

ВСЕРОССИЙСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ
“ПОВЕРХНОСТНЫЕ ЯВЛЕНИЯ В ДИСПЕРСНЫХ СИСТЕМАХ”

УДК 541.11

ГЛИЦИНАТ И ТИРОЗИНАТ МАГНИЯ: РАСЧЕТ СТРУКТУРЫ
И ИК-СПЕКТРОВ МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ¹

© 2024 г. Д. В. Беспалов^a, *, О. А. Голованова^a

^aОмский государственный университет им. Ф. М. Достоевского. Химический факультет, Омск, 644077, Россия

*e-mail: d.v.bespalov@rambler.ru

Поступила в редакцию 10.10.2023 г.

После доработки 10.10.2023 г.

Принята к публикации 15.11.2023 г.

Методом функционала плотности с использованием ВЗЛР в базисах 6–31G(d, p), 6–31G минимизированы энергии и построены структурно динамические модели глицината и тирозината магния. Рассчитаны геометрические параметры, и частоты нормальных колебаний в гармоническом приближении в ИК-спектре моделей представленных соединений. Осуществлен синтез комплекса магния(II) с глицином и тирозином из водных растворов хлорида магния и соответствующих аминокислот. Содержание аминокислот в синтезированных соединениях определяли формольным титрованием по методу Серенсена. Содержание ионов магния(II) – комплексометрическим титрованием. Представлены ИК-спектры синтезированных соединений, измеренные в диапазоне 500–4000 см⁻¹. Интерпретированы расчетные и экспериментальные ИК-спектры синтезированных соединений. Проведено сравнение расчетных ИК-спектров со спектрами синтезированных соединений, сделаны выводы о их строении. Данные о координации соединений ионов магния с АК, могут помочь достоверно установить строение их малоизученных комплексов, а также совершенствовать методы синтеза данных комплексных соединений заданного состава.

Ключевые слова: Метод функционала плотности, глицинат магния, тирозинат магния, ИК-спектр, синтез

DOI: 10.31857/S0044453724070032, EDN: PWRGHF

Взаимодействия ионов магния (II) с биогенными аминокислотами, а также разработка методов для полного исследования этих соединений, представляют собой одно из перспективных научных направлений в области физической химии. Актуальность этой темы заключается в необходимости получения достоверных данных о термодинамических константах устойчивости комплексов ионов магния (II) с аминокислотами. Известно, что ион магния необходим для нормального функционирования множества клеток и тканей организма человека [1–4]. Роль аминокислот же строительная, регулятивная, поддержание работы рецепторов, поддержка иммунитета – они входят в состав мышц, связок, суставов, а также гормонов и ферментов [5]. Следовательно, ион магния и аминокислоты имеют множество областей, в которых возможно их взаимодействие, в процессе которого могут образоваться различные соединения, устойчивость которых

может определять скорость обменных процессов в организме человека. Данные об этих соединениях разнятся, и нуждаются в уточнении. Уточнение требуют их строения, физико-химические свойства, механизм образования в различных условиях, в том числе в организме человека. В настоящее время единой теории с доказательной базой для объяснения различного взаимодействия магния с аминокислотами не существует.

Известно, что биологически активные металлокомплексы, включающие в себя ион магния (II) и аминокислоты (АК) и участвуют в различных реакциях. Эти комплексы могут выполнять каталитическую функцию и участвовать в обменных процессах в организме человека. Ион магния является составной частью минеральной компоненты костной ткани, участвует в формировании биоэлектрического потенциала как антагонист кальция. Также уровень магния в организме человека влияет на специфический и неспецифический иммунный ответ, и сбалансированный гомеостаз магния имеет значение для функции иммунной системы [6] Нарушение обменных процессов иона магния,

¹ Доклад на конференции, посвященной 125-летию со дня рождения академика АН СССР П. А. Ребиндера (Москва, ИФХЭ РАН, 2–6 октября 2023 года)

в том числе по причине комплексобразования, может вызывать патологические процессы, которые являются причиной ряда заболеваний [7–10]. Информация о данных комплексах может найти применения в создании лекарственных препаратов для доставки иона магния и соответствующей АК в организм человека.

Изучение структуры и поведения комплексов магния с АК, как отдельных соединений, поможет более полно понимать процессы, происходящие в тканях и жидкостях организма человека. Такой результат можно достичь при использовании систематического подхода к исследованию процессов, связанных с образованием комплексов магния (II) с АК [11]. Получение новых знаний о свойствах комплексных соединений ионов магния (II) с аминокислотами в кристаллической фазе и через расчетную квантово-химическую модель изолированной молекулы имеет значение для развития фундаментальных знаний о данных комплексных соединениях и может быть применено в биохимических исследованиях. Полученная информация о координации соединений ионов магния с аминокислотами помогает понять строение малоизученных комплексов, а также совершенствовать методы синтеза комплексных соединений с определенным составом и структурой [12].

На сегодняшний день, моделировать молекулярные комплексы возможно используя квантово-химический расчет. По данным литературы [13–16], одним из наиболее достоверных методов, который дает результаты расчета колебательных спектров близких к реальным, является метод теории функционала плотности (DFT). В области $2800\text{--}3800\text{ см}^{-1}$ для нормальных колебаний в ИК-спектроскопии абсолютная ошибка для метода DFT принимает значения не более 5%, а в области $2800\text{--}500\text{ см}^{-1}$ составляет порядка 2%.

Структура и ИК-спектры молекул глицината и тирозината магния, рассчитанные с помощью метода DFT, а также сравнение расчетных спектров с ИК-спектрами, полученными экспериментальным путем являются объектом данного исследования. Расшифровка и интерпретация таких ИК спектров сложная задача, которая до настоящего времени решена не полностью. Предполагается, что рассматриваемые соединения относятся к комплексным, где в качестве комплексобразователя выступают ионы магния(II), в качестве лигандов — глицин (Gly), тирозин (Tyr).

Цель работы — построение моделей глицината и тирозината магния методом DFT (с использованием функционала B3LYP) в базисах 6–31G(p, d), 6–31G реализованного в пакете программ GAMESS (US) и интерпретация расчетных и экспериментальных ИК-спектров глицината и тирозината магния, установления строения данных комплексов.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

Для расчета модельной структуры использовался стандартный пакет программ для квантово-химического моделирования, в котором реализован метод DFT (B3LYP) GAMESS (US). Используемые базисы 6–31G(d, p) и 6–31G являются валентно-расщепленными, содержащими одну основную функцию внутренней оболочки для каждого атома. Для каждой оболочки используется группа из шести гауссовых функций, а также набор из трех гауссовых функций для внутренней и внешней валентной оболочек, в первом случае дополненные поляризационными функциями *p*- и *d*- типа для повышения точности расчета. Для учета влияния конденсированной фазы на физико-химические свойства исследованного соединения использовали модель поляризованного континуума (PCM). В модели PCM полость выбирается путем описывания вокруг атомов сферических полостей с радиусами равными ван-дер-ваальсовым радиусам атомов. Получаемая полость сложного размера значительно правильнее описывает контакты окружающей среды и молекулы [17]. Энергия исследуемой модели соединения магния с аминокислотой приведена к минимальной, рассчитана структура, и частоты нормальных мод для метода ИК-спектроскопии.

За основу был взят метод синтеза аналогичных соединений из работы [18]. Навеску АК (Gly — 0.1125 г, Tyr — 0.2715 г.) растворяли в 10 мл дистиллированной воды, где pH раствора доводили электролизом, на графитовых электродах до значений выше изоэлектрической точки для АК для активации механизма внутрикюнгированного основания. Затем добавляли навеску $m(\text{MgCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}) = 0.3048$ г. Раствор изолировали от солнечного света. При комнатной температуре происходит химическая реакция АК с ионами Mg^{2+} . Через 7 дней образовался осадок, его промыли небольшим объемом воды, и сушили при температуре $40\text{--}50^\circ\text{C}$ для удаления лишней влаги.

Для определения группового состава синтезированного образца был применен метод ИК-спектроскопии. На спектрофотометре ФСМ 2202 (Инфраспек, Россия) были сняты ИК-спектры исследуемых синтезированных соединений ионов магния с АК. Кристаллические образцы измельчали в ступке до состояния порошка, и в таком виде смешивали с КВг, после чего наносили на германиевую кювету и прессовали. Спектр был снят в области $500\text{--}4000\text{ см}^{-1}$, разрешающая способность 4 см^{-1} .

С помощью комплексонометрического титрования проводили определение ионов магния (II). Для этого полученные осадки растворяли в определенном объеме дистиллированной воды. Отбирали 10 мл раствора, добавляли 15 мл аммиачного

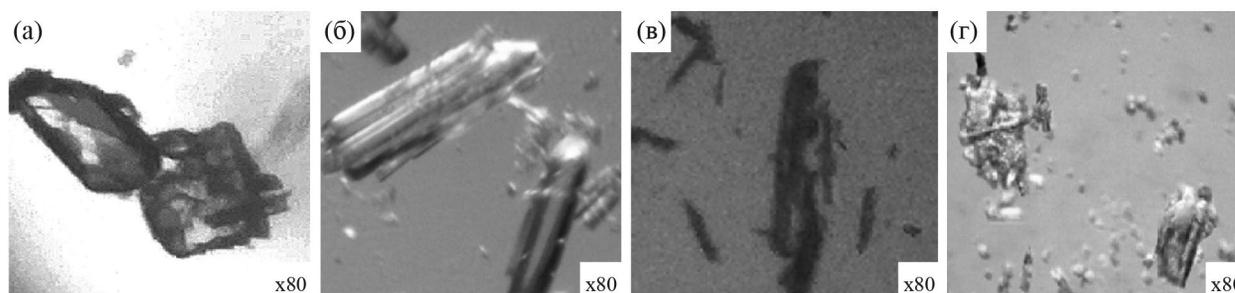


Рис. 1. Осадки под электронным микроскопом XSP-140 с разрешением x80: а) АК – глицин, б) соединение Mg^{2+} : Gly, в) АК – тирозин, г) соединение Mg^{2+} : Tyr.

Таблица 1. Результаты определения молярного соотношения ионов магния (II) и АК в синтезированных соединениях

Определение количества ионов магния (II)			Определение количества аминокислоты	
Соединение	C_n (трилон Б), моль-экв/л	$n(Mg^{2+})$, моль	$C_m(NaOH)$, моль/л	$n(АК)$, моль
Mg^{2+} –Gly	0.01	0.00075	0.1	0.0015
Mg^{2+} –Tyr	0.01	0.0019	0.1	0.0038

буфера и индикатор хромогена черного. Полученный раствор титровали стандартным раствором трилона Б (0.01 Н) до перехода вино-красной окраски в синюю. Проводили три параллельных определения. Результаты усредняли и рассчитывали содержание магния в полученных соединениях.

Содержание аминокислоты определяли формольным титрованием по методу Серенсена. Известную массу исследуемого образца растворили прибавляя воду до объема 20 мл. При необходимости раствор нейтрализовали до pH 7.0 с помощью 0.1 М раствора гидроксида натрия или 0,1 М раствора соляной кислоты. По окончании нейтрализации прибавляли 20 мл 35%-го раствора формальдегида. Полученный раствор перемешивали и титровали 0.1 М раствором гидроксида натрия в присутствии фенолфталеина до появления слабо-розового окрашивания.

Обработка результатов осуществлялась с помощью программ MS Excel 2019 и OriginPro 2021.

ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Синтезированы соединения Mg^{2+} :Gly и Mg^{2+} :Tyr, изучена их морфология, фотографии осадков приведены на рис. 1, сравнение морфологии полученного образца выявило отличие от морфологии соответствующий АК.

Результаты химических анализов содержания магния (II) и аминокислот в синтезированных соединениях и их молярные соотношения

представлены в табл. 1. Анализ полученных результатов показал, что молярное соотношение иона магния (II) и соответствующих аминокислот в полученных соединениях составляет 1:2.

Построены модели предполагаемых соединений, минимизирована энергия молекул глицината и тирозината магния, они равны -767.361 Хартри (-3.345×10^{-15} Дж) и -1443.043 Хартри (-6.291×10^{-15} Дж) соответственно. На рис. 2 приведено строение исследуемого соединения.

В табл. 2 приведены рассчитанные термодинамические характеристики моделей глицината и тирозината магния при стандартной температуре 298.15К. Выбор стандартной температуры дает возможность сопоставления данных с литературными значениями.

На рис. 3 приведены ИК-спектры: расчетный (DFT в базе 6–31G) (а) и экспериментальный (б) для глицината магния.

Анализ расчетного (на примере DFT в базе 6–31G(d, p)) и экспериментального ИК-спектров глицината магния демонстрирует:

1. В спектре модели глицината магния имеются высоко интенсивные полосы $\nu_{as}(C=O)=1652\text{ см}^{-1}$ и $\nu_{as}(C-O)=1278\text{ см}^{-1}$, в то время как в синтезированном соединении Mg^{2+} :Gly наблюдаются подобные полосы $\nu_{as}(C=O)=1634\text{ см}^{-1}$ и $\nu_{as}(C-O)=1278\text{ см}^{-1}$. Погрешность около 2%, можно сделать вывод, что ион Mg^{2+} взаимодействует с карбоксильной группой в синтезированном соединении так же, как и в предполагаемой в модели.

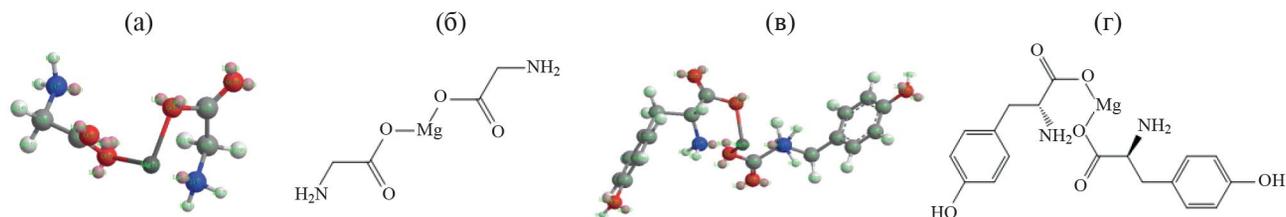


Рис. 2. Расчетная структура исследуемых соединений: а) 3D-модель глицината магния, б) структурная формула глицината магния, в) 3D-модель тирозината магния, г) структурная формула тирозината магния.

Таблица 2. Расчетные характеристики модельной структуры комплексов глицината и тирозината магния при $T=298.15$ К

Параметр	Значение DFT 6-31G(d, p)	Значение DFT 6-31G	Значение DFT 6-31G(d, p)	Значение DFT 6-31G
Модель 1:2	Mg ²⁺ :Gly		Mg ²⁺ :Tyr	
ΔH , ккал/моль	102.915	102.020	257.397	256.442
ΔS , кал/моль К	99.059	98.178	141.889	144.844
ΔF , ккал/моль	68.033	68.930	215.093	213.257
U , ккал/моль	97.323	98.79	256.805	255.849
$E_{кин}$, ккал/моль	475289	475498	910458	903631
$E_{п}$, ккал/моль	-952203	-952294	-1819502	-1809093

Обозначения: ΔH – энтальпия, ΔS – энтропия, ΔF – свободная энергия Гиббса, U – внутренняя энергия, $E_{кин}$ – кинетическая энергия, $E_{п}$ – потенциальная энергия.

2. В модельном спектре наблюдаются две ярко выраженные полосы $\nu_{ас}(\text{NH}_2)=3479$ см⁻¹ и $\nu_{с}(\text{NH}_2)=3330$ см⁻¹, которые не присутствуют в спектрах аминокислот из-за их биполярной структуры. В спектре синтезированного соединения комплекса также наблюдаются полосы $\nu_{ас}(\text{NH}_2)=3435$ см⁻¹ и $\nu_{с}(\text{NH}_2)=3241$ см⁻¹ с погрешностью около 5%. Это свидетельствует о возможном использовании донорно-акцепторного механизма для образования связи между комплексообразователем и лигандом.

3. Отсутствие на спектре модельного соединения специфической полосы в области ~2006 см⁻¹, указывается на отсутствие сильного взаимодействия N-H+...O, но данные полосы обнаруживаются в спектре синтезированного соединения. Выдвинуто предположение, что в спектре синтезированного соединения наблюдаются эти полосы, что подтверждает наличие сильного взаимодействия между аминогруппой АК и водой.

4. Вероятен донорно-акцепторный механизм образования связи Mg-N, на что может указывать наличие характерной малоинтенсивной полосы 1845 см⁻¹ для синтезированного соединения, и 1859 см⁻¹ для модели, что может указывать на взаимодействие иона магния с атома азота аминогруппы аминокислоты.

5. Область 500–1500 см⁻¹ – область отпечатков пальцев. Подробный анализ этой области и сравнение со спектром синтезированного соединения приведен в табл. 3.

6. Модель изолированного соединения имеет ряд ограничений, и не учитывает множество факторы, влияющих на колебания связей в реальных условиях, тем самым в спектре реальных соединения наблюдаются наличие некоторых пиков и обертонов. Например, наличие структурной воды, межмолекулярные взаимодействия, наличие примесей и пр.

Основываясь на всех перечисленных выше перечисленных факторов, наличие которых достоверно указывает на то, что предполагаемое комплексное соединение Mg²⁺:Gly имеет состав такой же, как и в модельное соединение, но с тем отличием, что в структуре синтезированного комплекса имеется вода, которая видна на ИК-спектре.

Подобным образом рассмотрим ИК-спектры тирозината магния.

Анализ расчетного (на примере DFT в базе 6-31G(d, p)) и экспериментального ИК-спектров тирозината магния демонстрирует:

1. В спектре модели тирозината магния имеются высокоинтенсивные полосы $\nu_{ас}(\text{C}=\text{O})=1669$ см⁻¹

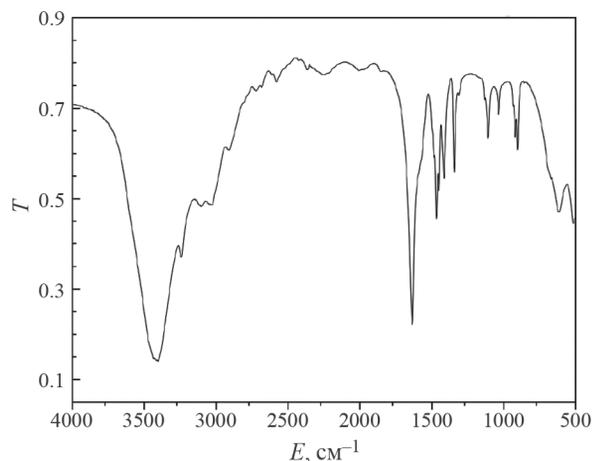


Рис. 3. ИК-спектр синтезированного соединения $Mg^{2+}:Gly$.

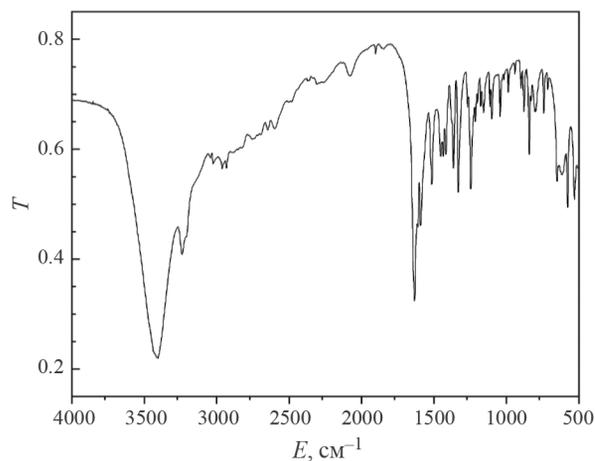


Рис. 4. ИК-спектр синтезированного соединения $Mg^{2+}:Tyr$.

и $\nu_{as}(C-O)=1278\text{ см}^{-1}$, в то время как в синтезированном соединении $Mg^{2+}:Tyr$ наблюдаются подобные полосы $\nu_{as}(C=O)=1661\text{ см}^{-1}$ и $\nu_{as}(C-O)=1285\text{ см}^{-1}$. Погрешность менее 1%, можно сделать вывод, что ион Mg^{2+} взаимодействует с карбоксильной группой в синтезированном соединении так же, как и в предполагаемой в модели.

2. В модельном спектре наблюдаются две ярко выраженные полосы $\nu_{as}(NH_2)=3483\text{ см}^{-1}$ и $\nu_s(NH_2)=3240\text{ см}^{-1}$, которые не присутствуют в спектрах аминокислот из-за их биполярной структуры. В спектре синтезированного соединения комплекса также наблюдаются полосы $\nu_{as}(NH_2)=3403\text{ см}^{-1}$ и $\nu_s(NH_2)=3243\text{ см}^{-1}$ с погрешностью около 5%. Это свидетельствует о возможном использовании донорно-акцепторного механизма для образования связи между комплексообразователем и лигандом.

3. На образование связи $Mg-N$ по донорно-акцепторному механизму, может указывать наличие характерной малоинтенсивной полосы 1845 см^{-1} для синтезированного соединения, и ее наличие в модельном спектре 1859 см^{-1} может указывать на взаимодействие иона магния с атома азота аминокислоты.

4. Стоит отметить, что в областях спектра $3000-1900\text{ см}^{-1}$ появляются дополнительные полосы, которые являются обертонами колебаний бензольного кольца, а также вероятно обертонами колебаний аминокислоты, и воды, которые могут варьироваться по интенсивности, но из-за их возможного наложения описание данных малоинтенсивных пиков в данной работе не рассматривается.

5. Область $500-1500\text{ см}^{-1}$ — область отпечатков пальцев. Подробный анализ этой области и сравнение со спектром синтезированного соединения приведен в табл. 4.

6. Модель изолированного соединения имеет ряд ограничений, и не учитывает множество факторы, влияющих на колебания связей в реальных условиях, тем самым в спектре реальных соединений наблюдаются наличие некоторых пиков и обертонов. Например: межмолекулярные взаимодействия, наличие примесей и пр.

Основываясь на всех перечисленных выше перечисленных факторов, наличие которых достоверно указывает на то, что предполагаемое комплексное соединение $Mg^{2+}:Tyr$ имеет состав такой же, как и в модельное соединение (рис. 4).

При сравнении между собой полученных данных глицината и тирозината магния можно сделать вывод, что боковая группы тирозина из-за жесткости бензольного кольца способствует координации аминокислоты с ионом магния в изолированной молекуле. Отсутствие боковой группы в изолированной молекуле глицината магния также оказывает влияние. Координация аминокислоты с ионом магния произошла с одной из двух аминокислот, вторая образовала связь с молекулой воды, что наблюдается на ИК-спектре синтезированного соединения.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Комплексометрическим титрованием и формольным титрованием по методу Серенсена установили, что в синтезированном соединении ион магния (II) с соответствующим лигандом (Gly, Tyr) находятся в мольном соотношении — 1:2. Построены структурно-динамические модели глицината и тирозината магния методом DFT(B3LYP) в базах 6–31G(d, p), 6–21G представлены термодинамические характеристики изолированных молекул. Дан анализ и расшифрованы ИК-спектры моделей

Таблица 3. Расчетные и экспериментальные частоты колебаний ИК-спектра молекулы глицината магния.

$\nu_{\text{эксп}}, \text{см}^{-1}$	$\nu_{\text{DFT 6-31G}(d,p)}, \text{см}^{-1}$	$\nu_{\text{DFT 6-31G}}, \text{см}^{-1}$	Форма колебаний
557	576	572	$\gamma(\text{OCO}), \chi(\text{OCCC}), \chi(\text{OCCH}), \chi(\text{CCCC}), \text{Q}(\text{CO})$
672	662	667	$\chi(\text{CCCO}), \chi(\text{HCCC}), \chi(\text{CCCC}), \gamma(\text{CCO}), \chi(\text{HCCO}), \chi(^*\text{CO}_2)$
709	702	706	$\chi(\text{CCCO}), \text{Q}(\text{CC}), \gamma(\text{CCO}), \chi(\text{HCCO}), \chi(\text{HNH}), \chi(\text{CCN})$
749	745	735	$\chi(\text{HCCO}), \gamma(\text{NCCO}), \chi(\text{HCCH}), \text{Q}(\text{CC}), \chi(\text{CCCC}), \chi(\text{CCCO}), \text{Q}(\text{CO}), \gamma(\text{CCO}), \chi(\text{HCCC}), \chi(\text{OCCH}), \beta(\text{CCH}), \chi(\text{HNH})$
786	797	756	$\text{Q}(\text{CC}), \chi(\text{CCCO}), \gamma(\text{CCC}), \chi(\text{CCCO}), \chi(\text{NCCO}), \chi(\text{HNH})$
800	810	810	$\chi(\text{CCCH}), \beta(\text{CCH}), \chi(\text{HCCH}), \chi(\text{OCCC}), \chi(\text{HNH}), \chi(\text{CCN})$
872	876	888	$\chi(\text{CCCH}), \text{Q}(\text{CO}), \chi(\text{HNH})$
921	925	921	$\chi(\text{OCCH}), \chi(\text{HCCO}), \chi(\text{HCCH}), \text{Q}(\text{CC}), \text{Q}(\text{CO}), \chi(\text{CCCO}), \beta(\text{HCC}), \gamma(\text{CCC}), \text{Q}(\text{OC}), \chi(\text{HNH})$
964	969	971	$\gamma(\text{OCC}), \text{Q}(\text{CO}), \text{Q}(\text{CC}), \text{Q}(\text{OC}), \chi(\text{HCCH}), \gamma(\text{OCC}), \chi(\text{HNH})$
1035	1045	1039	$\chi(\text{CCCC}), \chi(\text{OCCC}), \text{Q}(\text{CO}), \chi(\text{HCCH}), \chi(\text{CCCH}), \chi(\text{CCCO}), \text{Q}(\text{CC}), \text{Q}(\text{CN})$
1088	1088	1081	$\chi(\text{OCCC}), \chi(\text{CCCC}), \text{Q}(\text{CO}), \chi(\text{HCCH}), \text{Q}(\text{CC}), \beta(\text{CCH}), \chi(\text{HCCO}), \text{Q}(\text{CN})$
1113	1110	1115	$\text{Q}(\text{CO}), \text{Q}(\text{CC}), \text{Q}(\text{OC}), \chi(\text{OCCH}), \text{Q}(\text{CN}), \chi(\text{CN})$
1154	1148	1178	$\text{Q}(\text{CO}), \text{Q}(\text{CC}), \text{Q}(\text{OC}), \text{Q}(\text{CN}), \chi(\text{CN}), \chi(\text{CCN})$
1186	1182	1178	$\beta(\text{CCH})$
1247	1259	1242	$\beta(\text{OCCH})$
1285	1278	1277	$\beta(\text{CCH}), \chi(\text{HCCO}), \chi(\text{HCCC}), \chi(\text{OCCH}), \text{q}(\text{CO}_2^-), \text{q}(\text{C=O})$
1308	1299	1297	$\beta(\text{HCCO}), \chi(\text{HCCO}), \beta(\text{CCH}), \chi(\text{CCCH}), \chi(\text{NH}_2)$
1368	1376	1365	$\chi(\text{HCCH}), \beta(\text{CCH}), \chi(\text{OCCH}), \chi(\text{HCCO}), \beta(\text{HCCO}), \text{Q}(-\text{CO}_2^-)$
1391	1400	1403	$\beta(\text{HCO}), \chi(\text{NCCO}), \chi(\text{HCCH}), \beta(\text{CCH}), \chi(\text{HCCO}), \beta(\text{HCC}),$
1427	1428	1443	$\text{Q}(\text{CC}), \beta(\text{HCCO}), \beta(\text{CCH}), \chi(\text{HCCO}), \beta(\text{CCH}), \text{Q}(\text{NH}_2), \chi(\text{NH}_2)$
1459	1457	1457	$\text{Q}(\text{OC}), \text{Q}(\text{CC}), \beta(\text{CCH}), \chi(\text{HCCH}), \chi(\text{CCCH}), \text{Q}(\text{NH}_2), \chi(\text{NH}_2), \alpha(\text{HCH})$
1512	1517	1510	$\alpha(\text{HCH}), \beta(\text{OCCH}), \chi(\text{HCCH}), \chi(\text{HNH}), \chi(\text{CCN})$
1600	1599	1588	$\alpha(\text{HCH}), \beta(\text{OCCH}), \chi(\text{HCCC}), \chi(\text{NH}_2), \text{Q}(\text{HNH})$
1637	1634	1644	$\text{q}(\text{C=O}), \text{q}(\text{O=CO}), \text{Q}(\text{NH}_2), \chi(\text{NH}_2), \chi(\text{HOH})$
1661	1669	1654	$\text{q}(\text{C=O}), \text{q}(\text{O=CO}), \chi(\text{HOH})$
1845	1859	1840	$\chi(\text{HOH}), \text{q}(\text{C=O}), \text{q}(\text{O=CO}), \chi(\text{N...Mg})$
2006	—	—	$\chi(\text{HOH}), \chi(\text{N-H}^+ \dots \text{O})$
2363	—	—	$\text{q}(^*\text{CO}_2)$
2938	2933	2968	$\text{q}(\text{CH})$
2968	3001	3023	$\text{q}(\text{CH})$
3051	3059	3098	$\text{q}(\text{CH})$
3243	3240	3235	$\text{q}(\text{HNH}), \text{q}(\text{NH}_2^+), \text{q}(\text{OH})$
3403	3483	3452	$\text{q}(\text{HNH}), \text{q}(\text{NH}_2^+), \text{q}(\text{OH})$

Примечание. Используются общепринятые обозначения координат: валентные колебания связей – q, Q, плоские деформационные колебания – γ, β – с участием одного атома Н, неплоские деформационные колебания – $\chi, ^*\text{CO}_2$ – углекислый газ.

Таблица 4. Расчетные и экспериментальные частоты колебаний ИК-спектра молекулы тирозината магния

$\nu_{\text{эксп}}, \text{см}^{-1}$	$\nu_{\text{DFT 6-31G}}, \text{см}^{-1}$	$\nu_{\text{DFT 3-21G}}, \text{см}^{-1}$	Форма колебаний
575	576	572	$\gamma(\text{OCO}), \chi(\text{OCCC}), \chi(\text{OCCH}), \chi(\text{CCCC}), \text{Q}(\text{CO})$
614	607	621	$\chi(\text{CCCCO}), \chi(\text{HCCC}), \chi(\text{CCCC}), \gamma(\text{CCO}), \chi(\text{HCCO}), \chi(*\text{CO}_2)$
649	655	672	$\chi(\text{CCCCO}), \text{Q}(\text{CC}), \gamma(\text{CCO}), \chi(\text{HCCO}), \chi(\text{HNNH}), \chi(\text{CCN})$
713	705	706	$\chi(\text{HCCO}), \gamma(\text{NCCO}), \chi(\text{HCCH}), \text{Q}(\text{CC}), \chi(\text{CCCC}), \chi(\text{CCCCO}), \text{Q}(\text{CO}), \gamma(\text{CCO}), \chi(\text{HCCC}), \chi(\text{OCCH}), \beta(\text{CCH}), \chi(\text{HNNH})$
740	745	732	$\text{Q}(\text{CC}), \chi(\text{CCCCO}), \gamma(\text{CCC}), \chi(\text{CCCCO}), \chi(\text{NCCO}), \chi(\text{HNNH})$
794	797	753	$\chi(\text{CCCH}), \beta(\text{CCH}), \chi(\text{HCCH}), \chi(\text{OCCC}), \chi(\text{HNNH}), \chi(\text{CCN})$
829	810	810	$\chi(\text{CCCH}), \text{Q}(\text{CO}), \chi(\text{HNNH})$
841	840	840	
877	872	884	
897	900	893	
939	931	921	$\chi(\text{OCCH}), \chi(\text{HCCO}), \chi(\text{HCCH}), \text{Q}(\text{CC}), \text{Q}(\text{CO}), \chi(\text{CCCCO}), \beta(\text{HCC}), \gamma(\text{CCC}), \text{Q}(\text{OC}), \chi(\text{HNNH})$
984	985	979	$\gamma(\text{OCC}), \text{Q}(\text{CO}), \text{Q}(\text{CC}), \text{Q}(\text{OC}), \chi(\text{HCCH}), \gamma(\text{OCC}), \chi(\text{HNNH})$
1015	1015	1016	$\chi(\text{CCCC}), \chi(\text{OCCC}), \text{Q}(\text{CO}), \chi(\text{HCCH}), \chi(\text{CCCH}), \chi(\text{CCCCO}), \text{Q}(\text{CC}), \text{Q}(\text{CN})$
1042	1048	1040	
1099	1092	1101	$\chi(\text{OCCC}), \chi(\text{CCCC}), \text{Q}(\text{CO}), \chi(\text{HCCH}), \text{Q}(\text{CC}), \beta(\text{CCH}), \chi(\text{HCCO}), \text{Q}(\text{CN})$
1112	1111	1116	$\text{Q}(\text{CO}), \text{Q}(\text{CC}), \text{Q}(\text{OC}), \chi(\text{OCCH}), \text{Q}(\text{CN}), \chi(\text{CN})$
1155	1153	1169	
1176	1178	1181	$\text{Q}(\text{CO}), \text{Q}(\text{CC}), \text{Q}(\text{OC}), \text{Q}(\text{CN}), \chi(\text{CN}), \chi(\text{CCN})$
1197	1199	1193	$\beta(\text{CCH})$
1214	1214	1210	
1245	1251	1242	$\beta(\text{OCCH}), \beta(\text{CCH}), \chi(\text{HCCO}), \chi(\text{HCCC}), \chi(\text{OCCH}), \text{q}(\text{CO}_2^-), \text{q}(\text{C=O})$
1267	1278	1277	
1330	1335	1339	$\beta(\text{HCCO}), \chi(\text{HCCO}), \beta(\text{CCH}), \chi(\text{CCCH}), \chi(\text{NH}_2)$
1363	1368	1360	$\chi(\text{HCCH}), \beta(\text{CCH}), \chi(\text{OCCH}), \chi(\text{HCCO}), \beta(\text{HCCO}), \text{Q}(-\text{CO}_2^-)$
1417	1415	1420	$\beta(\text{HCO}), \chi(\text{NCCO}), \chi(\text{HCCH}), \beta(\text{CCH}), \chi(\text{HCCO}), \beta(\text{HCC}), \text{Q}(\text{CC}), \beta(\text{HCCO}), \beta(\text{CCH}), \chi(\text{HCCO}), \beta(\text{CCH}), \text{Q}(\text{NH}_2), \chi(\text{NH}_2)$
1435	1429	1443	
1453	1453	1453	$\text{Q}(\text{OC}), \text{Q}(\text{CC}), \beta(\text{CCH}), \chi(\text{HCCH}), \chi(\text{CCCH}), \text{Q}(\text{NH}_2), \chi(\text{NH}_2), \alpha(\text{HCH})$
1513	1514	1509	$\alpha(\text{HCH}), \beta(\text{OCCH}), \chi(\text{HCCH}), \chi(\text{HNNH}), \chi(\text{CCN})$
1591	1591	1588	$\alpha(\text{HCH}), \beta(\text{OCCH}), \chi(\text{HCCC}), \chi(\text{NH}_2), \text{Q}(\text{HNNH})$
1610	1615	1618	$\text{q}(\text{C=O}), \text{q}(\text{O=CO}), \text{Q}(\text{NH}_2), \chi(\text{NH}_2), \chi(\text{HOH})$
1633	1645	1661	$\text{q}(\text{C=O}), \text{q}(\text{O=CO}), \chi(\text{HOH})$
1846	1852	1861	$\chi(\text{HOH}), \chi(\text{N-H}^+ \dots \text{O}), \text{q}(\text{C=O}), \text{q}(\text{O=CO})$
2370	—	—	$\text{q}(*\text{CO}_2)$
2938	2933	2968	$\text{q}(\text{CH})$
2961	2960	2991	$\text{q}(\text{CH})$
3024	3020	3026	
3040	3061	3057	$\text{q}(\text{CH})$
3237	3234	3245	$\text{q}(\text{HNNH}), \text{q}(\text{NH}_2^+), \text{q}(\text{OH})$
3413	3467	3473	$\text{q}(\text{HNNH}), \text{q}(\text{NH}_2^+), \text{q}(\text{OH})$

Примечание. Используются общепринятые обозначения координат: валентные колебания связей – q, Q, плоские деформационные колебания – γ , β – с участием одного атома Н, $\alpha = \alpha(\text{HCH})$, неплоские деформационные колебания – χ , $*\text{CO}_2$ – углекислый газ.

глицината и тирозината магния. Основываясь на приведенных данных квантово-химических расчетах ИК-спектра моделей соединений иона магния(II) с Gly и Tyr сделан вывод о строении синтезированных комплексах $Mg^{2+}:Gly$ и $Mg^{2+}:Tyr$ – они адекватно описывается построенными моделями.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 075-03-2023).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Добрынина Н.А. Бионеорганическая химия. М.: МГУ, 2007. 36 с.
2. Скальный А.В. Химические элементы в физиологии и экологии человека. М.: Издательский дом «ОНИКС 21 век»: Мир, 2004. 216 с.
3. Юдина Н.В., Торшин И.Ю., Громова О.А., и др. // Кардиология. 2016. Т. 56. № 10. С. 80.
DOI: <https://dx.doi.org/10.18565/cardio.2016.10.80-89>
4. Senni K., Foucault-Bertaud A., Godeau G. // *Magnes Res.* 2003 V. 16. № 1. P. 70.
5. Левчук Л.В., Бородулина Т.В., Санникова Н.Е., и др. // Уральский медицинский журнал. 2017. Т. 149. № 5. С. 11.
6. Шилов А.М., Авшалумов А.Ш., Марковский В.Б., и др. // Русский медицинский журнал. 2009. Т. 17. № 8. С. 576.
7. Golovanova O.A., Solodyankina A.A. // *J. Crystallography Reports.* 2017. V. 62. № 2. P. 342.
8. Abiri B., Vafa M. // *Trials.* 2020. V.21. № 1. P. 225
DOI: <https://doi.org/10.1186/s13063-020-4122-9>
9. Waheed E.J., Obaid S.M., Ali-Abbas A.A.S // *Research J.of Pharmaceutical, Biological and Chemical Sciences.* 2019. V.10. № 2. P. 1624.
10. Golovanova O.A., Tomashevsky I.A. // *Rus. journal of Phys. Chem.* 2019. V. 93. № 1. P. 7.
DOI: <https://doi.org/10.1134/S0036024419010084>
11. Seelig M.S. // *J. Am. College of Nutrition.* 1993. V. 12. P. 442.
DOI: 10.1080/07315724.1993.10718335
12. Накоскин А.Н., Воронцов Б.С., Лунева С.Н., и др. // *Современные проблемы науки и образования* 2012. № 3. С. 3.
13. Babkov L.M., Moiseikina E.A., Korolevich M.V. // *J. of Applied Spectroscopy.* 2010. V. 77. № 2. P. 166.
DOI: <https://doi.org/10.1007/s10812-010-9310-z>
14. Бутырская Е.В., Нечаева Л.С., Шапошник В.А., и др. // *Сорбционные и хроматографические процессы.* 2012. Т. 12. № 4. С. 501.
15. Kon V. // *UFN.* 2002. V. 172. № 3. P. 336.
DOI: 10.3367/UFNr.0172.200203e.0336
16. Mamand D., Qadr H. // *Russian journal of physical chemistry.* 2022. V. 96. P. 2155.
DOI: <https://doi.org/10.1134/S0036024422100193>
17. Игнатов С.К. // Нижний Новгород: ННГУ им. Н.И. Лобачевского. 2019. 94 с.
18. Bepalov D.V., Golovanova O.A. // *J. Butlerov Communications.* 2021. V.65. № 1. P. 15.
DOI: <https://doi.org/10.37952/ROI-jbc-01/21-65-1-15>