

## Etude de la structure électronique de nouveau complexe de platine cyclométallé (II): mode de liaison et type d'interaction avec la guanine.

Abdallah ZAITER <sup>1,2\*</sup>, Bachir ZOUCOUNE <sup>1,2</sup>

<sup>1</sup> Unité de Recherche Chimie de l'Environnement et Moléculaire Structurale URCHEMS - [www.urchems-umc.edu.dz](http://www.urchems-umc.edu.dz)  
 Université Mentouri de Constantine

<sup>2</sup>Laboratoire de Chimie appliquée et Technologie des Matériaux, Université Larbi Ben M'Hidi Oum El Bouaghi, 04000 Oum El Bouaghi, Algeria.

Code CCP 5

Email\* : [hizaiter@yahoo.fr](mailto:hizaiter@yahoo.fr)

### Introduction & Objectifs:

Les complexes de platine ont fait l'objet de nombreuses recherches en raison de leur intérêt pour les activités biologiques [1,2]. Ils sont utiles dans de nombreux processus anticancéreux. L'activité anti-tumorale de différents complexes de platine (II) est associée à la platination de l'ADN, généralement par formation de liaison avec le ligand guanine [3].

### Méthodologie (Matériel et méthodes):

Dans ce contexte, nous nous sommes intéressés à une nouvelle série de ces complexes cyclométallés (II) avec le 1-adamantaneméthylcyanamide (1-ADpcydH) et le 2-[Amino (2-phénylpyridine)] - 1,4-naphtoquinone (1,4-NQ) qui répondent à la formule cis-Pt (1,4-NQ) (1-ADpcyd) (H<sub>2</sub>O) [4].

Des calculs DFT ont été effectués sur les deux complexes cis-Pt (1,4-NQ) (1-ADpcyd) (H<sub>2</sub>O) et cis-Pt (1,4-NQ) (1-ADpcyd) (G) en utilisant les fonctionnelles BP86-D et le B3LYP [5,6], afin de mieux comprendre leurs structures moléculaires et électroniques.

### Résultats et Discussion :

L'analyse de la décomposition énergétique a permis de bien comprendre la liaison entre les deux complexes, ce qui montre que les interactions sont régies par deux tiers de caractères ioniques et un tiers de caractères covalents et qui sont plus fortes entre la guanine et le centre Pt(II) que celles entre la molécule d'eau et le Pt(II).

### Conclusion:

Pour les deux complexes 1 et 2, les interactions électrostatiques sont plus importantes que celles issues des interactions orbitales en raison de la polarité entre la charge positive Pt (II) et son environnement de charge négative des atomes.

**Mots clés:** DFT, B3LYP, complexes de platine, activités biologiques.

### Références bibliographiques

1. P. Chellan, K. M. Land, A. Shokar, A. Au, S. H. An, C. M. Clavel, P. J. Dyson, C. de Kock, P. J. Smith, K. Chibale, et al., *Organometallics*, 2012, 31, 5791–5799.
2. M. Crespo, *Inorganics*, 2014, 2, 115–131.
3. J. D. Roberts, B. van Houten, Y. Qu and N. P. Farrell, *Nucleic Acids Res.*, 1989, 17, 9719–9733
4. F. Sebesta and J. V. Burda, *J. Inorg. Biochem.*, 2017, 172, 100–109.
5. ADF2007.01., *SCM Theoretical Chemistry*, Vrije Universiteit, Amsterdam, The Netherlands, <http://www.scm.com>.
6. A. D. Becke, *J. Chem. Phys.*, 1993, 98, 5642–5648.

