



## Encapsulation of 5-Fluorouracil in a Cu(II)-Based Porous Metal-Organic Framework: Drug Delivery and Anticancer Activity

Lingxin MENG

Department of Orthopedics, The Fourth Affiliated Hospital,  
Zhejiang University School of Medicine, Yiwu 322000, China

**SUMMARY.** Solvothermal reaction of an asymmetric heterofunctional ditopic linker with  $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  gives rise to a robust microporous metal-organic framework with the formula  $\{(\text{H}_3\text{O}^+)[\text{Cu}_2(\text{TZB})_2(\text{CH}_3\text{COO})](\text{DMF})_2(\text{H}_2\text{O})_3\}_n$  (**I**) ( $\text{H}_2\text{TZB}$  = 4-(1H-tetrazol-5-yl)benzoic acid, DMF = N,N-dimethylformamide). Its structure has been determined by single-crystal X-ray diffraction analysis (CIF file CCDC no. 1860338) and further characterized by elemental analyses, powder X-ray diffraction, and thermogravimetric analysis. The efficient encapsulation of an anticancer drug 5-fluorouracil (5-Fu) on the desolvated **I** (**Ia**) has been studied by both grand canonical Monte Carlo simulation and drug release experiments. In addition, *in vitro* anticancer activity of compounds **I** and 5-Fu loaded **Ia** have also been evaluated using MTT assay against three human bone tumor cell lines (MG-63, Saos-2 and U2OS).

**RESUMEN.** La reacción solvotermal de un enlazador ditópico heterofuncional asimétrico con  $\text{Cu}(\text{NO}_3)_2 \cdot 3\text{H}_2\text{O}$  da lugar a un marco microporoso meta-orgánico robusto con la fórmula  $\{(\text{H}_3\text{O}^+)[\text{Cu}_2(\text{TZB})_2(\text{CH}_3\text{COO})](\text{DMF})_2(\text{H}_2\text{O})_3\}_n$  (**I**) ( $\text{H}_2\text{TZB}$  = ácido 4- (1H-tetrazol-5-il) benzoico, DMF = N,N-dimetilformamida). Su estructura ha sido determinada por análisis de difracción de rayos X de monocristales (archivo CIF CCDC N° 1860338) y caracterizada además por análisis elemental, difracción de rayos X del polvo y análisis termogravimétrico. La encapsulación eficaz de un fármaco anticanceroso 5-fluorouracilo (5-Fu) en el **I** (**Ia**) desolvatado se ha estudiado mediante la simulación gran canónica de Monte Carlo y experimentos de liberación del fármaco. Además, la actividad anticancerígena *in vitro* de los compuestos **I** y 5-Fu cargado **Ia** se ha evaluado también usando el ensayo MTT contra tres líneas celulares tumorales óseas humanas (MG-63, Saos-2 y U2OS).

**KEY WORDS:** anticancer activity, drug carrier, metal-organic framework.

\* Author to whom correspondence should be addressed. E-mail: lingxin\_meng666@163.com