

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ

УДК 577.11:577.112.3

DOI: 10.34680/2076-8052.2025.3(141).495-505

Поступила в редакцию / Received 09.07.2025

ГРНТИ 31.27.51+31.27.41

Специальность ВАК 1.3.8.; 1.4.4.

Принята к публикации / Accepted 03.10.2025

Научная статья

ЛИЗИНАТ И МЕТИОНАТ ЦИНКА: СИНТЕЗ И РАСЧЕТ ИК СПЕКТРОВ МЕТОДОМ ФУНКЦИОНАЛА ПЛОТНОСТИ

Беспалов Д. В., Голованова О. А.

Омский государственный университет имени Ф. М. Достоевского (Омск, Россия)

Аннотация. Научный интерес представляют физико-химические характеристики комплексов цинка, обладающих огромным значением для поддержания биологической активности и вследствие их большого потенциала применения в медицине и биотехнологии. Методами Хартри–Фока и DFT/B3LYP/6-31G (p, d) с учетом поляризации среды посредством модели поляризуемого континуума смоделированы структуры лизината и метионата цинка (II). Расчетные инфракрасные спектры сопоставлены с экспериментальными для уточнения геометрии. Предложены модели строения соединений. Данные о координации Zn (II) с аминокислотами важны для изучения малоисследованных комплексов. Результаты применимы при разработке антимикробных, противоопухолевых препаратов.

Ключевые слова: метод функционала плотности, цинк, аминокислота, ИК спектр, синтез

Для цитирования: Беспалов Д. В., Голованова О. А. Лизинат и метионат цинка: синтез и расчет ИК спектров методом функционала плотности // Вестник НовГУ. 2025. 3 (141). 495–505. DOI: 10.34680/2076-8052.2025.3(141).495-505

Research Article

ZINC LYSINATE AND METHIONATE: SYNTHESIS AND IR SPECTRUM CALCULATION USING THE DENSITY FUNCTIONAL THEORY METHOD

Bespalov D. V., Golovanova O. A.

Dostoevsky Omsk State University (Omsk, Russia)

Abstract. Of scientific interest are the physicochemical characteristics of zinc complexes, which are essential for maintaining biological activity and have a great potential for use in medicine and biotechnology due to their unique properties. Using the Hartree–Fock method and DFT/B3LYP/6-31G(p,d) with solvent polarization accounted for via the polarizable continuum model, the structures of zinc (II) lysinate and methionate were modeled. The calculated infrared spectra were compared with experimental data to refine the geometries, and structural models of the compounds were proposed. Data on the coordination of Zn (II) with amino acids are important for the study of little-explored complexes. The results are applicable to the development of antimicrobial and antitumor drugs.

Keywords: density functional theory method, zinc, amino acid, IR spectrum, synthesis

For citation: Bespalov D. V., Golovanova O. A. Zinc lysinate and methionate: synthesis and IR spectrum calculation using the density functional theory method // Vestnik NovSU. 2025. 3 (141). 495–505. DOI: 10.34680/2076-8052.2025.3(141).495-505

Введение

Цинк относится к числу незаменимых элементов, критически значимых для функционирования биологических систем. Этот ион-металл активно участвует в биохимических реакциях, являясь компонентом свыше трехсот ферментов, которые катализируют различные процессы в организме [1–3]. Его роль включает не только регуляцию активности генов, но и пространственную организацию белковых молекул, определяя их стабильность и функциональность.

Что касается аминокислот, они служат основными структурными единицами протеинов и выполняют важные задачи в обмене веществ, обеспечивая синтез и распад метаболитов [4–6].

Комплексные соединения цинка с аминокислотами представляют интерес в качестве объекта исследования благодаря биологической активности и широкому потенциальному применению в медицине и биотехнологии [7, 8].

Известно, что при образовании таких комплексов ион цинка образует координационные связи с донорными атомами аминокислот – азота в аминогруппе и кислорода в карбоксильной группе ($-\text{COO}^-$). Варьируя условия синтеза, можно получать структуры разной координации, что может влиять на свойства соединений [9].

Особый интерес представляют физико-химические характеристики исследуемых комплексов. Они демонстрируют повышенную устойчивость в водных средах, что делает их пригодными для применения в физиологических условиях без опасности быстрого распада. Кроме того, данные соединения могут выступать катализаторами биохимических процессов, увеличивая скорость реакций за счет активации промежуточных стадий взаимодействий [10].

Некоторые комплексы цинка с аминокислотами демонстрируют антиоксидантную активность, способны нейтрализовать свободные радикалы, предотвращая клеточные повреждения. Фармакологический потенциал таких комплексов подтверждается их многофункциональностью: экспериментальные данные свидетельствуют, что часть из них подавляет рост патогенных микроорганизмов и злокачественных клеток, что актуально для разработки антимикробных и онкологических препаратов нового поколения [11].

Комплексы цинка с метионином и лизином являются не только перспективными терапевтическими агентами, но и эффективными биодоступными формами для обогащения рациона человека и животных. Их применение позволяет оптимизировать усвоение цинка организмом человека, что особенно важно при заболеваниях, связанных с дефицитом этого микроэлемента. Например, метионин, не только улучшает абсорбцию цинка, но и способствует детоксикации организма, что подтверждено исследованиями на моделях хронических поражений печени [12]. Интерес к хелатным комплексам $\text{Zn}^{2+}:\text{Lys}$, $\text{Zn}^{2+}:\text{Met}$ подкреплен их противовоспалительными и антиоксидантными свойствами. Такие соединения

снижают окислительный стресс клеток, что может быть использовано в терапии дерматологических заболеваний. Комплексы цинка и лизина, в свою очередь, стимулируют синтез коллагена и усвоение кальция, что делает их ценными для лечения остеопороза и регенерации тканей. А также может ускорять заживление ран, что связано с активацией ангиогенеза [13].

Цель исследования – создание методами квантово-химического расчета модельных структур лизината и метионат цинка, расчет ИК спектров, сопоставление ИК спектров, полученных теоретическим путем с экспериментальными, уточнения структурных особенностей синтезированных соединений.

Материалы и методы

В рамках исследования для моделирования структуры применялось программное обеспечение GAMESS US, поддерживающее квантово-химические расчеты методами HF и DFT с функционалом B3LYP. Искользованные базисные наборы – 6–31G (p, d) [14]. Для построения геометрии использовалась программа Chemcraft. Для моделирования воздействия конденсированной среды на свойства изучаемого соединения применялась методика поляризуемого континуума (PCM). Для исследуемых комплексов цинка с аминокислотой была выполнена оптимизация геометрии до достижения минимального энергетического состояния, проведен расчет частот нормальных колебательных мод спектров ИК спектроскопии.

Методика синтеза разрабатывалась с опорой на ранее опубликованные работы, где описывалось получение структурно схожих соединений [15]. Процедура синтеза: точные массы аминокислот (1,49 г метионина и 1,64 г лизина) растворяли в 20 мл бидистиллированной воды. При этом, pH раствора регулировали методом электролиза (графитовые электроды) до значений, превышающих изоэлектрическую точку аминокислот, что активировало механизм внутримолекулярного основания. В полученный раствор добавили навеску 1,36 г хлорида цинка (ZnCl_2), после чего реакционную смесь помещали в темное место. Взаимодействие компонентов протекало при комнатной температуре в течение 7 суток, завершаясь образованием кристаллического осадка. Продукт реакции последовательно промывали ледяной дистиллированной водой (0°C) и высушивали для удаления остаточной влаги.

Химический состав синтезированных образцов исследовали методом инфракрасной спектроскопии. Искользовали спектрофотометр ФСМ 2202, с помощью которого регистрировали ИК спектры комплексов цинка с аминокислотами. Измельчали синтезированные образцы в агатовой ступке до мелкодисперсного состояния. Смешивали полученные порошки с KBr в соотношении 1:100. Наносили смеси на германиевую подложку с последующим прессованием для формирования прозрачных таблеток. Измерения проводили в диапазоне

500–4000 см^{-1} с шагом разрешения 1 см^{-1} , что обеспечило детектирование характеристических полос поглощения функциональных групп.

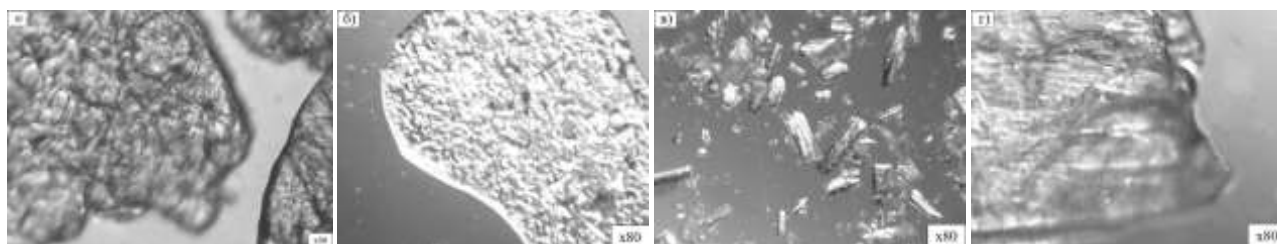
Количественное содержание ионов цинка в образцах определяли с использованием комплексонометрического титрования.

Анализ содержания аминокислоты проводили методом Серенсена – титрования с формальдегидом.

Морфологический анализ синтезированных твердофазных образцов выполняли с использованием оптического микроскопа XSP-140. Подготовленные пробы наносили на предметные стекла с последующей фиксацией. Цифровую регистрацию изображений осуществляли с помощью программного обеспечения Tour View.

Результаты и их обсуждение

Синтезированы координационные соединения цинка с лизином ($\text{Zn}^{2+}:\text{Lys}$) и метионином ($\text{Zn}^{2+}:\text{Met}$) и проанализированы с помощью оптической микроскопией. Вид осадков, представленный на рисунке 1, показал отличия их морфологии от кристаллической структуры исходных аминокислот.



а) АК – метионин

б) $\text{Zn}^{2+}:\text{Met}$

в) АК –лизин

г) $\text{Zn}^{2+}:\text{Lys}$

Рисунок 1. Визуализация морфологии исследуемых соединений на электронном микроскопе XSP-140 при стандартном увеличении 80 крат

ИК спектроскопия выявила изменения в интерпретируемых областях характеристических полос поглощения, ИК-спектры осадков в сравнении с соответствующей АК, представлены на рисунке 2.

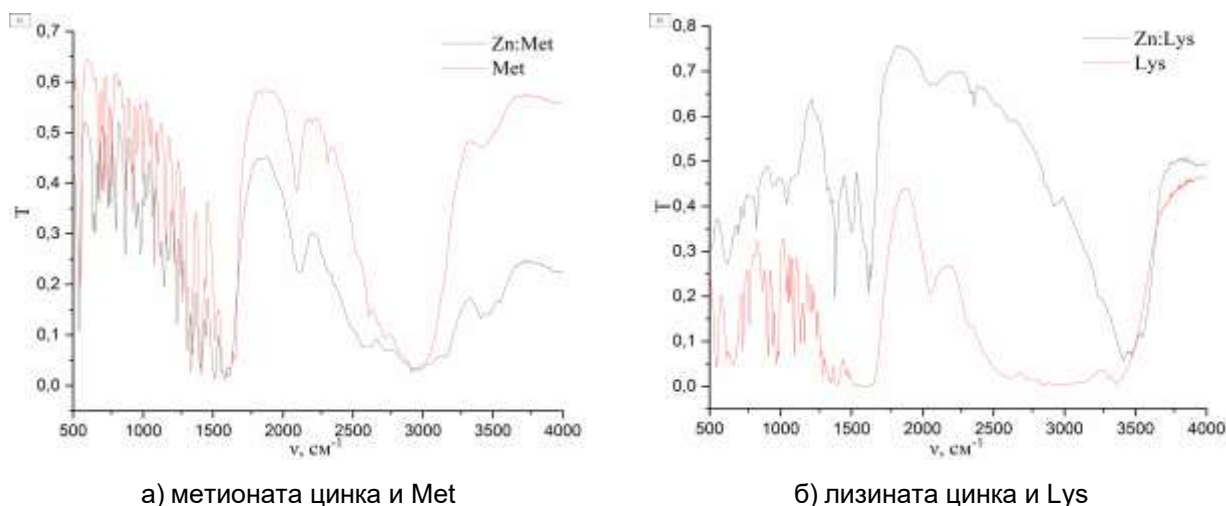


Рисунок 2. ИК спектры синтезированных комплексов цинка и соответствующих АК

Наблюдаемые изменения в ИК-спектрах, включая появление, смещение пиков и перераспределение интенсивностей, позволяют сделать вывод о формировании металлоорганических структур. Полученные данные согласуются с гипотезой о координации цинка через amino- и карбоксильные группы соответствующих аминокислот, а именно метионина и лизина.

Данные количественного анализа синтезированных комплексов, полученные методом титрования, отражены в таблице 1. Согласно результатам, молярное соотношение иона цинка (II) и аминокислот в исследуемых осадках равняется 1:2. Это свидетельствует о формировании соединений, где каждый ион Zn^{2+} координирован двумя молекулами аминокислоты, что согласуется с предполагаемой структурой комплексов.

Таблица 1. Данные титриметрических анализов молярных соотношений цинка (II) и аминокислот в синтезированных комплексах

Определение количества ионов цинка (II)			Определение количества аминокислот	
Осадок	Сн (трилон Б), моль/л	n(Zn^{2+}), моль	С _м (NaOH), моль/л	n(АК), моль
Zn ²⁺ :Lys	0,01	0,0026	0,1	0,0053
Zn ²⁺ :Met	0,01	0,0018	0,1	0,0037

Методами квантово-химического моделирования (DFT/B3LYP) оптимизированы структуры лизината и метионата цинка. Расчетные значения минимальной энергии соединений составили –2750,632 Хартри ($-1,199 \times 10^{-14}$ Дж) и –3354,688 Хартри ($-1,462 \times 10^{-14}$ Дж) соответственно. Визуализация пространственной организации комплексов представлена на рисунке 3.

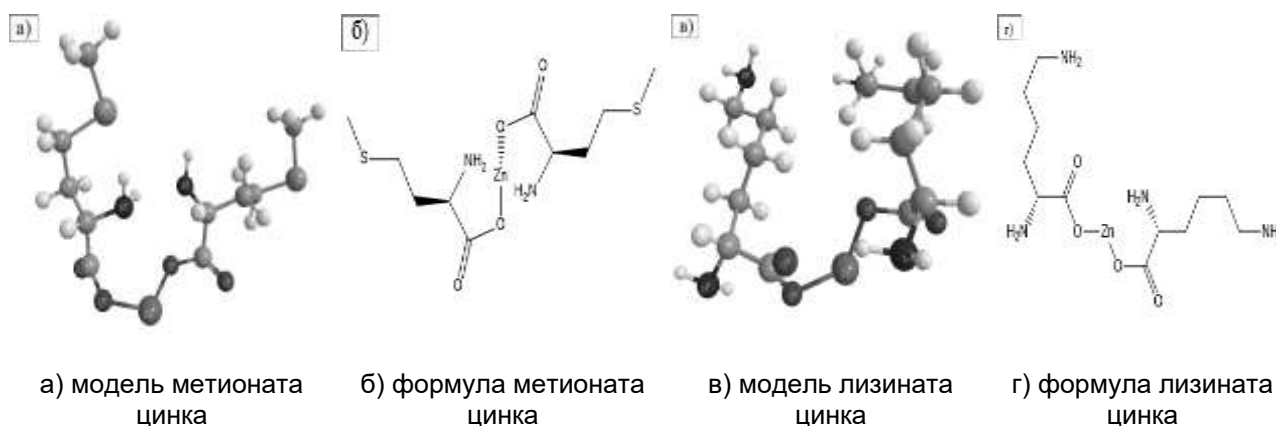


Рисунок 3. Оптимизированные расчетные структуры исследуемых комплексов

Термодинамические параметры моделей (энтальпия, энтропия, энергия Гиббса, внутренняя энергия) рассчитаны при стандартных условиях (298,15 K) и систематизированы в таблице 2. Использование подобных условий расчета может обеспечивать сопоставимость результатов с опубликованными данными по аналогичным соединениям [11].

Таблица 2. Термодинамические параметры оптимизированных структур цинковых комплексов с лизином и метионином при стандартной температуре (298,15 K)

Модель 1:2	HF	DFT	HF	DFT
	Zn ²⁺ :Lys		Zn ²⁺ :Met	
Энтальпия H, ккал/моль	263,662	280,189	204,393	219,007
Энтропия S, кал/моль K	153,522	148,906	132,759	140,157
Свободная энергия Гиббса, ккал/моль	217,889	235,793	164,811	177,219
Внутренняя энергия U, ккал/моль	262,638	279,597	203,801	218,414

В таблице 3 отражено сопоставление экспериментальных ИК спектров синтезированных комплексов метионата и лизината цинка с выбранными теоретическими расчетными методами (HF и DFT / B3LYP в базе 6–31G (d, p)). Анализ охватывает диапазон 500–4000 см⁻¹, где наблюдаемые расхождения между пиками не превышают 5%, что подтверждает адекватность выбранных методов вычислительных.

Для корректировки теоретически рассчитанных ИК спектров использовали масштабные коэффициенты колебательных частот, учитывающие погрешности квантово-химических методов. Значения коэффициентов (0,961 для DFT / B3LYP / 6–31G (d, p) и 0,903 для HF / 6–31G (d, p)) взяты из открытой базы данных Computational Chemistry Comparison and Benchmark DataBase (CCCBDB).

Анализ теоретических (DFT / 6–31G (p, d)) и экспериментальных ИК спектров лизината цинка демонстрирует следующее.

Таблица 3. Расчетные и экспериментальные частоты колебаний ИК спектров комплексов цинка с лизином и метионином.

Лизинат цинка			Метеонат цинка		
$\nu_{\text{эксп.}}, \text{cm}^{-1}$	$\nu_{\text{DFT}}, \text{cm}^{-1}$	$\nu_{\text{HF}}, \text{cm}^{-1}$	$\nu_{\text{эксп.}}, \text{cm}^{-1}$	$\nu_{\text{DFT}}, \text{cm}^{-1}$	$\nu_{\text{HF}}, \text{cm}^{-1}$
624	590	603	644	626	666
692	691	696	707	703	728
705	712	711	749	740	744
738	750	728	804	788	828
790	780	747	874	864	873
830	835	839	980	970	993
879	871	880	1025	1017	1036
955	961	958	1069	1086	1086
1004	1005	998	1150	1177	1156
1044	1044	1044	1242	1232	1230
1260	1261	1266	1274	1273	1273
1329	1328	1305	1328	1311	1322
1355	1357	1356	1355	1332	1344
1384	1380	1386	1385	1371	1392
1497	1482	1504	1409	1420	1426
1592	1583	1598	1448	1448	1494
1618	1612	1608	1509	1505	1511
1638	1640	1649	1585	1589	1573
1869	1860	1880	1616	1614	1618
2427	2402	2555	1855	1876	1857
2614	2609	2702	2603	2681	2640
2867	2876	2879	2737	2738	2815
2930	2934	2921	2917	2911	2907
2952	2994	2941	2967	2997	2991
3242	3258	3290	3157	3156	3150
3414	3407	3433	3415	3410	3410
3480	3478	3490	3479	3496	3432
3545	3528	3511	3546	3574	3502

1. В спектре модели наблюдается интенсивное поглощение при 1638 cm^{-1} (асимметричные колебания COO^-) и 1260 cm^{-1} (C=O), что коррелирует с экспериментальными пиками синтезированного комплекса $\text{Zn}^{2+}:\text{Lys}$ (1640 cm^{-1} и 1261 cm^{-1}). Расхождение менее 2% подтверждает предположение о взаимодействии иона Zn^{2+} с карбоксильной группой лизина, как и в предложенной модели.

2. Теоретический спектр демонстрирует два выраженных пика асимметричных (3478 cm^{-1}) и симметричных (3258 cm^{-1}) колебаний NH_2 , отсутствующих у лизина из-за его ионного состояния в растворе. В синтезированном комплексе аналогичные полосы обнаружены при 3480 cm^{-1} и 3242 cm^{-1} (погрешность $<2\%$),

что указывает на координацию цинка с аминогруппой по донорно-акцепторному механизму взаимодействия.

3. Отсутствие в модельном спектре полосы $\sim 2006\text{ см}^{-1}$ (характерной для сильных водородных связей N-H \cdots O) свидетельствует об отсутствии таких взаимодействий в теоретической структуре. Однако ее наличие на экспериментальном ИК спектре подтверждает включение молекул воды в структуру синтезированного комплекса, формирующих водородные связи с аминогруппой.

4. Наличие слабых полос в области $\sim 1860\text{ см}^{-1}$ (1869 см^{-1} в эксперименте, 1860 см^{-1} в модели) согласуется с предположением о образовании координационной связи между ионом цинка(II) и атомом азота аминогруппы.

Исходя из перечисленных рассуждений, синтезированный комплекс $\text{Zn}^{2+}:\text{Lys}$ структурно соответствует расчетной модели, однако содержит дополнительные взаимодействия с молекулами воды со свободными, не взаимодействующими с цинком аминогруппами, что подтверждается ИК спектроскопией. Аналогичный подход, применен к метионату цинка ($\text{Zn}^{2+}:\text{Met}$). Сравнение расчетных (на примере DFT) и экспериментальных ИК спектров позволило выявить особенности координации соединения.

Заключение

Синтезированы комплексные соединения лизината и метионата цинка. Методами квантово-химического моделирования (Хартри-Фок и DFT/B3LYP) оптимизированы структуры исследуемых соединений, определены их энергетически стабильные конфигурации и рассчитаны колебательные спектры в гармоническом приближении. Для обоих комплексов получены термодинамические параметры при стандартных условиях. Методом ИК спектроскопии получены спектры синтезированных соединений. Сравнение расчетных и экспериментальных ИК спектров продемонстрировали высокую корреляцию между собой. Анализ результатов подтвердил, что структурная организация синтезированных соединений соответствует расчетным моделям, за исключением того, что в реальных комплексах возможно наличие воды, взаимодействующей со свободными аминогруппами, что также может объяснять отклонения в спектрах. Установлены составы координации цинка с лизином и метионином (соотношение молей Zn:AK 1:2). Данные о координации соединений ионов цинка с аминокислотами, помогают достоверно установить строение их малоизученных комплексов, а также совершенствовать методы синтеза комплексных соединений заранее определенного состава.

Благодарности

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 075-03-2023 «Фундаментальная теория кристаллизации ОМА и физико-химических методов исследования патогенного минералообразования в организме человека с целью профилактики, блокирования патогенов и создания биомиметических систем доставки лекарств»).

Список литературы

1. Maret W. Zinc in Cellular Regulation: The Nature and Significance of “Zinc Signals” // International journal of molecular sciences. 2017. 18 (11). 2285. DOI: 10.3390/ijms18112285
2. Wessels I., Maywald M., Lothar R. Zinc as a gatekeeper of Immune function // Nutrients. 2017. 9 (12). 1286. DOI: 10.3390/nu9121286
3. Chasapis C. T., Loutsidou A. C., Spiliopoulou C. A., Stefanidou M. E. Zinc and human health: an update // Archives of toxicology. 2012. 86. 521–534. DOI: 10.1007/s00204-011-0775-1
4. Enass W., Shatha O., Abbas A. Biological activities of amino acid derivatives and their complexes a review // Research journal of pharmaceutical biological and chemical sciences. 2019. 10 (2). 1624–1641.
5. Трошина Е. А., Сенюшкина Е. С. Роль цинка в процессах синтеза и метаболизма гормонов щитовидной железы // Клиническая и экспериментальная тиреоидология, 2020. 16 (3). 25–30. DOI: 10.14341/ket12697
6. Левчук Л. В., Бородулина Т. В., Санникова Н. Е., Данилова, И. Г. Клиническое значение содержания свободных аминокислот для роста и развития детей // Уральский медицинский журнал. 2017. 149 (5). 11–15.
7. Karakousi R., Tsami P., Spanoudaki M., Dalgarno S. Blue-emitting 2D- and 3D-Zinc coordination polymers based on schiff-base amino acid ligands // Chemistry. 2023. 5 (3). 1770–1780. DOI: 10.3390/chemistry5030121
8. Zhang. Y., Li X., Li J., Khan Z. H., Ma F., Liu X. A novel zinc complex with antibacterial and antioxidant activity // BMC Chemistry. 2021. 15 (1). 17. DOI: 10.1186/s13065-021-00745-2
9. Abendrot M., Checinska L., Kusz J., Lisowska K., Zawadzka K., Felczak A., Kalinowska-Lis U. Zinc(II) complexes with amino acids for potential use in dermatology: synthesis, crystal structures, and antibacterial activity // Molecules. 2020. 25 (4). 951. DOI: 10.3390/molecules25040951
10. Ahmed E. A., Soliman A. M. M., Ali A. M., El-Remaily M. A. E. A. A. Boosting the catalytic performance of zinc linked amino acid complex as an eco-friendly for synthesis of novel pyrimidines in aqueous medium // Applied organometallic chemistry. 2021. 35 (5). e6197. DOI: 10.1002/aoc.6197
11. Bossowski A., Stozek K., Rydzewska M., Niklinska W., Gasowska M., Polnik D., Szalecki M., Miklosz A., Chabowski A., Reszec J. Expression of zinc transporter 8 in thyroid tissues from patients with immune and non-immune thyroid diseases // Autoimmunity. 2020. 53 (7). 376–384. DOI: 10.1080/08916934.2020.1815194
12. Mansoor N. B., Jaimin M. P., Dhruv P., Murphy N., Brown R. M., Elsharkawy A. M., Mehta G., Armstrong M. J., Neil D. SARS-CoV-2: is the liver merely

a bystander to severe disease? // *Journal of hepatology*. 2020. 73 (4). 995–996. DOI: 10.1016/j.jhep.2020.05.035

13. Lin P.-H., Sermersheim M., Li H., Lee P. H. U., Steinberg S. M., Ma J. Zinc in wound healing modulation // *Nutrients*. 2018. 10 (1). 16. DOI: 10.3390/nu10010016

14. Mamand D., Qadr H. Density functional theory and computational simulation of the molecular structure on corrosion of carbon steel in acidic media of some amino acids // *Russian journal of physical chemistry*. 2022. 96. 2155–2165. DOI: 10.1134/S0036024422100193

15. Bespalov D. V., Golovanova O. A. Magnesium glycinate and tyrosinate: structure calculations and IR spectra by the DFT method // *Russian journal of physical chemistry A*. 2024. 98 (7). 1380–1387. DOI: 10.1134/S0036024424700377

References

1. Maret W. Zinc in Cellular Regulation: The Nature and Significance of “Zinc Signals” // *International Journal of Molecular Sciences*. 2017. 18 (11). 2285. DOI: 10.3390/ijms18112285

2. Wessels I., Maywald M., Lothar R. Zinc as a gatekeeper of immune function // *Nutrients*. 2017. 9 (12). 1286. DOI: 10.3390/nu9121286

3. Chasapis C. T., Loutsidou A. C., Spiliopoulou C. A., Stefanidou M. E. Zinc and human health: an update // *Archives of toxicology*. 2012. 86. 521–534. DOI: 10.1007/s00204-011-0775-1

4. Enass W., Shatha O., Abbas A. Biological activities of amino acid derivatives and their complexes a review // *Research journal of pharmaceutical biological and chemical sciences*. 2019. 10 (2). 1624–1641.

5. Troshina E. A., Senyushkina E. S. The role of zinc in the synthesis and metabolism of thyroid hormones // *Clinical and experimental thyroidology*. 2020. 16 (3). 25–30. DOI: 10.14341/ket12697 (In Russian).

6. Levchuk L. B., Borodulina T. V., Sannikova N. E., Danilova I. G. The clinical significance of the content of free amino acids for the growth and development of children // *Ural medical journal*. 2017. 149 (5). 11–15. (In Russian).

7. Karakousi R., Tsami P., Spanoudaki M., Dalgarno S. Blue-emitting 2D- and 3D-Zinc coordination polymers based on schiff-base amino acid ligands // *Chemistry*. 2023. 5 (3). 1770–1780. DOI: 10.3390/chemistry5030121

8. Zhang Y., Li X., Li J., Khan Z. H., Ma F., Liu X. A novel zinc complex with antibacterial and antioxidant activity // *BMC Chemistry*. 2021. 15 (1). 17. DOI: 10.1186/s13065-021-00745-2

9. Abendrot M., Checinska L., Kusz J., Lisowska K., Zawadzka K., Felczak A., Kalinowska-Lis U. Zinc(II) Complexes with amino acids for potential use in dermatology: synthesis, crystal structures, and antibacterial activity // *Molecules*. 2020. 25 (4). 951. DOI: 10.3390/molecules25040951

10. Ahmed E. A., Soliman A. M. M., Ali A. M., El-Remaily M. A. E. A. A. Boosting the catalytic performance of zinc linked amino acid complex as an eco-friendly for synthesis of novel pyrimidines in aqueous medium // *Applied organometallic chemistry*. 2021. 35 (5). e6197. DOI: 10.1002/aoc.6197

11. Bossowski A., Stozek K., Rydzewska M., Niklinska W., Gasowska M., Polnik D., Szalecki M., Miklosz A., Chabowski A., Reszec J. Expression of zinc transporter 8 in thyroid tissues from patients with immune and non-immune thyroid diseases // *Autoimmunity*. 2020. 53 (7). 376–384. DOI: 10.1080/08916934.2020.1815194

12. Mansoor N. B., Jaimin M. P., Dhruv P., Murphy N., Brown R. M., Elsharkawy A. M., Mehta G., Armstrong M. J., Neil D. SARS-CoV-2: is the liver merely a bystander to severe disease? // Journal of hepatology. 2020. 73 (4). 995–996. DOI: 10.1016/j.jhep.2020.05.035
13. Lin P.-H., Sermersheim M., Li H., Lee P. H. U., Steinberg S. M., Ma J. Zinc in wound healing modulation // Nutrients. 2018. 10 (1). 16. DOI: 10.3390/nu10010016
14. Mamand D., Qadr H. Density functional theory and computational simulation of the molecular structure on corrosion of carbon steel in acidic media of some amino acids // Russian journal of physical chemistry. 2022. 96. 2155–2165. DOI: 10.1134/S0036024422100193
15. Bespalov D. V., Golovanova O. A. Magnesium glycinate and tyrosinate: structure calculations and IR spectra by the DFT method // Russian journal of physical chemistry A. 2024. 98 (7). 1380–1387. DOI: 10.1134/S0036024424700377

Информация об авторах

Беспалов Дмитрий Вячеславович – преподаватель, Омский государственный университет имени Ф. М. Достоевского (Омск, Россия), ORCID: 0009-0009-1479-8571, d.v.bespalov@rambler.ru

Голованова Ольга Александровна – доктор геолого-минералогических наук, профессор, заведующий кафедрой, Омский государственный университет имени Ф. М. Достоевского (Омск, Россия), ORCID: 0000-0001-9995-5672, golovanoa2000@mail.ru