

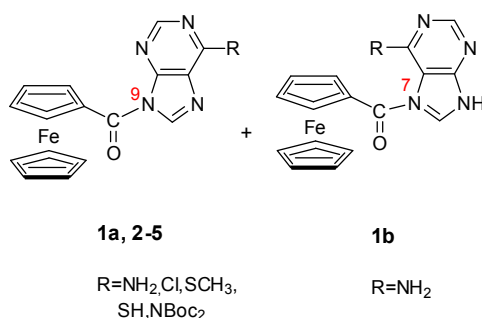
## Ferocenoil-purin konjugati: Regioselektivnost reakcija acilacije

Autori: Toma, Mateja<sup>1</sup>; Filipović, Alma<sup>1</sup>; Lapić, Jasmina<sup>1</sup>; Šakić, Davor<sup>2</sup>; Vrčec, Valerije<sup>2</sup>;  
Djaković, Senka<sup>1</sup>;

<sup>1</sup>Prehrambeno-biotehnološki fakultet, Sveučilište u Zagrebu; <sup>2</sup>Farmaceutsko-biokemijski fakultet, Sveučilište u Zagrebu

Sintetska kopulacija odnosno povezivanje organometalnih spojeva s nukleobazama i nukleinskim kiselinama novije je područje bioorganometalne kemije. Takvi su organometalni konjugati novija generacija spojeva u kojima su izravno povezani organometalni redoks sustavi s temeljnim strukturnim elementima nasljeđivanja. Sinteza ferocenoilnih biokonjugata temelji se na kopulaciji odgovarajućeg ferocenskog derivata s heterocikličkom nukleobazom. [1] U našem je laboratoriju po prvi puta uvedena karbonilna skupina kao „linker“ između ferocena i nukleobaze jer ona, osim što definira prostornu relaciju, omogućuje i elektronsku komunikaciju dvaju fragmenata, organometalnog i heterocikličkog aromatskog sustava. Karbonilna skupina najkraći je molekularni most koji omogućuje produženu konjugaciju između dva funkcionalna dijela organometalnih derivata nukleobaza. [2]

Kako ferocenski dio molekule zamjenjuje šćernu komponentu nukleozida, praćena je regioselektivnost reakcije acilacije prema N<sup>9</sup> položaju derivata purinskih baza. Sintezom ferocenoil-adeninskog kopulata nastala je smjesa N<sup>7</sup> i N<sup>9</sup> izomera u različitim omjerima ovisno o reakcijskim uvjetima (otapalo, temperature aktivacije i kopulacije, baza), dok su kopulati ferocena i purinskih derivata izolirani kao N<sup>9</sup> izomeri. Položaj supstitucije u produktima i regioselektivnost reakcije ispitat će se spektroskopskim metodama (1D i 2D-NMR, FTIR ) i kvantno-mehanijskim izračunima (DFT level of theory) u nastavku istraživanja.



### Literatura:

- [1] K. Kowalski, *Coordination Chemistry Reviews* 317 (2016) 132–156.  
[2] J. Lapić, V. Havelić, D. Šakić, K. Sanković, S. Djaković, V. Vrčec, *Eur. J. Org. Chem.* 24 (2015) 5424-5431.