

**НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК КЫРГЫЗСКОЙ РЕСПУБЛИКИ
ИНСТИТУТ ХИМИИ И ФИТОТЕХНОЛОГИЙ**
**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ КЫРГЫЗСКОЙ РЕСПУБЛИКИ
ОШСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ**

Диссертационный совет Д 02.17.561

На правах рукописи
УДК 546.3 (575.2) (043.3)

ОМУРЗАКОВА ГУЛНАРА ГУЛАМОВНА

**СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ
БИОМЕТАЛЛОВ С ЛЕЙЦИНОМ И ИЗОЛЕЙЦИНОМ**

02.00.01 – неорганическая химия

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени
кандидата химических наук

Бишкек – 2018

Работа выполнена в лаборатории химии аминокислот и биологически активных соединений Института химии и химической технологии Национальной академии наук Кыргызской Республики и Ошском государственном университете

Научный руководитель: доктор химических наук, профессор,
академик НАН КР
Мурзубраимов Бектемир Мурзубраимович

Официальные оппоненты: доктор химических наук, профессор,
академик НАН КР
Иманакунов Бейшен Иманакунович

кандидат химических наук, доцент
Жаснакунов Жанарбек Кубаналиевич

Ведущая организация: Институт общей и неорганической химии
Академии наук Республики Узбекистан
(г. Ташкент)

Защита состоится «01» июня 2018 года в 10⁰⁰ часов на заседании диссертационного совета Д 02.17.561 при Институте химии и фитотехнологий НАН КР, Ошском государственном университете МОН КР по адресу: 720071, г. Бишкек, проспект Чуй, 267.

С диссертацией можно ознакомиться в научной библиотеке НАН КР по адресу: 720071, г. Бишкек, проспект Чуй, 265а и на сайте диссертационного совета: [http: // www.ihftnaskr. kg](http://www.ihftnaskr.kg)

Автореферат разослан «27» апреля 2018 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат химических наук, с.н.с.

Камбарова Г.Б.

Общая характеристика работы

Актуальность работы. Координационные соединения биогенных элементов с органическими лигандами проявляют разные виды биологической активности. Среди них особый интерес представляют соединения металлов с витаминами и аминокислотами, которые в своем составе содержат различные по своей химической природе и биологическому действию вещества. Известно, что в аминокислотах, содержащих атомы азота и кислорода, физиологическое действие значительно усиливается при сочетании их с микроэлементами.

Незаменимые аминокислоты лейцин, изолейцин и их производные обладают широким спектром фармакологического действия. Лейцин играет ключевую роль в строительстве всей мышечной ткани, участвует в процессе обмена веществ и выработке энергии, имеет способность понижать уровень сахара в крови, но повышать иммунитет. Лейцин применяется для лечения печени, анемии, при повышенном холестерине, иммунодефиците, длительной терапии с применением антибиотиков, химиотерапии при онкологических заболеваниях. Изолейцин способен увеличить и обеспечить присоединение большего объема кислорода к гемоглобину, обеспечивает мышечные ткани энергией, способствует поглощению глюкозы и дефицит этой аминокислоты приводит к возникновению симптомов, сходных с гипогликемией.

Координационные соединения переходных металлов с данными аминокислотами приобретают новые свойства катализировать различные биохимические процессы. Эти соединения имеют практическое применение в биологии, фармакологии, сельском хозяйстве, пищевой и других отраслях промышленности.

Поэтому является актуальным синтез новых координационных соединений на основе лейцина и изолейцина с солями биометаллов для создания более эффективных биопрепаратов.

Связь темы с планом научных исследований. Работа выполнена в соответствии с планами НИР НАН КР в лаборатории химии аминокислот и биологически активных соединений ИХ и ХТ НАН КР и ОшГУ подпроектом: «Синтез высокоэффективных биостимуляторов, кормовых, лекарственных и пестицидных препаратов на основе соединений L-аминокислот, их производных и углеводов с биометаллами», номер государственной регистрации 0003939 (2006–2010 гг).

Цель и задачи исследования. Целью настоящей работы является изучение химического взаимодействия лейцина и изолейцина с солями биометаллов и синтез новых соединений.

В связи с этим необходимо было решить следующие задачи:

- исследование фазовых равновесий в водных системах из лейцина и изолейцина с хлоридами цинка, никеля, меди, кобальта и сульфатом железа;
- синтез и исследование физико-химических свойств новых соединений, выяснение их строения и способов координации лейцина и изолейцина с ионами металлов;
- проведение квантово-химических исследований протонирования лейцина и изучения пространственного, электронного строения тетраэдрических и октаэдрических комплексных ионов цинка с лейцином;
- исследование токсичности и биологической активности полученных соединений.

Научная новизна: Впервые методом растворимости при 25 °C проведено систематическое исследование тройных систем хлоридов Zn, Ni, Cu, Co, сульфата железа с лейцином и изолейцином в водном растворе. Установлено образование десяти новых комплексных соединений различного стехиометрического состава: $\text{ZnCl}_2 \cdot 2\text{L} \cdot \text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$; $\text{NiCl}_2 \cdot 2\text{L} \cdot \text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$; $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{L} \cdot \text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$; $\text{FeSO}_4 \cdot 2\text{L} \cdot \text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$; $\text{FeSO}_4 \cdot 2\text{D,L} \cdot \text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$; $\text{ZnCl}_2 \cdot 2\text{L} \cdot \text{изо} \text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$; $\text{NiCl}_2 \cdot 2\text{L} \cdot \text{изо} \text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$; $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{L} \cdot \text{изо} \text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$; $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{L} \cdot \text{изо} \text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$; $\text{FeSO}_4 \cdot 2\text{L} \cdot \text{изо} \text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$.

По совокупности экспериментальных и расчетных исследований получены данные синтезированных новых комплексных соединений лейцина и изолейцина с биометаллами и установлены способы связывания лигандов с центральным атомом.

Получен новый биоактивный препарат, относящийся к малотоксичным веществам.

Индивидуальность синтезированных комплексов подтверждена с помощью химического, рентгенофазового, термогравиметрического методов анализа и ИК - спектроскопии. Проведены квантово-химические исследования протонирования лейцина, а также исследованы пространственные, электронные строения моделей тетраэдрических и октаэдрических комплексных ионов цинка с лейцином. Показано, что присоединение протона к молекуле лейцина происходит по атому кислорода карбонильной группы или азота аминокетильной группы лейцина. Установлено, что в тетраэдрическом комплексном ионе цинка лиганд связывается с центральным атомом металла атомами азота и кислородов карбоксильной группы лейцина, а октаэдрический комплексный ион образуется связыванием лейцина с комплексообразователем атомами азота и только кислорода карбонильной группы.

В результате изучения токсичности двуводного дилейцинат сульфат железа (II) выявлено, что соединение относится к малотоксичным веществам и может быть использовано как компонент пищевой витаминно-минеральной добавки для животных и птиц.

Научная и практическая значимость работы. Полученные экспериментальные и расчетные данные вносят определенный вклад в развитие перспективного научного направления – свойства и строение аминокислотных комплексов биометаллов. Экспериментальные данные необходимы при изучении свойств и строений координационных соединений металлов с другими аминокислотами. Расчетные количественные характеристики порядков и длин связей необходимы при оценках прочности химических связей. Они могут быть использованы в качестве учебного материала при чтении курсов лекций и проведении практикумов по химии координационных соединений.

На основании изучения биологической активности и токсичности новое соединение $\text{FeSO}_4 \cdot 2\text{L} - \text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ рекомендовано использовать в качестве витаминно-минеральной пищевой добавки для стимуляции роста и развития сельскохозяйственных животных и птиц.

Основные положения диссертации, выносимые на защиту:

- результаты взаимодействия лейцина и изолейцина с хлоридами цинка, никеля, меди, кобальта и сульфатом железа в водной среде при 25 °С;
- экспериментальные данные дифференциально - термического, рентгенофазового анализов, ИК-спектров и установление характера координационных связей в синтезированных комплексах;
- результаты квантово-химических исследований протонирования лейцина и изучения пространственного, электронного строения тетраэдрических и октаэдрических комплексных ионов цинка с лейцином;
- возможность использования некоторых синтезированных комплексов в качестве новых биологически активных препаратов.

Личный вклад соискателя. Автором собран и проанализирован обширный литературный материал по химии комплексных соединений солей биометаллов с лейцином и изолейцином.

Впервые экспериментально осуществлено изучение комплексообразования солей с лейцином и изолейцином методом растворимости, установлены составы, физико-химические характеристики и структуры полученных комплексов. Приняла участие в проведении квантово-химических исследований протонирования лейцина и изучения пространственного, электронного строения тетраэдрических и

октаэдрических комплексных ионов цинка с лейцином. Изучена токсичность и биологическая активность нового комплексного соединения.

Апробация результатов диссертации. Материалы диссертационной работы докладывались на международных научно-практических конференциях: «Наука XXI: открытия, инновации, технологии» (Смоленск, 2017 г., февраль), «Инновационное развитие: потенциал науки и современного образования» (Пенза, 2017 г., октябрь), на расширенном заседании кафедры естественнонаучных дисциплин ОшГУ (Ош, 2017 г., декабрь), а также на расширенном заседании в лаборатории неорганической химии Института химии и фитотехнологий НАН КР (Бишкек, 2018 г., январь).

Публикация результатов исследований. По результатам исследования опубликовано восемь статей, получен акт испытания и патент КР №1272.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, из четырех глав и списка использованных источников, включающего 161 наименование. Работа изложена на 139 страницах компьютерного текста, содержит 41 таблицу, 50 рисунков, 2 приложения.

Основное содержание работы

Во введении дан краткий обзор состояния проблемы, обоснована ее актуальность, определены цель и задачи исследования, показаны научная новизна и практическая значимость работы, а также сформулированы основные положения, выносимые на защиту.

В первой главе рассмотрены и обсуждены имеющиеся в литературе сведения о реакционной способности лейцина (изолейцина) и природе химических связей в комплексных соединениях данных лигандов с неорганическими солями. Несмотря на большое количество литературных данных по взаимодействию лейцина и изолейцина с неорганическими солями, их взаимодействие с солями биометаллов практически не изучены, не установлены закономерности образования новых фаз в системах, не определены условия кристаллизации фаз из растворов.

В «*Экспериментальной части*» изложены методика эксперимента и расчета, результаты по растворимости в системах из хлоридов цинка, никеля меди, кобальта и сульфата железа в водной насыщенной среде при 25 °С, представлены результаты физико-химических исследований десяти синтезированных комплексных соединений, идентифицированы с использованием термического, рентгенофазового анализов, ИК-спектроскопии.

В третьей главе проведены квантово-химические исследования протонирования лейцина и изучения пространственного и электронного строения комплексного иона цинка с лейцином.

В четвертой главе приведены данные испытания комплекса двуводного дилейцинат сульфата железа на биологическую активность и токсичность.

Результаты исследования систем

Изучение растворимости систем осуществлялось классическим изотермическим методом. Этот метод изучения тройных систем является наиболее простым и удобным, обеспечивает надежность полученных данных, особенно при выделении новых комплексных соединений, гидратных форм.

Впервые изотермическим методом растворимости исследованы тройные водные системы из хлоридов цинка, никеля, меди, кобальта или сульфата железа с лейцином (изолейцином) при 25 °С. Во всех системах происходит комплексообразование, в результате которого из растворов кристаллизуются новые соединения.

Взаимодействие изолейцина с хлоридом цинка в водной среде исследовалось в интервале концентраций от минимального содержания одного из компонентов до полного его насыщения. Растворимость изолейцина в данной системе составляла 4,75 %, а хлористого цинка 81,53 %. Кривая растворимости представлена тремя ветвями (рис.1). Первая ветвь (1–5) соответствует выделению в твердую фазу изолейцина. Вторая ветвь (точки 7–13) соответствовала выделению в твердую фазу безводного двойного соединения $ZnCl_2 \cdot 2L\text{-изо-}C_6H_{13}NO_2$ при соотношении компонентов 1:2. Третья ветвь, включающая точки (16–21), отвечает кристаллизации в донном осадке хлористого цинка. При экспериментальном исследовании системы с участием хлорида цинка показано, что из равновесных растворов кристаллизуется координационное соединение состава $ZnCl_2 \cdot 2L\text{-}C_6H_{13}NO_2$.

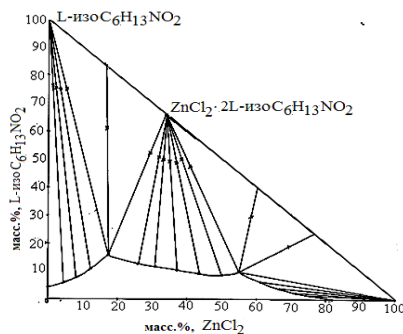


Рис.1. Диаграмма растворимости системы $ZnCl_2$ –L- изо $C_6H_{13}NO_2$ – H_2O при 25 °С.

Изотерма растворимости тройной системы, состоящая, из лейцина и хлорида цинка в водной среде при 25 °С представлена также тремя ветвями кристаллизации. Первая ветвь короткая от точки 1 до 4 отвечает растворам с твердой фазой лейцина. Вторая ветвь отвечает кристаллизации двойного соединения, прямолинейные лучи пересекаются в полюсе с составом $ZnCl_2 \cdot 2L \cdot C_6H_{13}NO_2$. Образованное новое соединение растворяется инконгруэнтно. Кристаллы относятся к моноклинной сингонии.

Диаграмма растворимости тройной системы L-лейцина–хлористого никеля–вода состоит из трех ветвей кристаллизации. Прямолинейные лучи, идущие от фигуративных точек от ветви, сходятся в 100%, указывая на кристаллизацию в твердую фазу только лишь L-лейцина. Вторая ветвь соответствует раствору, выделяющему двойное соединение $NiCl_2 \cdot L \cdot C_6H_{13}NO_2 \cdot H_2O$. Третья ветвь кристаллизации шести водного хлористого никеля.

Реакция взаимодействия в тройной системе хлорида меди с L-лейцином характеризуется тремя ветвями кристаллизации. Последовательно кристаллизуются L-лейцин, от неинвариантной (эвтонической) точки простирается вторая ветвь кристаллизации безводного двойного соединения, образованного на основе 66,04% лейцина, 33,96% хлорида меди с соотношением компонентов 1:2, что соответствует формуле соединения $CuCl_2 \cdot 2L \cdot C_6H_{13}NO_2$. Третья ветвь отвечает выделению исходного двух водного хлорида меди (II).

Изучение системы $CoCl_2$ -изо- $C_6H_{13}NO_2 \cdot H_2O$ при 25 °С представлено тремя ветвями (рис. 2). Первая ветвь, идущая от 1 до 6 точки, отвечает наличию твердой фазы изолейцина. В эвтонической точке 7 количество изолейцин – иона доходит до 15,48%, при содержании хлористого кобальта 10,06%. Вторая ветвь (точки 8-13) соответствует выделению в твердую фазу инконгруэнтно растворимому новому соединению $CoCl_2 \cdot 2L$ -изо $C_6H_{13}NO_2 \cdot 2H_2O$.

Третья ветвь соответствует выделению в твердую фазу двух водного хлористого кобальта (II).

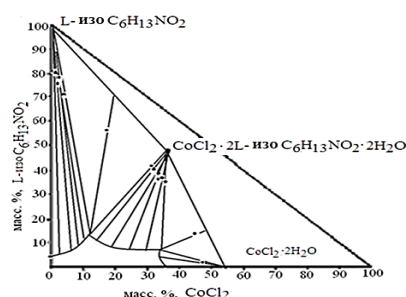


Рис.2. Диаграмма растворимости системы $CoCl_2$ –L-изо $C_6H_{13}NO_2$ – H_2O при 25 °С.

Диаграмма растворимости трехкомпонентной системы с участием лейцина и сульфата железа состоит из трех ветвей кристаллизации (рис. 3). Две крайние ветви соответствуют выделению в твердую фазу исходных компонентов D,L-лейцина и семи водного сульфата железа (II). Средняя ветвь отвечает кристаллизации из равновесных растворов нового соединения $FeSO_4 \cdot 2D,L-C_6H_{13}NO_2 \cdot 2H_2O$. Наши исследования показали, что новое соединение растворяется в воде инконгруэнтно.

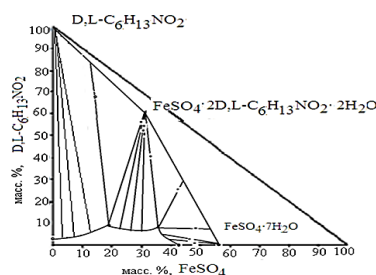


Рис. 3. Диаграмма растворимости системы: $FeSO_4$ –D,L– $C_6H_{13}NO_2$ – H_2O при 25 °С.

Диаграммы растворимости систем $FeSO_4$ –L-изо $C_6H_{13}NO_2$ – H_2O ; $NiCl_2$ –L-изо $C_6H_{13}NO_2$ – H_2O и $CuCl_2$ –L-изо $C_6H_{13}NO_2$ – H_2O аналогичны и характеризуются тремя ветвями кристаллизации. Крайние две ветви соответствуют выделению в твердую фазу исходных компонентов: L-изолейцина и солей биометаллов. Средние ветви отвечают кристаллизации из равновесных растворов новых соединений: $FeSO_4 \cdot 2L\text{-изо}C_6H_{13}NO_2 \cdot H_2O$; $NiCl_2 \cdot 2L\text{-изо}C_6H_{13}NO_2$; $CuCl_2 \cdot 2L\text{-изо}C_6H_{13}NO_2$.

Физико-химические характеристики полученных соединений

При исследовании изотермическим методом растворимости взаимодействие в равновесном растворе L-лейцина, L-изолейцина и D,L-лейцина с хлоридами цинка, никеля, меди, кобальта и сульфатом железа (II) получено десять новых соединений в кристаллическом виде. Полученные соединения отделяли от маточного раствора и высушивали на воздухе, а затем производился их химический анализ на содержание углерода, водорода, азота и соответствующих катионов металлов.

Для идентификации и характеристики соединений была определена растворимость комплексов в органических растворителях и в воде, удельная масса кристаллов, рассчитаны молекулярные и удельные объемы, определена также температура плавления.

Для определения растворимости полученных новых соединений необходим подбор индифферентного растворителя. В качестве

растворителей взяты бензол, четыреххлористый углерод, бутанол-1, гексан. Комплексные соединения мало растворяются в четыреххлористом углероде, гексане, бутаноле-1 и практически не растворимы в бензоле.

Относительная плотность кристаллов определена пикнометрическим методом, в качестве индифферентного растворителя был применен бензол

Полученные данные свидетельствует о том, что синтезированные комплексы характеризуются менее плотной упаковкой кристаллических решеток, чем исходные неорганические соли.

Дифференциально-термический анализ

Результаты изучения термической устойчивости показывают, что термические характеристики полученных комплексов имеют более сложный характер, чем исходные компоненты. Каждому соединению характерны свои температурные интервалы превращения, которые свидетельствуют об индивидуальности каждого соединения. Кривые нагревания (ДТА) комплексов характеризуются несколькими эндо- и экзотермическими эффектами, соответствующие процессу плавления, разложения, фазового перехода и окисления оставшихся продуктов распада.

Термогравиметрическим исследованием установлено, что разложение всех комплексов начинается с плавления и разложение молекулы лиганда происходит ступенчато. Конечным продуктом распада являются оксиды металлов.

Изолейцин при нагревании (рис. 4) разлагается в пределах $\sim 50-380^\circ\text{C}$. В интервале этих температур система теряет свыше 98% веса, из них 95,75% массы удаляется в промежутке $170-380^\circ\text{C}$. Согласно морфологиям ДТА- и DTG-кривых данного этапа диссоциации в атмосферу устремляются частички газа, которые не успели вступить в реакцию с

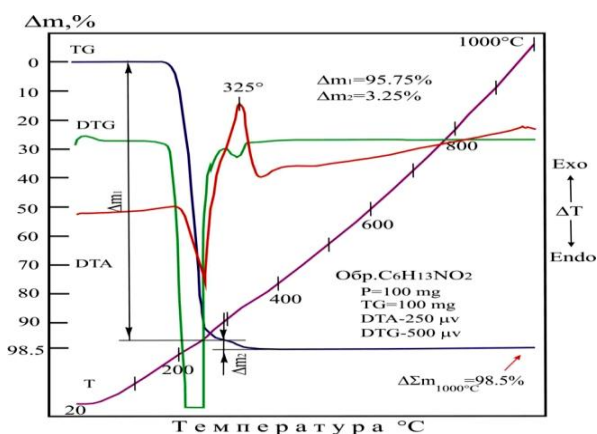


Рис. 4. Дериватограмма L-изо C₆H₁₃NO₂.

кислородом. Пики кривых в пределах 190-330°C связаны с взаимодействием части углерода с атмосферным кислородом. Формирование молекулы CO₂ протекает совместно с генерацией тепла, которая характеризуется в DTA-кривых высоким пиком экзотермы. Вынос газа из системы регистрируется ступенью потери веса ($\Delta m_2=3,25\%$) и небольшим нисходящим пиком при 325°C кривым TG и DTG, соответственно.

В комплексе $FeSO_4 \cdot 2L\text{-изо}C_6H_{13}NO_2 \cdot H_2O$ (рис. 5) в условиях температуры от 20 до 1000 °C на термических кривых наблюдается серия эндо - и экзотермических эффектов, вызванных этапным удалением из системы различных веществ и выброса газов. Преимущественно это пики эндотермического происхождения, но часть эффектов имеет экзотермическую направленность, указывающую на процессы формирования диоксида углерода на поверхностном участке и окисление железа до уровня FeO и Fe₂O₃.

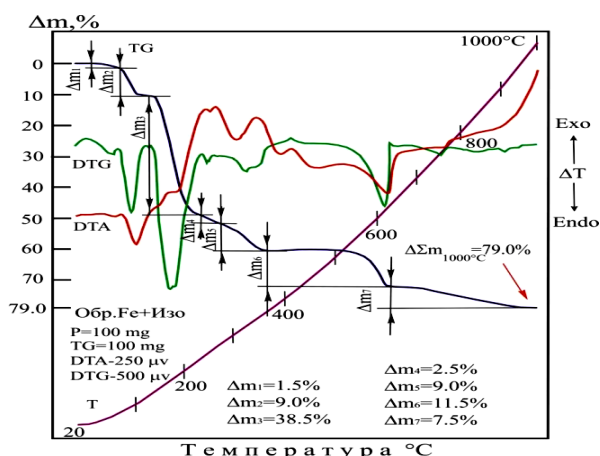


Рис. 5. Дериватограмма комплекса $FeSO_4 \cdot 2L\text{-изо}C_6H_{13}NO_2 \cdot H_2O$.

Сопоставление и анализ дериватограмм новых соединений и исходных компонентов показывает, что все новые соединения являются индивидуальными.

Рентгенофазовый анализ

Для дополнительного подтверждения индивидуальности синтезированных соединений был проведен рентгенофазовый анализ. Определены интенсивности, индексы (h, k, l) линий отражения, найдены межплоскостные расстояния. Рассчитаны параметры элементарных ячеек, объем ячейки, число формульных единиц или число молекул в ячейке, рентгеновская плотность. Установлено, что кристаллические решетки

полученных комплексных соединений относятся к моноклинной и триклинной сингонии (табл. 1).

Регистрация рентгеновской дифракционной линии производилась на автоматизированном дифрактометре ДРОН-3.

С помощью рентгенофазового анализа нами идентифицированы десять новых синтезированных соединений. Расчет межплоскостных расстояний проведен по таблице Я.Г. Гиллера, а интенсивности линий (I/I_0) оценивали по сто бальной шкале. Дифрактограммы записывались в диапазоне углов 2θ – 70° , шаг $0,02^\circ$ 2θ . В качестве примера приведен дифрактограмм двух комплексных соединений (рис. 6, 7).

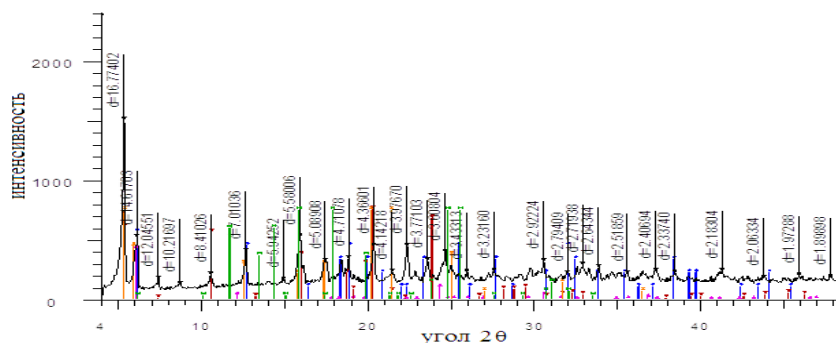


Рис. 6. Дифрактограмма $\text{NiCl}_2 \cdot 2\text{L-C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$.

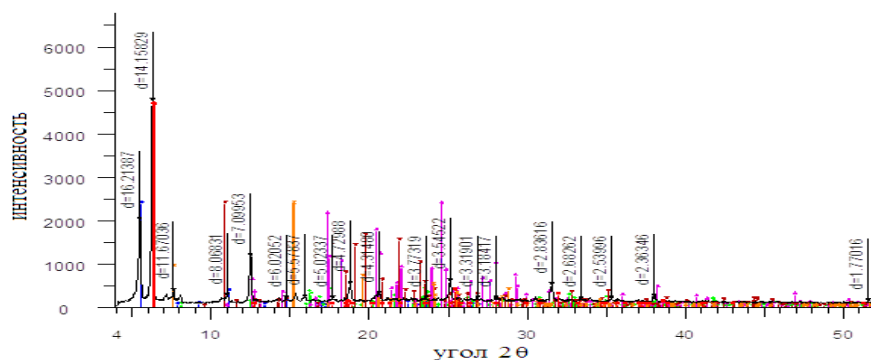


Рис. 7. Дифрактограмма $\text{NiCl}_2 \cdot 2\text{L-изо C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$.

ИК- спектроскопические исследования

ИК- спектры поглощения соединений записывали на спектрофотометре SPECORD M-80 с использованием обычных методик прессования с бромидом калия.

В ИК-спектрах комплексов лейцина (изолейцина) с биометаллами (рис. 8, 9) в основном сохраняется большинство типичных полос поглощения отдельных групп исходных компонентов. Следует отметить следующие основные колебательные частоты: 3300 см^{-1} - характерные полосы для

Таблица 1 – Параметры элементарных ячеек и типы кристаллических решеток соединений

Соединение	Тип решетки	Параметры элементарной ячейки, Å			Угол, град	Объем ячейки, Å ³	Число форм. един.	РФ плотн. г/см ³	Экспер. плотность г/см ³
		a	b	c					
L-C ₆ H ₁₃ NO ₂	моноклинная	9,761	5,307	14,686	94,1	757,51	5	1,206	1,293
Изо-C ₆ H ₁₃ NO ₂	моноклинная	9,75	5,32	14,12	98,8	723,76	4	1,203	1,1360
D,L -C ₆ H ₁₃ NO ₂	триклинная	5,396	14,10	5,183	111,1	552,783	3	1,188	1,18
ZnCl ₂ ·2 L-C ₆ H ₁₃ NO ₂	моноклинная	7,9506	11,8762	12,0889	113,9	1043,19	2	1,269	1,4287
NiCl ₂ · 2L-C ₆ H ₁₃ NO ₂	моноклинная	8,3414	7,9964	8,1214	105,6	521.706	1	1,2476	1,5842
NiCl ₂ · 2L- изоC ₆ H ₁₃ NO ₂	триклинная	7,694	11,91	5,817	102,3	748,926	2	1,7379	1.6415
CuCl ₂ ·2L-C ₆ H ₁₃ NO ₂	моноклинная	8,9544	8,4477	8,3976	96,7	630,876	1	1,044	1,5143
CoCl ₂ ·2L-C ₆ H ₁₃ NO ₂ ·2H ₂ O	моноклинная	6,6202	9,6663	8,576	109,8	516,42	1	1,377	1,7695

валентных колебаний группы - (ОН); 3130-3030 см^{-1} – валентные колебания (N^+H_3), перекрывающиеся в этих областях соответствующими валентными колебаниями группы (СН); 1635-1568 см^{-1} - валентные колебания (COO^-) групп.

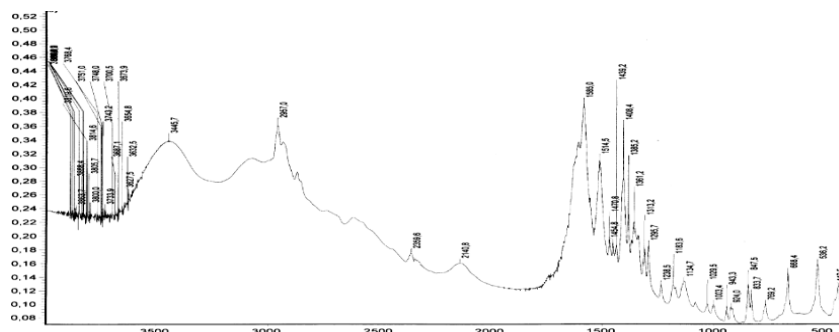


Рис. 8. ИК спектр L- $\text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$.

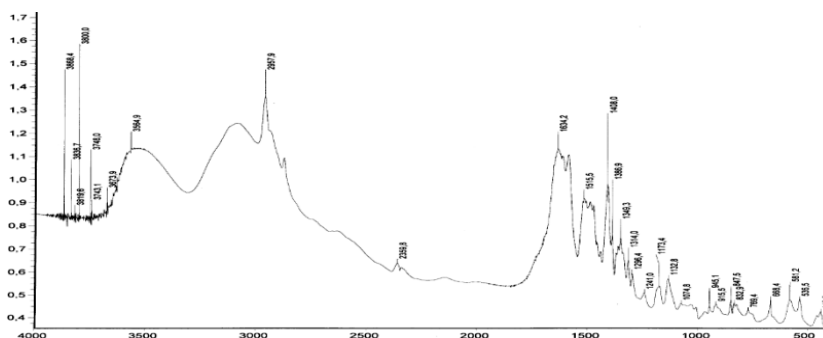


Рис. 9. ИК спектры $\text{ZnCl}_2 \cdot 2\text{L-C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$.

Интенсивные полосы поглощения, отнесенные к валентным колебаниям карбонильной группы, при частоте 1585 см^{-1} смещаются при комплексообразовании. В комплексах $\text{ZnCl}_2 \cdot 2\text{L-C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$ и $\text{FeSO}_4 \cdot 2\text{D,L-C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, при связывании лиганда с атомом комплексообразователя смещение частоты валентного колебания карбонильной группы лейцина $\nu(\text{CO})$, составила 69 см^{-1} и 74 см^{-1} , соответственно, для комплекса цинка и железа. Также смещения данной частоты $\nu(\text{CO})$ наблюдается и в других исследованных нами комплексах (табл. 2).

Так, в комплексе $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{L-C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$ смещение частоты $\nu(\text{CO})$ составило- 97 см^{-1} . В комплексных соединениях $\text{NiCl}_2 \cdot 2\text{L-изоC}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$, $\text{FeSO}_4 \cdot 2\text{L-изоC}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$, $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{L-изоC}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$, $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{L-изоC}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, где лигандом является изолейцин, смещение частоты валентного колебания карбонильной группы составило 86 см^{-1} , 70 см^{-1} , 59 см^{-1} и 61 см^{-1} , соответственно, по сравнению с частотой $\nu(\text{CO})$ в лиганде.

Таблица 2 - Основные колебательные частоты (см^{-1}) ИК- спектров лейцина и изолейцина и их комплексных соединений с солями биометаллов

Соединение	Тип колебаний			
	$\nu (\text{N}^+\text{H}_3)$	$\nu (\text{CO})$	$\nu_{\text{as}} (\text{COO}^-)$	$\nu_{\text{s}} (\text{COO}^-)$
L-C ₆ H ₁₃ NO ₂	2957	1585	1610 1580	1470 1385
Изо-C ₆ H ₁₃ NO ₂	2968	1583	1600 1580	1464 1350
ZnCl ₂ ·2L-C ₆ H ₁₃ NO ₂	3465	1516	1634 1516	1408 1386
FeSO ₄ ·2D,L-C ₆ H ₁₃ NO ₂ ·2H ₂ O	3439	1511	1615 1587	1415 1340
CuCl ₂ ·2L-C ₆ H ₁₃ NO ₂	3086	1488	1578 1488	1416 1368
NiCl ₂ ·2L-изо C ₆ H ₁₃ NO ₂	3389	1497	1622 1497	1460 1366
FeSO ₄ ·2L-изо C ₆ H ₁₃ NO ₂ ·H ₂ O	3456	1513	1609 1584	1465 1395
CuCl ₂ ·2L-изо C ₆ H ₁₃ NO ₂	3229	1524	1579 1524	1463 1350
CoCl ₂ ·2L-изо C ₆ H ₁₃ NO ₂ ·2H ₂ O	3354	1522	1635 1521	1429 1361

При комплексообразовании изменяются также антисимметричные колебания карбоксильной группы $\nu_{\text{as}}(\text{COO}^-)$, которые смещаются в более высокочастотную область. Не значительно отклоняются частоты симметричных колебаний карбоксилат иона $\nu_{\text{s}}(\text{COO}^-)$ в сторону низких частот, по сравнению со значением этой частоты в свободном лейцине и изолейцине. Остальные колебания в ИК-спектрах исследованных соединений представляют собой сложно валентно-деформационные колебания.

По смещению аналитической частоты валентного колебания $\nu (\text{CO})$ лиганда в ИК-спектрах исследованных нами соединений можно предположить, что между реагирующими компонентами происходит образование координационной связи аминокислот с центральным атомом металла через атомы кислорода карбоксильной и азота аминной группы лиганда.

Квантово-химические исследования

С помощью полуэмпирического метода РМЗ, входящий в комплекс Hyper Chem v. 7.5, нами были рассчитаны пространственные и электронные характеристики протонированной формы лейцина и тетраэдрических, октаэдрических комплексных ионов цинка с лейцином.

Протонирование лейцина проводилось для выяснения изменений пространственных и электронных строений молекулы лейцина при присоединении протона.

Распределение электронной плотности в молекуле лейцина дает возможность предположить, что присоединение протона может протекать по атомам, которые имеют отрицательные значения зарядов по следующим наиболее вероятным вариантам: а) по атому O^1 карбонильной группы, б) по атому O^2 гидроксильной группы, в) по атому азота аминогруппы.

а)

б)

в)

Сопоставление рассчитанных значений эффективных зарядов на атомах свободной и протонированных форм лейцина показывает, что в варианте (а, б) заряды на атомах O^1 и O^2 лейцина изменяются от $(-0,36\text{ е})$ до $(-0,19\text{ е})$, от $(-0,31\text{ е})$ до $(-0,20\text{ е})$, от $(-0,36\text{ е})$ до $(-0,15\text{ е})$ и от $(-0,31\text{ е})$ до $(-0,16\text{ е})$, соответственно. В варианте (в), изменение претерпевают заряды атома азота от $(-0,28\text{ е})$ до $(-0,08\text{ е})$, а заряды атома кислорода O^1 повышаются от $(-0,36\text{ е})$ до $(-0,25\text{ е})$. Длины связи C^1O^1 (а) изменяется от $1,23\text{ Å}$ до $1,31\text{ Å}$, C^1O^2 (б) удлиняется от $1,36\text{ Å}$ до $1,50\text{ Å}$, C^2N (в) удлиняется от $1,47\text{ Å}$ до $1,53\text{ Å}$ в катионной форме. Значения порядков связей (W) C^1O^1 (а) $W=1,83$ ослабевает до $W=1,32$, C^1O^2 упрочняется от $W=1,03$ до $W=1,31$, C^1O^1 (б) увеличивается от $W=1,83$ до $W=2,13$, а C^1O^2 , наоборот, уменьшается от $W=1,03$ до $W=0,61$, C^2N (в) понижается от $W=1,01$ до $W=0,86$. Валентные углы $O^1C^1O^2$ в катионах (а, в) увеличиваются на $3,4^\circ$, а в катионе (б) уменьшается на $9,9^\circ$ по сравнению с молекулой лейцина.

Таким образом, проведенное квантово-химическое исследование протонирования лейцина показало, что присоединение протона к атомам кислорода O^1 карбонильной группы (а) и азота аминогруппы (в) лейцина не приводит к значительным изменениям пространственного и электронного строения катионов по сравнению с молекулой лейцина.

Квантово-химические расчеты геометрических параметров тетраэдрического комплексного иона цинка с лейцином ранее не проводилось. Представляло интерес выяснить, по какому атому кислорода

лейцина идет бидентатная координация к атому комплексообразователя. Изучены две модели комплексных ионов цинка с лейцином, которые показаны на рис.10.

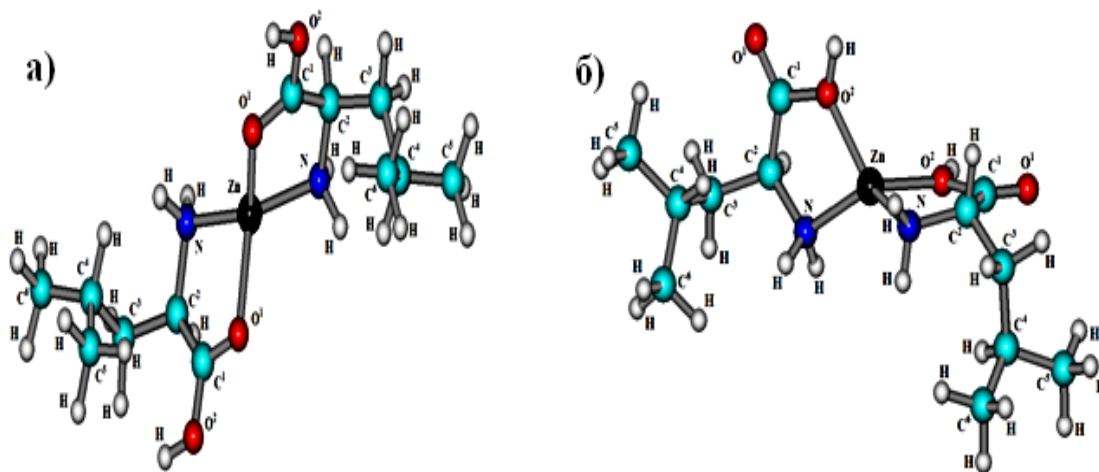


Рис. 10. Строение тетраэдрических комплексных ионов цинка с лейцином, связи лиганда с атомом металла: а - через атом азота и кислорода карбонильной группы, б - через атом азота и кислорода гидроксильной группы.

При координации лиганда основные изменения претерпевают связи $C=O^1$, NC^2 , C^1O^2 лейцина. Длины связей $C=O^1$ в модели (а) удлиняются на 0,03 Å, тогда в модели (б) комплексного иона данная связь укорачивается на 0,02 Å по сравнению с соответствующей связью свободного лиганда. Связь NC^2 лейцина при координации в обеих моделях комплексного иона (а) и (б) удлиняется на 0,4 Å и 0,8 Å. Связь C^1O^2 удлиняется на 0,11 Å только в модели иона (б), когда координация лиганда образована атомами азота и кислорода O^2 лейцина. Вычисленные порядки связей металл-лейцин ZnO , ZnN имеют разное значение для моделей (а) и (б). В модели комплексного иона цинка (б) порядок связи $C=O$ уменьшается больше, чем в модели (а) при координации свободного лейцина, несмотря на то, что координация к центральному атому в случае (б) протекает по атому кислорода O^2 . Порядок связи C^1O^2 в модели (б) практически не изменяется, хотя в данном случае связь с атомом металла осуществляется через атом кислорода O^2 лейцина. По-видимому, в модели комплексного иона (б) наблюдается перекачка электронной плотности с атома O^1 лейцина по цепочке атомов O^1CO^2 на образование связи металл-лиганд.

Следовательно, из анализа рассмотрения изменений в пространственных строениях моделей тетраэдрических комплексных ионов цинка с лейцином можно заключить, что в исследованных соединениях наблюдается бидентатная координация атомов азота и кислорода лейцина центральным атомом металла. Координация лиганда по атомам азота и

кислорода гидроксильной группы лейцина становится предпочтительней, чем когда связи металл-лиганд образованы атомами азота и кислорода карбонильной группы.

Далее проведено квантово-химическое исследование пространственной и электронной структуры **октаэдрических комплексных ионов цинка с лейцином**. Лиганды координируются к комплексообразователю атомами азота аминогруппы и кислородом карбоксильной группы. В связи с этим нами изучены два варианта модели комплексных ионов цинка с лейцином, показанные в схеме.

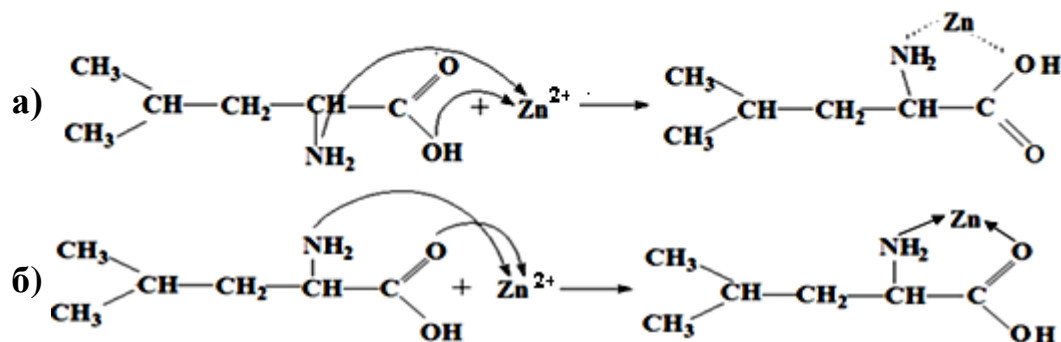


Схема. Связывания лиганда с центральным атомом: а - связи металл-лиганд (M-L) через атом азота и кислорода гидроксильной группы; б - связи M-L через атом азота и кислорода карбонильной группы.

Квантово-химическое исследование пространственного и электронного строения октаэдрического комплексного иона (вариант а), показало невозможность достижения минимума потенциальной энергии соответствующей данной структуре. Присоединение лигандов данным способом приводит к расхождению квантово-химической задачи. По-видимому, октаэдрический комплексный ион цинка не образуется связыванием лейцина через атомы азота и кислорода гидроксильной группы.

Нами рассмотрен только второй вариант связывания лигандов с атомом металла (схема б). В литературе нет никаких экспериментальных сведений по октаэдрическому комплексному иону цинка с лейцином $[\text{Zn} \cdot 3\text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2]^{2+}$. Однако, вполне возможно образование такого комплексного иона, в котором лейцин бидентатно связывается с центральным атомом через атомы азота и кислорода. Атомы $\text{OC}^1\text{C}^2\text{N}$ молекулы лейцина при координации практически лежат в одной плоскости и образуют пятичленные гетероциклы с центральным атомом (рис.11). Порядки связей $\text{C}=\text{O}^1$ при координации лиганда становятся меньше, а порядок связи CN становится больше. Если проследить тенденцию изменения длин и порядков связей при переходе от свободного лиганда к комплексному иону, то несложно заметить, что комплексообразование

приводит к ослаблению связи CO^1 и упрочнению связи CN лейцина, которые входят в пятичленный металлоцикл.

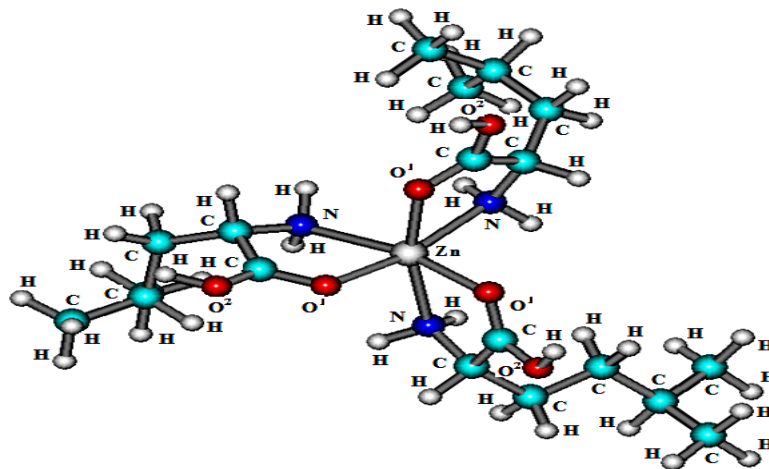


Рис. 11. Пространственное строение октаэдрического комплексного иона цинка с лейцином.

Можно сделать вывод, что модельный октаэдрический комплексный ион образуется только координацией лиганда к центральному атому через атомы азота и кислорода карбонильной группы лейцина. Комплексный ион $[\text{Zn} \cdot 3\text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2]^{2+}$ не образуется связыванием лейцина с атомом металла через атомы азота аминогруппы и кислорода гидроксильной группы.

Биологическая активность синтезированного комплекса

В настоящее время возрос интерес к соединениям биогенных элементов с органическими лигандами, проявляющими разные виды биологической активности. Такие соединения содержат в своем составе, кроме микроэлемента, разные аминокислоты. Во многих случаях аминокислоты, находясь в составе таких соединений, обнаруживают биологическую активность, не свойственную аминокислотам в свободном состоянии. С другой стороны, ионы металлов в сочетании с аминокислотами приобретают новые химические и биологические свойства. Они становятся менее токсичными и приобретают способность катализировать различные биохимические процессы. Поэтому на основе аминокислот с солями биометаллов возможно создание новых лекарственных средств и биологически активных добавок.

Лейцин – незаменимая аминокислота, защищает мышечные ткани, является источником энергии, восстанавливает кости, кожный покров, активно участвует в обмене веществ и не синтезируется в организме. Кроме того, лейцин понижает уровень сахара в крови.

Железо – жизненно важный и наиболее распространенный элемент из группы переходных металлов, необходимо почти для всех форм жизнедеятельности. В организме человека содержится не более 5 г железа, суточная потребность составляет 15–20 мг, входит в состав многих металлопротеинов, которые переносят его в организме, катализируют многочисленные окислительно-восстановительные процессы, образуют системы, обратимо присоединяющие молекулярный кислород. Недостаточное количество железа в пище человека приводит к снижению содержания гемоглобина в крови и к заболеваниям, вызванным обеднением крови железом – анемиям.

Изучение токсичности и биологической активности нового соединения, полученного нами при взаимодействии лейцина с семиводным сульфатом железа (II), показало, что двуводный дилейцинат сульфат железа ($\text{FeSO}_4 \cdot 2\text{L-C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) по степени токсического воздействия на организм животных относится к веществам III класса умеренной опасности (ГОСТ 12.1.007-76). Установлено, что данное вещество может быть использовано как компонент витаминно-минеральной добавки для стимуляции роста и развития сельскохозяйственных животных и птиц. Данное заключение подтверждено актом на токсичность и патентом на биологическую активность.

ВЫВОДЫ

1. Впервые изотермическим методом растворимости при 25 °C изучены гетерогенные равновесия в водных системах, включающих лейцин (изолейцин), хлориды металлов (цинк, никель, медь, кобальт), сульфат железа. Установлено образование десяти новых комплексных соединений:

$\text{ZnCl}_2 \cdot 2\text{L-C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$; $\text{NiCl}_2 \cdot 2\text{L-C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$; $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{L-C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$; $\text{FeSO}_4 \cdot 2\text{L-C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$; $\text{FeSO}_4 \cdot 2\text{D,L-C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$; $\text{ZnCl}_2 \cdot 2\text{L-изоC}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$; $\text{NiCl}_2 \cdot 2\text{L-изоC}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$; $\text{CuCl}_2 \cdot 2\text{L-изоC}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2$; $\text{CoCl}_2 \cdot 2\text{L-изоC}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$; $\text{FeSO}_4 \cdot 2\text{L-изоC}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$.

2. Проведена идентификация соединений с применением различных методов физико-химического анализа: пикнометрии, определением растворимости в органических растворителях, термографии, рентгенофазового анализа и ИК-спектроскопии.

3. Определены термические устойчивости новых соединений, температурные интервалы их существования, фазовые переходы. Рассчитаны интенсивность, межплоскостные расстояния, параметры элементарных ячеек, объем ячейки, число формульных единиц в ячейке,

рентгеновская плотность. Установлено, что кристаллические решетки полученных комплексных соединений относятся к моноклинной и триклинной сингонии. На основании ИК-спектроскопических исследований установлено, что координация металлов с лигандами происходит через атомы кислорода карбоксильной группы и азота аминокетонной группы.

4. Проведены квантово-химические исследования протонирования лейцина. Показано, что присоединение протона к молекуле лейцина происходит по атому кислорода карбонильной группы или азота аминокетонной группы лейцина.

5. Изучены пространственные и электронные строения моделей комплексных ионов цинка с лейцином. Установлено, что в тетраэдрическом комплексном ионе цинка лиганд связывается с центральным атомом металла атомами азота и кислорода карбоксильной группы лейцина, а октаэдрический комплексный ион образуется связыванием лейцина атомами азота и только кислорода карбонильной группы.

6. Доказано, что по степени токсического воздействия на организм животных двухводный дилейцинат сульфат железа относится к веществам III класса умеренной опасности (ГОСТ 12.1.007-76). Полученное соединение может быть использовано в качестве витаминно-минеральной пищевой добавки для стимуляции роста и развития сельскохозяйственных животных и птиц.

Основные результаты исследований отражены в следующих работах:

1. **Омурзакова, Г.Г.** Двухводный дилейцинат сульфат железа, обладающий свойством стимулировать рост, развитие сельскохозяйственных животных и птиц [Текст]/ Ж.Ж. Карагулова, З. Б. Бакасова, Б.М. Мурзубраимов, Г.Г. Омурзакова и др.// Патент №1272. Заявка №200901271. 9-ноября 2009 г. Зарегистрировано в Государственном реестре изобретений КР 30-июня 2010 г.
2. **Омурзакова, Г.Г.** Протонирование лейцина [Текст]/ Г.Г. Омурзакова // Вестник ЖАГУ. - 2009. - №2. - С. 71- 74.
3. **Омурзакова, Г.Г.** Исследование комплексообразования в системе L-лейцин-сульфат железа (II)-вода при 25⁰С [Текст]/ Г.Г. Омурзакова, Б.М. Мурзубраимов // Успехи современной науки и образования. – 2016. - №5. Том 3. - С. 140-142.

4. **Омурзакова, Г.Г.** Взаимодействие изолейцина с хлоридом никеля в водной среде [Текст] / Г.Г. Омурзакова // Наука, техника и образование. – 2016. - №10 (28). - С. 26-28.
5. **Омурзакова, Г.Г.** Моделирование катиона лейцина [Текст]/ Г.Г. Омурзакова., М.А. Туленбаева // Проблемы современной науки и образования. - 2017. - №6 (88). - С. 10-13.
6. **Омурзакова, Г.Г.** Тетраэдрические комплексные ионы цинка с лейцином [Текст]/ Г.Г. Омурзакова., М.А. Туленбаева // Наука XXI века: Открытия, инновации, технологии. - Смоленск. - 2017. - С. 105-111.
7. **Омурзакова, Г.Г.** Октаэдрический комплексный ион цинка с лейцином [Текст] / Г.Г. Омурзакова., М.А. Туленбаева., Ж.К. Камалов // Вестник науки и образования. – 2017. -№4 (28). - С. 7-11.
8. **Омурзакова, Г.Г.** Взаимодействие изолейцина с хлоридом цинка в водной среде [Текст] / Г.Г. Омурзакова // Инновационное развитие: потенциал науки и современного образования. – Пенза. - 2017. - С. 184-189.

РЕЗЮМЕ

диссертации Омурзаковой Гулнары Гуламовны на тему «Синтез и изучение свойств комплексных соединений биометаллов с лейцином и изолейцином» на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности: 02.00.01 – неорганическая химия

Ключевые слова: лейцин, изолейцин, биометалл, лиганд, система, комплексообразователь, водный раствор, метод растворимости, диаграмма, синтез, свойства, биологическая активность, порядок и длина связи, полуэмпирический расчет.

Объект исследования: лейцин, изолейцин, комплексные соединения цинка, никеля, меди, кобальта и железа.

Цель исследования: изучение химического взаимодействия лейцина и изолейцина с солями биометаллов и синтез новых соединений.

Методы исследования: химический и элементный анализ, изотермический метод растворимости, рентгенофазовый, термогравиметрический методы анализа и ИК-спектроскопия, полуэмпирические квантово-химические методы.

Исследовательское оборудование: термостат ТС-15, дериватограф Q-1000d, дифрактометр ДРОН-3, спектрофотометр SPECORD М-80, компьютер, пакет программного обеспечения Hyper Chem v.7.5.

Полученные результаты и их новизна. В результате изучения равновесий десяти тройных систем методом растворимости при 25°C хлоридов цинка, никеля, меди, кобальта, а также сульфата железа с лейцином и изолейцином в водном растворе установлено образование десяти новых комплексных соединений. Изучены физико-химические свойства синтезированных комплексных соединений.

Впервые проведено квантово-химическое исследование протонирования лейцина и изучения пространственного, электронного строения тетраэдрических и октаэдрических комплексных ионов цинка с лейцином. В результате исследований определены длины и порядки связей, валентные углы, эффективные заряды атомов в исследуемых соединениях, рассмотрены способы координации лиганда к центральному атому комплексообразователя.

В результате изучения токсичности двуводного дилейцинат сульфат железа (II) ($\text{FeSO}_4 \cdot 2\text{L} \cdot \text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$) выявлено, что соединение относится к малотоксичным веществам и может быть использовано как компонент пищевой витаминно-минеральной добавки для животных и птиц.

Область применения: сельское хозяйство, ветеринария.

Омурзакова Гулнара Гуламовнанын «Лейцин жана изолейцидин биометаллдар менен комплекстик бирикмелерин синтездөө жана касиеттерин изилдөө» деген темада 02.00.01 – органикалык эмес химия адистиги боюнча химия илимдеринин кандидаты окумуштуулук даражасына сунуш кылынган диссертациясынын

КОРУТУНДУСУ

Негизги сөздөр: лейцин, изолейцин, биометалл, лиганд, система, комплекс пайда кылуучу, суулуу эритме, эриткич ыкмасы, диаграмма, синтез, касиет, биологиялык активдүүлүк, байланыш катары жана узундугу, жарым эмпирикалык эсеп.

Изилдөө объектиси: лейцин, изолейцин, цинктин, никелдин, жездин, кобальттын жана темирдин комплекстик бирикмелери.

Изилдөөнүн максаты: лейцин жана изолейцидин биометаллдардын туздары менен химиялык өз ара таасир этүүсүн изилдөө жана жаңы бирикмелерди синтездөө.

Изилдөө ыкмалары: химиялык жана элементтик анализ, эригичтүүлүктүн изотермикалык ыкмасы, рентгенофазалык, термогравиметрикалык анализдин ыкмасы жана ИК-спектроскопия, жарым эмпирикалык кванттык-химиялык ыкмалар.

Изилдөөнүн жабдуулары: термостат ТС-15, дериватограф Q-1000d, дифрактометр ДРОН-3, спектрофотометр SPECORD M- 80, компьютер, Hyper Chem v.7.5. программасын камсыздоо пакети.

Алынган жыйынтыктар жана изилдөөнүн жаңычылдыгы. Эригичтүүлүк ыкмасын колдонуп, 25 °Сда цинктин, никелдин, жездин, кобальттын хлориддери жана темирдин сульфаты менен лейцин жана изолейцидин суудагы эритмесинен үчтүк системанын тең салмактуулугун изилдөөнүн жыйынтыгында жаңы он комплекстик бирикмени пайда кылаары тастыкталды. Синтезделген комплекстик бирикмелердин физика-химиялык касиеттери изилденди.

Лейцинди протондоштурууда алгачкы жолу кванттык-химиялык изилдөө жүргүзүлдү жана цинктин лейцин менен тетраэдрдик, октаэдрдик комплекстик ионунун мейкиндик жана электрондук түзүлүшү изилденди. Изилдөөнүн жыйынтыгында байланыштардын узундугу жана катары, валенттик бурчтар, изилденүүчү бирикмелердин атомдорунун эффективдүү заряды аныкталып, комплексти пайда кылуучу борбордук атомго лиганданын координациялануу жолдору каралды.

Темирдин сульфатынын эки суулуу дилейцинаты комплекстик бирикмесинин $\text{FeSO}_4 \cdot 2\text{L} - \text{C}_6\text{H}_{13}\text{NO}_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ биологиялык активдүүлүгү жана уулуулугу изилденип, анын айыл-чарба жаныбарларынын жана канаттууларынын өсүүсүн жана өнүгүүсүн стимулдаштыруу үчүн кошумча витаминдик-минералдык азык катары колдонууга мүмкүн экендигин көрсөттү.

Колдонуу тармагы: айыл чарбасы, ветеринария.

SUMMARY

Candidate's dissertation of Omurzakova Gulnara Gulamovna on the topic «Synthesis and study of the properties of complex compounds of biometals with leucine and isoleucine» for the degree of candidate of chemical sciences in specialty: 02.00.01 - Inorganic chemistry

Key words: leucine, isoleucine, biometal, ligand, system, complexing agent, aqueous solution, solubility method, diagram, synthesis, properties, biological activity, order and length of bond, semi-empirical calculation

Object of the study: leucine, isoleucine, complex compounds of cobalt, nickel, copper, zinc and iron.

The purpose of the study: to study the chemical interaction of leucine and isoleucine with salts of biometals and the synthesis of new compounds.

Research methods: chemical and elemental analysis, isothermal solubility method, X-ray diffraction, thermogravimetric analysis and IR spectroscopy, semi-empirical quantum chemical methods.

Research equipment: TC-15 thermostat, derivatograph Q-1000d, DRON-3 diffractometer, SPECORDM-80 spectrophotometer, computer, software package Hyper Chem v.7.5.

Obtained results and their novelty. As a result of studying the equilibria of ten ternary systems, the formation of ten new complex compounds has been established in the aqueous solution by the solubility method at 25 °C of cobalt, nickel, copper, zinc, and iron sulfate with leucine and isoleucine. The physicochemical properties of synthesized complex compounds have been studied.

For the first time, the quantum chemical investigation of the protonation of leucine and the electronic structure of tetrahedral and octahedral complex zinc ions with leucine was carried out. As a result of the research, the lengths and bond orders, the valence angles, the effective charges of atoms in the compounds studied, the ways of coordination of the ligand to the central atom of the complexing agent are determined.

As a result of the study of the toxicity of dicalcium iron (II) dileucinate iron sulfate, it was found that the compound belongs to low-toxic substances and can be used as a component of a vitamin and mineral supplement for animals and birds.

Application: agriculture, veterinary medicine.

Формат 60x84/16, объем 1,6 п. л.
Бумага офсет., тираж 100 экз.

ЧП «Сарыбаев Т.Т.».
г. Бишкек, ул. Раззакова, 49
т. 62-67-76