强的芳环堆积作用(嘧啶环中心距离吡啶环中心为 3.678 Å),它还与水分子形成氢键弱相互作用(O3...O7 距离 2.690 Å, O3...O13 距离 2.880 Å, O4...O6 距离 2.718 Å),另外结晶水之间,结晶水与配位水之间以及与 2-巯基巴比妥酸之间也形成较强的氢键,在这些弱相互作用的协同下,标题配位化合物形成了复杂的三维网络结构如图 2, 2-巯基巴比妥酸作为超分子连接子的作用与文献[12]报道的配位超分子化合物中的对苯二羧酸作用类似。

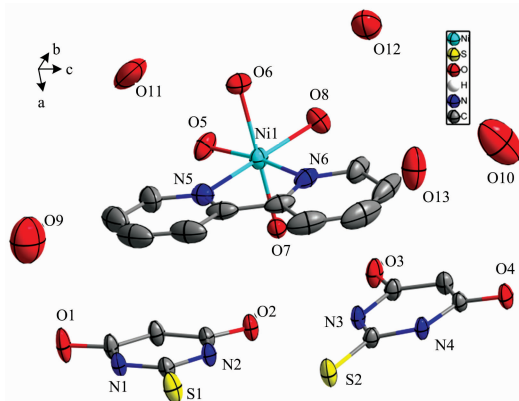


图 1 配合物中 Ni(II) 离子的配位环境

Fig. 1 The coordination environment of Ni(II) ions in compound $[\text{Ni}(2,2'\text{-bipy})(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot (\text{Htba})_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$

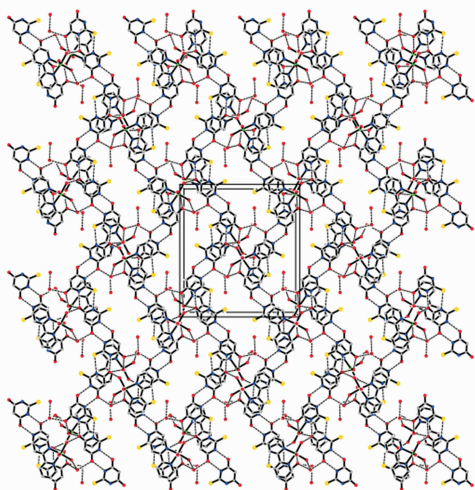


图 2 配合物的三维超分子结构

Fig. 2 The 3D Supramolecular structure of complex $[\text{Ni}(2,2'\text{-bipy})(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot (\text{tba})_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ via hydrogen bonding and $\pi \cdots \pi$ stacking

2.2 配合物与 DNA 作用的吸收光谱研究

鱼精 DNA 是一种具有 A-DNA 特点的 DNA, 并有深且

窄的大沟和浅且宽的小沟, 廉价易得而广泛应用于小分子金属配合物与 DNA 的相互作用。紫外-可见吸收光谱是研究小分子化合物与 DNA 相互作用模式和强度的最方便和最有效的方法之一^[13]。过渡金属配合物的紫外吸收光谱是分子中电子在不同能级分子轨道间跃迁而产生的光谱, 依据电子跃迁的机理, 可将过渡金属配合物的电子光谱分为配体内部电子跃迁光谱、配体向金属离子或金属离子向配体的电子跃迁光谱和金属离子 *d* 轨道间跃迁光谱。当配合物溶液中加入 DNA 后, 若配合物与 DNA 发生相互作用, 其电子跃迁的能级和跃迁能发生变化, 配合物的特征吸收谱带发生红移或蓝移, 同时伴随减色或增色现象。一般认为, 配合物与 DNA 发生嵌插作用时, 其紫外吸收峰发生减色和红移效应, 而若配合物与 DNA 发生静电作用时, 该配合物的吸收峰红移幅度很小, 同时发生明显的增色现象^[14-15]。如图 3 所示, 配合物紫外光谱中 245 nm 的紫外吸收峰应为 2,2'-联吡啶配体内 $\pi \rightarrow \pi^*$ 轨道的跃迁, 而 293 和 310 nm 的吸收峰应归属于 2,2'-联吡啶配体到镍离子的有机配体向金属的电子跃迁。随着 DNA 的加入, 配合物的紫外吸收峰发生明显增色效应, 说明配合物与 DNA 的作用模式有可能为静电结合作用^[16-17]。

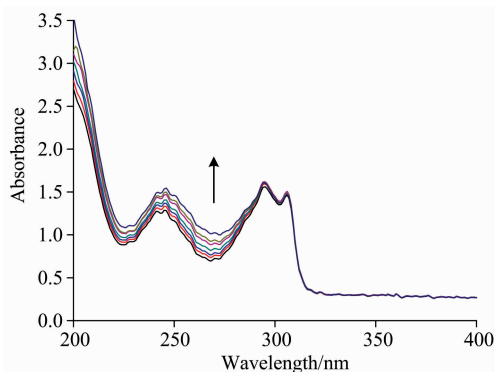


图 3 配合物随 DNA 浓度增加的紫外吸收光谱

Fig. 3 Electronic absorption spectra of the title complex in absence and presence of increasing DNA (complex, $40 \mu\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$; DNA: 0, 5, 10, 15, 20, 25, 30 $\mu\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$)

2.3 配合物与 DNA 作用的荧光猝灭研究

溴化乙锭(EB)是能与 DNA 发生嵌插作用的染料分子, 其自身的水溶液荧光强度很弱, 但当插入 DNA 碱基后, 由于 DNA 内部疏水作用致使其荧光大大幅度增强。当 DNA-EB 体系中加入能够与溴化乙锭竞争插入 DNA 碱基对的小分子后, 溴化乙锭分子被置换出来, DNA-EB 体系发生荧光猝灭, 猝灭程度的大小可以解释小分子与 DNA 作用模式。如图 4(a)所示, DNA-EB 体系在 525 nm 光激发下在 602 nm 有较强的荧光发射, 但随着标题化合物的加入, 荧光强度逐渐猝灭, 当配合物浓度达到 $4.0 \mu\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 时, 荧光强度猝灭达到 18%。根据 Stern-Volmer 方程, $F_0/F = K_q[Q] + 1$, 式中 F_0 为未加入猝灭剂时荧光强度, F 为加入猝灭剂时荧光强度, Q 为猝灭剂浓度, K_q 为荧光猝灭常数。以 F_0/F 为纵坐标, Q 的浓度为横坐标作图, 如图 4(b)所示, 可得 K_q 为 5.4×10^3 , 该猝灭常数低于与 DNA 插入作用的分子的猝灭

常数^[14], 与 DNA 静电作用的化合物的猝灭常数相近^[18], 结合紫外光谱研究结果, 标题化合物与 DNA 作用模式应为静电作用, 从分子结构上分析该化合物为阳离子型配合物, 非常容易与 DNA 表面的丰富的负电性的磷酸根发生静电作用。

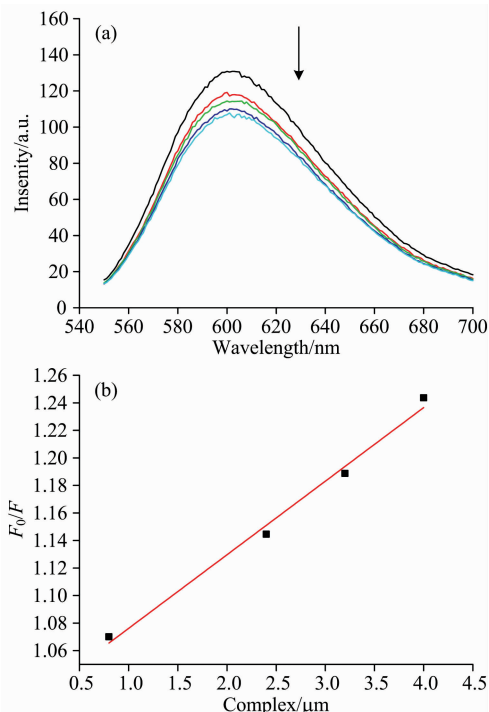


图 4 (a) 配合物对 DNA-EB 体系的荧光光谱的影响; (b) 荧光猝灭与配合物浓度的关系

Fig. 4 (a) The fluorescence spectra of the DNA-EB system in absence and presence of the title complex (DNA, $50 \mu\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$; EB, $5 \mu\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$; complex: 0, 0.75, 2.5, 3.25, 4.0 $\mu\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$); (b) Plot of F_0/F versus $[Q]$ for titration of the title complex with DNA-EB system

2.4 配合物与 BSA 作用研究

血清白蛋白在药物在人体内的运输、存储和释放等过程中发挥关键性作用, 药物小分子与白蛋白的相互作用影响药物的靶向性目标扩散能力和人体内药物的利用率, 因而, 小分子化合物与血清白蛋白相互作用研究对药物设计、开发具有重要的意义。由于 BSA 与人血清白蛋白在结构和组成具有高度的相似性, 而广泛用于药物的研究和开发。BSA 因含有的酪氨酸、色氨酸和苯丙氨酸等氨基酸残基使其具有内源性荧光发射性质, 如图 5 所示, 在激发波长 295 nm 的条件下, 固定浓度 $30 \times 10^{-5} \text{ mol} \cdot \text{L}^{-1}$ 的 BSA 在 349 nm 处具有较强的荧光发射, 在保持 BSA 浓度不变的体系中逐渐增加标题化合物浓度, 其荧光强度逐渐降低, 说明标题化合物与 BSA 发生了相互作用。为了研究标题化合物猝灭 BSA 荧光的机理, 我们依据 Stern-Volmer 方程^[19]: $F_0/F = 1 + K_{sv}[Q] = 1 + K_q\tau_0[Q]$ 计算了标题化合物与 BSA 相互作用的能力, 式中 F_0 和 F 分别为加入配合物前后体系的荧光强度, $[Q]$ 为配合

物的摩尔浓度, K_{sv} 为 Stern-Volmer 常数, K_q 为猝灭速率常数, τ_0 为未加入标题化合物时体系的荧光寿命, 其值为 10^{-8} s 。以 $[Q]$ 为横坐标, F_0/F 为纵坐标作图, 其拟合直线的斜率即为 K_{sv} 值, 进而可计算得 K_q 值, 经计算得 K_{sv} 值和 K_q 值分别为 2.11×10^5 和 2.11×10^{13} , 标题化合物荧光猝灭速率常数 K_q 值远远大于 2.0×10^{10} , 说明其对 BSA 荧光猝灭为静态猝灭, 在配合物与 BSA 相互作用过程中配合物与 BSA 的氨基酸残基发生了共价键合作用^[20]。为进一步研究标题化合物与 BSA 的结合常数和结合位点, 应用 Scatchard 方程^[21] $\lg(F_0 - F)/F = \lg K + n \lg [Q]$, 式中 F_0 和 F 分别为加入配合物前后体系的荧光强度, $[Q]$ 为配合物的摩尔浓度, K 为结合常数, n 为结合位点数, 以 $\lg(F_0 - F)/F$ 对 $\lg [Q]$ 作图, 斜率即为 n , 由截距可以求得 K 。经计算可知, 标题配合物与 BSA 的结合常数为 6.02×10^4 , 结合位点数为 0.89, 说明标题化合物与 BSA 只有一个键合点^[20]。此外, 通过紫外可见吸收光谱, 观察 BSA 加入配合物前后其紫外吸收峰的变化, 如图 6 所示, 当加入标题化合物后 BSA 在 278 nm

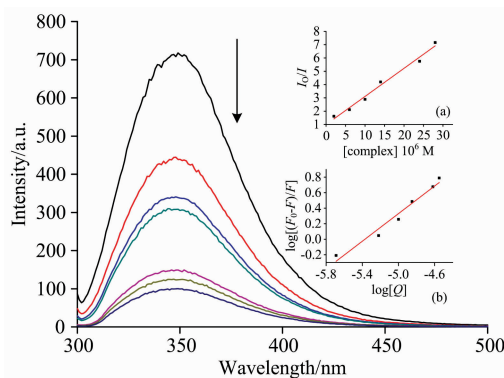


图 5 配合物对 BSA 荧光光谱的影响

(a): Stern-volmer 图; (b): 配合物与 BSA 作用的 Scatchard 图
Fig. 5 The emission spectra of the BSA in presence of increasing amounts of the title complex (BSA, $30 \mu\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$; complex: 0, 2, 6, 10, 14, 24, 28 $\mu\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$)
inset: (a): The stern-volmer plot;
(b): Scatchard plot of the compound with BSA

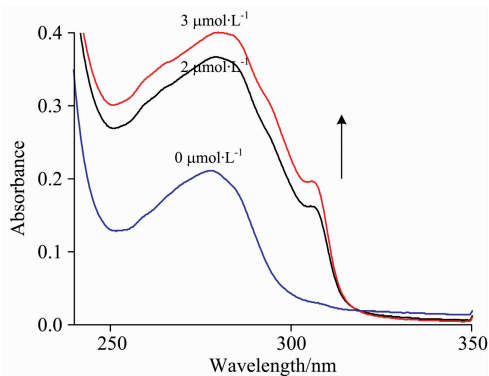


图 6 配合物对 BSA 吸收光谱的影响

Fig. 6 Electronic absorption spectra of BSA in absence and presence of increasing the title complex (BSA, $15 \mu\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$; complex: 0, 2, 3 $\mu\text{mol} \cdot \text{L}^{-1}$)

的紫外峰发生增色,说明配合物与 BSA 发生反应生成了基态复合物,进一步证明了配合物静态猝灭 BSA 的机理。

3 结 论

采用溶液挥发法成功合成了镍(II)配合物单晶,经红外

光谱、元素分析和单晶 X-射线技术表征了化合物结构,应用紫外光谱和荧光光谱从分子水平研究了标题化合物与鱼精 DNA/BSA 的相互作用,结果表明标题化合物与 DNA 静电结合并且对 BSA 具有静态猝灭的作用。

References

- [1] Pages B J, Ang D L, Wright E P, et al. Dalton Transactions, 2015, 44: 3505.
- [2] Wang K H, Gao E J. Anti-Cancer Agents in Medicinal Chemistry, 2014, 14: 147.
- [3] WANG Jia-min, SHI Lei, LIU Hai-yang(王家敏,史 蕾,刘海洋). Progress in Chemistry(化学进展), 2015, 27(6): 755.
- [4] Brabec V, Hrabina O, Kasparkova J. Coordination Chemistry Reviews, 2017, 351(15): 2.
- [5] Amable L. Pharmacological Research, 2016, 106, 27.
- [6] FENG Yang, LI Chuan-bi, ZHAO Li-ting, et al(冯 洋,李传碧,赵丽婷,等). Chinese Journal of Applied Chemistry(应用化学), 2016, 8: 913.
- [7] Golovnev N N, Molokeev M S, Sterkhova I V, et al. Journal of Coordination Chemistry, 2016, 21: 3219.
- [8] Golovnev N N, Molokeev M S, Vereshchagin S N, et al. Journal of Coordination Chemistry, 2015, 11: 1865.
- [9] Wang C, Zhou M S, Yang L J, et al. Chinese Journal of Structural Chemistry, 2017, 36(7): 1210.
- [10] Sheldrick G M. Acta Crystallographica Section C, 2015, C71: 3.
- [11] Dolomanov O V, Bourhis L J, Gildea R J, et al. Journal of Applied Crystallography, 2009, 42(3): 339.
- [12] WEI Qiang, DONG Jian-fang, LI Wen-bin, et al(魏 强,董建方,李文彬,等). Chinese Journal of Inorganic Chemistry(无机化学学报), 2016, 32(5): 789.
- [13] Wang K H, Zhu M C, Wang D L, et al. Journal of Structural Chemistry, 2015, 56(1): 191.
- [14] Zhu M C, Cui X T, Zhao F C, et al. RSC Advances, 2015, 5: 47798.
- [15] FENG Yong-lan, ZHENG Jian-hua, JIANG Wu-jiu, et al(冯泳兰,郑建华,蒋伍玖,等). Chinese Journal of Inorganic Chemistry(无机化学学报), 2014, 12: 2767.
- [16] Hu J Y, Liao C L, Guo Y, et al. Polyhedron, 2017, 132: 28.
- [17] Sathiyaraj S, Buthcer R J, Jayabalakrishnan C. Journal of Molecular Structure, 2012, 1030: 95.
- [18] LIU Yan-cheng, WANG Hai-lu, LIANG Wei-qian, et al(刘延成,王海璐,梁炜乾,等). Journal of Instrumental Analysis(分析测试学报), 2011, 12: 1400.
- [19] Lakowicz J F. Principles of Fluorescence Spectroscopy, 2nd ed. Plenum Press, New York, 1999. 237.
- [20] Zhou X Q, Sun Q, Jiang L, et al. Dalton Transactions, 2015, 44: 9516.
- [21] Anbazhagan V, Renganathan R. Journal of Luminescence, 2008, 128: 1454.

Synthesis, Crystal Structure and DNA/BSA Interaction of a Ni(II) Coordination Compound

PENG Chen-jia¹, WANG Ke-hua^{1*}, LU Wei-xue¹, GUAN Chun-qian¹, HU Ya-jing¹, MA Shuang¹, ZHU Ming-chang², GAO En-jun²

1. School of Chemistry and Life Science, Anshan Normal University, Anshan 114007, China

2. Laboratory of Coordination Chemistry, Shenyang University of Chemical Technology, Shenyang 110142, China

Abstract A Ni(II) coordination complex $[\text{Ni}(2,2'\text{-bipy})(\text{H}_2\text{O})_4] \cdot (\text{tba})_2 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ ($2,2'\text{-bipy} = 2,2'\text{-dipyridine}$, $\text{H}_2\text{tba} = 2\text{-thiobarbituric acid}$) has been synthesized and structurally characterized by IR, element analysis and single crystal X-ray diffraction. The results of single crystal X-ray diffraction displayed that the title compound belongs to orthorhombic with space group of *Pbca*, and its cell parameters are $a = 13.662(2) \text{ \AA}$, $b = 19.470(4) \text{ \AA}$, $c = 21.590(4) \text{ \AA}$. The binding of title compound with Herring sperm DNA/BSA has been investigated by absorption and fluorescence spectra, and the results displayed that the title compound binds with DNA in electrostatic interaction mode, and quenches the intrinsic fluorescence of BSA by a static quenching mechanism.

Keywords Coordination complexes; DNA binding; BSA binding; Crystal structure

(Received Oct. 25, 2017; accepted Mar. 11, 2018)

* Corresponding author