

УДК 546.212:546.47

https://doi.org/10.33619/2414-2948/103/01

**СТРОЕНИЕ КРИСТАЛЛОВ КОМПЛЕКСНОГО СОЕДИНЕНИЯ
ХЛОРИДА МАРГАНЦА С ТРЕОНИНОМ ПОЛУЧЕННЫХ
МЕТОДОМ МЕДЛЕННОГО ВЫПАРИВАНИЯ**

©*Абдуллаева Ж. Д.*, ORCID: 0000-0001-5777-4478, SPIN-код: 1815-7416, канд. хим. наук,
Ошский государственный университет, г. Ош, Кыргызстан, jypar.science@oshsu.kg
©*Джумаева Ж. Ш.*, Ошский государственный университет, г. Ош, Кыргызстан

**STRUCTURE OF MANGANESE CHLORIDE AND THREONINE CRYSTALS FORMED
BY SLOW VAPORIZATION METHOD**

©*Abdullaeva Zh.*, ORCID: 0000-0001-5777-4478, SPIN-code: 1815-7416, Ph.D.,
Osh State University, Osh, Kyrgyzstan, jypar.science@oshsu.kg
©*Dzhumaeva Zh.*, Osh State University, Osh, Kyrgyzstan

Аннотация. Кристаллы комплексных соединений применяются в технике, оптике, медицине, фармации, в обработке поверхностей и т. д. Изучение кристаллической структуры комплексных соединений важно, поскольку они широко используются в промышленности и обладают механическими, термическими и рядом других ценных свойств. Проведено изучение кристаллической структуры комплексного соединения хлорида марганца с аминокислотой треонин, а также изучение физико-химических и биологических свойств. Для синтеза комплексного соединения был применен метод медленного выпаривания. Состав образованных кристаллов соединения был проанализирован рентген дифракционным и спектроскопическими структурными анализами. Исследована структура комплексного соединения $MnCl_2 \times C_4H_9NO_3$ хлорида марганца и аминокислоты треонин. В результате исследования было установлено что кристаллическая структура соединения $MnCl_2 \times C_4H_9NO_3$ относится к орторомбической сингонии с пространственной симметрией $P2_12_12_1$.

Abstract. Crystals of complex compounds are used in technology, optics, medicine, pharmacy, surface treatment, etc. The study of the crystal structure of complex compounds is important because they are widely used in industry and exhibit mechanical, thermal and a number of other valuable properties. Study of the crystal structure of complex compound of manganese chloride with the amino acid threonine, as well as the study of its physicochemical and biological properties. For the synthesis of complex compound, the method of slow evaporation was used. The composition of the formed crystals of the compound was analyzed by X-ray diffraction and spectroscopic structural analyses. the structure of the complex compound $MnCl_2 \times C_4H_9NO_3$ manganese chloride and the amino acid threonine was studied. As a result of the study, it was established that the crystal structure of the compound $MnCl_2 \times C_4H_9NO_3$ belongs to the orthorhombic system with space symmetry $P2_12_12_1$.

Ключевые слова: хлорид марганца (II) четырехводный, треонин, медленное выпаривание, ИК-спектр, кристаллическая структура.

Keywords: manganese chloride (II) tetrahydrate, threonine, slow vaporization, IR spectra, crystal structure.

Биологическое значение хлорид марганца $MnCl_2 \times 4H_2O$ широко изучается в медицине на предмет его влияния на биологическую активность [1, 2] в качестве нейронального контрастного агента для усиленной магнитно-резонансной томографии а также в исследованиях координационной химии [3, 4]. Контрастные вещества на основе хлорида марганца применяются при магнитно-резонансной томографии (МРТ) для лечения пациентов с очаговыми поражениями печени и тяжелыми нарушениями функции почек из-за его эффективного положительного усиления контраста [5].

Марганец в хелатированной форме малотоксичен и широко используется в качестве контрастного вещества в клинике, инъекционным контрастным веществом $Mn(II)$ является дипиридоксальдифосфат марганца (II) ($Mn-DPDP$) для визуализации печени [6].

В условиях периодической культуры на жидкой питательной среде добавление в последнюю хлорида марганца (II) ведет к изменениям расщепления четырех белков-субстратов «нейтральными» протеиназами мицелия и культуральной жидкости *P. ostreatus* [7].

L-треонин, протеиногенная α -аминокислота, включена во все белки, усиливает рост тканей, улучшает энергетический обмен в мышечных клетках и активирует иммунную систему. L-треонин — незаменимая кислота для человека и животных. Его суточная норма, рекомендованная Всемирной организацией здравоохранения (ВОЗ), составляет 15 мг для человека на кг веса. Треонин является жизненно важным компонентом белков и ферментов, играя решающую роль в синтезе белка в организме. В фармацевтике он может входить в состав препаратов, направленных на обеспечение специфических аминокислотных профилей для пациентов с определенными заболеваниями или тех, кто находится в процессе выздоровления. Треонин является важной биоактивной молекулой, которая оказывает жизненно важное посредническое воздействие на синтез белка, энергетический обмен и усвоение питательных веществ. Многие предыдущие исследования были сосредоточены на потребностях, физиологических функциях и путях метаболизма Thr. Сообщалось, что соответствующие уровни Thr в рационе могут способствовать росту животных, усиливать иммунную функцию и поддерживать здоровье кишечника (<https://kurl.ru/euGlv>).

Материалы и методы исследования

Комплексное соединение $MnCl_2 \times C_4H_9NO_3$ хлорида марганца с аминокислотой треонин было получено методом медленного выпаривания. ИК-спектроскопией определены основные колебательные частоты комплексного соединения. Изучено расположение кристаллических плоскостей и установлена структура монокристаллов комплексного соединения $MnCl_2 \times C_4H_9NO_3$ хлорида марганца с треонином.

Результаты и обсуждение

Состав полученных комплексных соединений идентифицирован рентген дифракционным и ИК-спектроскопическим анализами. Пространственные изомеры хлорида марганца (II) тетрагидрата $[MnCl_2(H_2O)_4]$ показаны на Рисунке 1.

В ИК-спектре сформированного комплексного соединения $MnCl_2 \times C_4H_9NO_3$ пики при 3212, 3220, 2931 cm^{-1} в длинноволновой области соответствуют валентному колебанию аминогруппы. Полоса поглощения валентного колебания карбоксильной группы ($\nu_{as}COO^-$) сдвинута на 60 cm^{-1} , т. е. смещается от 1620 cm^{-1} до 1585 cm^{-1} и 1617 cm^{-1} в область более

низких частот, что подтверждает образование комплекса через атом кислорода карбоксильной группы.

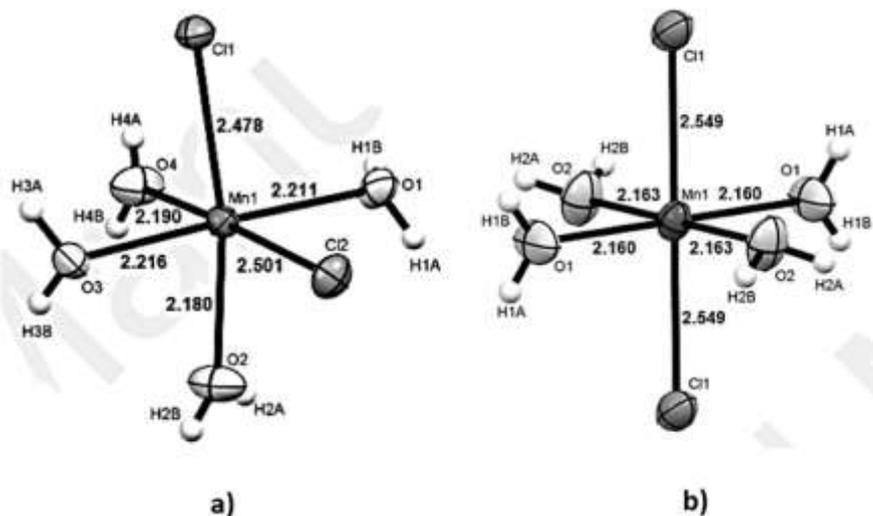


Рисунок 1. Транс- и цис- комплексы хлорида марганца тетрагидрата $[\text{MnCl}_2(\text{H}_2\text{O})_4]$ в а) α -, cis- $[\text{MnCl}_2(\text{H}_2\text{O})_4]$ и б) β -, trans- $[\text{MnCl}_2(\text{H}_2\text{O})_4]$ формах

Колебательные частоты ИК-спектроскопии комплексного соединения хлорида марганца с треонином $\text{MnCl}_2 \times \text{C}_4\text{H}_9\text{NO}_3$ даны в Таблице.

Таблица
 ОСНОВНЫЕ КОЛЕБАТЕЛЬНЫЕ ЧАСТОТЫ ИК-СПЕКТРА КОМПЛЕКСНОГО СОЕДИНЕНИЯ
 ХЛОРИДА МАРГАНЦА С ТРЕОНИНОМ $\text{MnCl}_2 \times \text{C}_4\text{H}_9\text{NO}_3$ (cm^{-1})

| Отнесение | $\text{C}_4\text{H}_9\text{NO}_3$ | $\text{MnCl}_2 \times \text{C}_4\text{H}_9\text{NO}_3$ |
|-----------------------------------|-----------------------------------|--|
| $\nu_{\text{as}}(\text{NH}_2)$ | — | 2931,42 |
| $\nu_{\text{s}}(\text{NH}_2)$ | 2974,51 | 2595,34 |
| $\nu_{\text{as}}(\text{COO}^-)$ | 1620,11 | 1585,64 |
| $\nu_{\text{s}}(\text{COO}^-)$ | 1413,29 | 1394,64 |
| $\delta_{\text{as}}(\text{NH}_2)$ | — | 1028,3 |
| $\delta_{\text{s}}(\text{NH}_2)$ | 1028,37 | 715,26 |

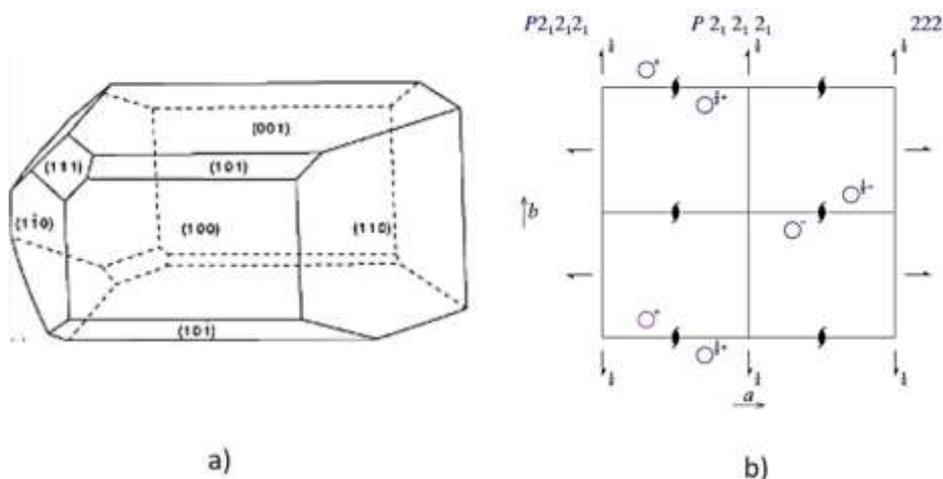


Рисунок 2. а) Расположение кристаллических плоскостей комплексного соединения $\text{MnCl}_2 \times \text{C}_4\text{H}_9\text{NO}_3$; б) Установлено, что структура монокристаллов комплексного соединения

$MnCl_2 \times C_4H_9NO_3$ хлорида марганца с треонином относится к орторомбической сингонии с пространственной симметрией $P2_12_12_1$.

Выводы

Были определены пики поглощения спектров формированного комплексного соединения $MnCl_2 \times C_4H_9NO_3$.

Изучено расположение кристаллических плоскостей и установлена структура монокристаллов комплексного соединения $MnCl_2 \times C_4H_9NO_3$ хлорида марганца с треонином которая относится к орторомбической сингонии с пространственной симметрией $P2_12_12_1$.

Список литературы:

1. Zhao F., Cai T., Liu M., Zheng G., Luo W., Chen J. Manganese induces dopaminergic neurodegeneration via microglial activation in a rat model of manganism // *Toxicological sciences*. 2009. V. 107. №1. P. 156-164. <https://doi.org/10.1093/toxsci/kfn213>
2. Martinek P., Kula E., Hedbávný J. Reactions of *Melolontha hippocastani* adults to high manganese content in food // *Ecotoxicology and environmental safety*. 2018. V. 148. P. 37-43. <https://doi.org/10.1016/j.ecoenv.2017.10.020>
3. Grünecker B., Kaltwasser S. F., Peterse Y., Sämann P. G., Schmidt M. V., Wotjak C. T., Czisch M. Fractionated manganese injections: effects on MRI contrast enhancement and physiological measures in C57BL/6 mice // *NMR in Biomedicine*. 2010. V. 23. №8. P. 913-921. <https://doi.org/10.1002/nbm.1508>
4. Bouteiller H., Pasturel M., Lemoine P. On the Crystal Structures of the Polymorphs of Manganese (II) Chloride Tetrahydrate: α - $MnCl_2 \times 4H_2O$ and β - $MnCl_2 \times 4H_2O$ // *Journal of Chemical Crystallography*. 2021. V. 51. P. 311-316. <https://doi.org/10.1007/s10870-020-00856-z>
5. Bernardino M. E., Weinreb J. C., Mitchell D. G., Small W. C., Morris M. Safety and optimum concentration of a manganese chloride-based oral MR contrast agent // *Journal of Magnetic Resonance Imaging*. 1994. V. 4. №6. P. 872-876. <https://doi.org/10.1002/jmri.1880040620>
6. Pan D., Schmieder A. H., Wickline S. A., Lanza G. M. Manganese-based MRI contrast agents: past, present, and future // *Tetrahedron*. 2011. V. 67. №44. P. 8431-8444. <https://doi.org/10.1016/j.tet.2011.07.076>
7. Жук О. Н., Ильючик И. А., Кульгавеня А. Д., Никандров В. Н. Влияние хлорида марганца (II) на протеолитическую активность гриба вешенка обыкновенная (*Pleurotus ostreatus*) при глубинном культивировании // *Вестник Полесского государственного университета. Серия природоведческих наук*. 2017. №2. С. 62-68.

References:

1. Zhao, F., Cai, T., Liu, M., Zheng, G., Luo, W., & Chen, J. (2009). Manganese induces dopaminergic neurodegeneration via microglial activation in a rat model of manganism. *Toxicological sciences*, 107(1), 156-164. <https://doi.org/10.1093/toxsci/kfn213>
2. Martinek, P., Kula, E., & Hedbávný, J. (2018). Reactions of *Melolontha hippocastani* adults to high manganese content in food. *Ecotoxicology and environmental safety*, 148, 37-43. <https://doi.org/10.1016/j.ecoenv.2017.10.020>
3. Grünecker, B., Kaltwasser, S. F., Peterse, Y., Sämann, P. G., Schmidt, M. V., Wotjak, C. T., & Czisch, M. (2010). Fractionated manganese injections: effects on MRI contrast enhancement and physiological measures in C57BL/6 mice. *NMR in Biomedicine*, 23(8), 913-921. <https://doi.org/10.1002/nbm.1508>

4. Bouteiller, H., Pasturel, M., & Lemoine, P. (2021). On the Crystal Structures of the Polymorphs of Manganese (II) Chloride Tetrahydrate: α - $\text{MnCl}_2 \times 4\text{H}_2\text{O}$ and β - $\text{MnCl}_2 \times 4\text{H}_2\text{O}$. *Journal of Chemical Crystallography*, 51, 311-316. <https://doi.org/10.1007/s10870-020-00856-z>

5. Bernardino, M. E., Weinreb, J. C., Mitchell, D. G., Small, W. C., & Morris, M. (1994). Safety and optimum concentration of a manganese chloride-based oral MR contrast agent. *Journal of Magnetic Resonance Imaging*, 4(6), 872-876. <https://doi.org/10.1002/jmri.1880040620>

6. Pan, D., Schmieder, A. H., Wickline, S. A., & Lanza, G. M. (2011). Manganese-based MRI contrast agents: past, present, and future. *Tetrahedron*, 67(44), 8431-8444. <https://doi.org/10.1016/j.tet.2011.07.076>

7. Zhuk, O. N., Il'yuchik, I. A., Kul'gavenya, A. D., & Nikandrov, V. N. (2017). Vliyanie khlorida margantsa (II) na proteoliticheskuyu aktivnost' griba veshenka obyknovennaya (Pleurotus ostreatus) pri glubinnom kul'tivirovanii. *Vestnik Polesskogo gosudarstvennogo universiteta. Seriya prirodovedcheskikh nauk*, (2), 62-68. (in Russian).

Работа поступила
в редакцию 05.05.2024 г.

Принята к публикации
11.05.2024 г.

Ссылка для цитирования:

Абдуллаева Ж. Д., Джумаева Ж. Ш. Структура кристаллов комплексного соединения хлорида марганца с треонином, полученных методом медленного выпаривания // Бюллетень науки и практики. 2024. Т. 10. №6. С. 15-19. <https://doi.org/10.33619/2414-2948/103/01>

Cite as (APA):

Abdullaeva, Zh., & Dzhumayeva, Zh. (2024). Structure of Manganese Chloride and Threonine Crystals Formed by Slow Vaporization Method. *Bulletin of Science and Practice*, 10(6), 15-19. (in Russian). <https://doi.org/10.33619/2414-2948/103/01>