ПОЛУЧЕНИЕ, КВАНТОВОХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ И ДОКЛИНИЧЕСКАЯ *IN VIVO* ОЦЕНКА ВИЗУАЛИЗИРУЮЩИХ СВОЙСТВ КОМПЛЕКСА $Mn(II)$ С 2,3-ДИМЕРКАПТОЯНТАРНОЙ КИСЛОТОЙ КАК ОНКОСЕЛЕКТИВНОГО ПАРАМАГНИТНОГО КОНТРАСТА ДЛЯ МРТ

**В.Ю. Усов^{1,2}, М.Л. Белянин², В.Д. Филимонов², А.И. Безлепки¹,
О.Ю. Бородин¹, Н.Л. Шимановский³**

¹НИИ кардиологии Томского НИМЦ, 634012, Россия, Томск, ул. Киевская, 111а.

²НИ Томский политехнический университет, 634050, Россия, Томск, ул. Ленина, 43/2.

³РНИМУ им. Н.И. Пирогова, 117997, Россия, Москва, ул. Островитянова, д. 6, стр. 1.

DOI: 10.19163/MedChemRussia2021-2021-117

E-mail: ussov1962@yandex.ru

Целью работы было осуществление синтеза комплекса $Mn(II)$ с димеркаптоянтарной кислотой (ДМСА), средствами квантовохимического анализа оценить его устойчивую структуру, и изучить контрастирующие свойства в структурах опухолевых и нормальных тканей у животных.

Синтез 2,3-димеркаптоянтарной кислоты ($COOH-CHSH-CHSH-COOH$) осуществляли по модифицированной методике А.И. Бусева [1]. Определяли релаксивность R_1 . Визуализацию с $Mn-(ДМСА)_2$ оценивали при МРТ у собак – ветеринарных пациентов с раком молочной железы.

Наиболее устойчивой является молекула $Mn-(ДМСА)_2$. Релаксивность R_1 $Mn-(ДМСА)_2$ в водном растворе 3,2 1/(мм³с). В норме $Mn-(ДМСА)_2$ обеспечивает выраженное усиление паренхимы почек и умеренное – печени, селезенки и тел позвонков. У животных с $Mn-(ДМСА)_2$ усиливал T1-взв.МРТ первичной опухоли (n=7): индекс усиления=1,52±0,19, метастазы в лимфоузлы(n=12): 1,37±0,14; и в головной мозг (n=11): 2,76 ± 0,12.

Рис. 1. Молекулярная структура термодинамически устойчивого комплекса $Mn(II)$ с димеркаптоянтарной кислотой (ДМСА), формирующуюся в условиях избытка димеркаптосульфата, как $Mn-(ДМСА)_2$, по результатам квантово-химического моделирования.

Рис. 2. Визуальная картина парамагнитного контрастного усиления метастазов рака молочной железы у собаки (кокер-спаниель, 8 лет, масса тела 14 кг), при T1-взв. МРТ головного мозга с $Mn-(ДМСА)_2$

$Mn-(ДМСА)_2$ может послужить основой для парамагнитного онкотропного контрастного препарата для клинического применения в МРТ.

Литература

- [1] Бусев А.И. Синтез новых органических реагентов для неорганического анализа. М. МГУ. 1972. 116-118.