**Конформационные изомеры хелатных бис-фенилаланинатов Cu(II)**

***Галимов М.Н.***

*Студент, 4 курс бакалавриата*

*Уфимский университет науки и технологий,*

*химический факультет, г. Уфа, Россия*

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

Хелатные фенилаланинсодержащие N,O-комплексы Cu(II)обладают высокой биологической значимостью и применяются в разработке медицинских и лекарственных препаратов, т.к. играют ключевую роль в биохимических реакциях, протекающих в организме. Важным аспектом прогнозирования биологической активности подобных комплексных соединений является установление их структуры и исследование конформационного состава различными физико-химическими методами анализа [1-3].

Помимо *цис-* и *транс-*изомерии, для бис-хелатных фенилаланинсодержащих N,O-комплексов Cu(II)характерна структурная конформационная изомерия заместителя при хиральном центре, обусловленная различной ориентацией лигандов в пространстве и относительно друг друга, благодаря разнообразному строению, структуре и физико-химическим свойствам (рис.1).

|  |  |
| --- | --- |
|  |  |
| Рис.1. Структура и теоретические ИК спектры бис-фенилаланинатов в области 1120-1020 см-1 для конформеров *ta1(S)-te1(S)* "кресло" and *ta1(R)-te1(S)* "ванна" | |

Методом квантово-химического моделирования (метод M06/6-311+G(d)) установлено, что наиболее энергетически выгодными для фенилаланинсодержащих бис-хелатов Cu(II) являются *транс-*изомеры. При этом, диастереомеры *транс-*[Cu(*S*-phe)2] (**1**) и *транс*-[Cu(*S*-phe)(*R*-phe)] (**2**) имеют существенные различия в области характеристических полос поглощения для частот *ν*as,s(C=O), *ν*as,s(C-O), δ(CH,CH2)+δ(NH2)+*ν*(CN), что позволяет интерпретировать их в ИК спектрах (рис.1).

Показано, что для комплекса **1** реализуется конформер *ta1(S)-te1(S)*(структура«кресло»), а для комплекса **2** конформеры *ta1(S)-tа1(R)*, *ta1(S)-te1(R)*(структура«ванна») [2].

**Литература**

1. Berestova T.V., Khursan S.L., Mustafin A.G. Experimental and theoretical substantiation of differences of geometric isomers of copper(II) α-amino acid chelates in ATR-FTIR spectra // J. Spectrochim. Acta, Part A. 2020. Vol. 229. 117950.

2. Berestova T.V., Gizatov R.R., Galimov M.N., Mustafin A.G. 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 // J. Mol. Struct. 2021. 1236. 130303.

3. Zilberg R.A., Berestova T.V., Gizatov R.R., Teres Y.B., Galimov M.N., Bulysheva E.O. Chiral Selectors in Voltammetric Sensors Based on Mixed Phenylalanine/Alanine Cu(II) and Zn(II) Complexes // Inorganics. 2022. 10(8). P. 117