

DOI: 10.15643/vnrm-2023-42

## СТРУКТУРА И КОНФОРМАЦИОННАЯ ИЗОМЕРИЯ ХЕЛАТНЫХ ФЕНИЛАЛАНИНАТОВ Cu(II)

*Галимов М.Н., Абдуллина Д.Р., Берестова Т.В.*

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

*e-mail:* [miras200181@gmail.com](mailto:miras200181@gmail.com)

С целью изучения структурных особенностей и конформационного состава, синтезированы хелатные бис-фенилаланинаты Cu(II): [Cu(*S,S*-phe)<sub>2</sub>] и [Cu(*S*-phe)(*R*-phe)]. Оказалось, что вовлечение в реакцию комплексообразования оптически активного, или в виде рацемической смеси, фенилаланина существенным образом влияет на конформационный состав образующихся соединений [1].

Известно, что при образовании разнолигандных аминокислотных комплексов переходных металлов, ионы металла связываются с лигандами путём N,O-хелатирования, образуя два пятичленных цикла [2-4].

С помощью различных физико-химических методов анализа – рентгенофазового анализа, ИК спектроскопии МНПВО, а также квантово-химического моделирования, было установлено, что на конформационный состав образующихся соединений, помимо абсолютной конфигурации хирального центра аминокислот, существенно влияет пространственное расположение лиганда, и положение заместителя – R в лиганде. Было выявлено, что для бис-фенилаланинатов Cu(II) реализуется конформационная изомерия хелатных колец, проявляющаяся в виде конформаций «ванна» и «кресло».

Установлены закономерности в реализации структуры комплексов Cu(II) с фенилаланином в зависимости от абсолютной конфигурации хирального центра лиганда; а также закономерности в появлении конформации «ванна» или «кресло». Такая реализация структуры может быть связана с тремя факторами, возникающими у оптически активного атома углерода: тетраэдрической геометрией, абсолютной конфигурацией хирального центра (*R,S*), а также с пространственным расположением лигандов в пространстве.

### Литература

1. Berestova T.V. et al. Influence of the absolute configuration of the ligand's chiral center on the structure of planar-square phenyl-containing bis-(N, O) copper (II) chelates //Journal of Molecular Structure. 2021. T. 1236. C. 130303.
2. Berestova T.V., Kuzina L.G., Amineva N.A., Faizrakhmanov I. S., Massalimov I. A., Mustafin A.G. // J. Mol. Struct. 2017. 1137. P. 260-266.
3. Berestova T.V., Khursan S.L., Mustafin A.G. // Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular. 2020. V.229. 117950.
4. Berestova T.V., Gizatov R.R., Galimov M.N., Mustafin A.G. // J. Mol. Struct. 1236. 2021. 130303