

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНОЙ КОНФИГУРАЦИИ
МОЛЕКУЛЯРНОЙ СИСТЕМЫ «НАНОЧАСТИЦЫ СИЛИКАТА
МАРГАНЦА-НЕЗАМЕНИМАЯ АМИНОКИСЛОТА»**

А.А. Блинова¹, Е.С. Кастрнова², М.А. Пирогов¹, Е.С. Кузнецов³, П.С. Леонтьев¹,
Д.Д. Филиппов¹

¹ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

355017, Россия, Ставрополь, ул. Пушкина, 1

²ФГБОУ ВО «Ставропольский государственный аграрный университет»

355035, Россия, Ставрополь, пер. Зоотехнический, 12

³ФГБОУ ВО «Ставропольский государственный медицинский университет»

355017, Россия, Ставрополь, ул. Мира, 310

nastya_bogdanova_88@mail.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.940

Аннотация: В данном исследовании с помощью квантово-химического моделирования было проведено определение оптимальной конфигурации молекулярной системы «наночастицы силиката марганца - незаменимая аминокислота». Для начала проводилось квантово-химическое моделирование отдельных молекул силиката марганца и незаменимых аминокислот, после проводилось моделирование молекулярных систем «наночастицы силиката марганца-незаменимые аминокислоты», в которых атом кислорода, присоединённый к атому кремния в силикате марганца, соединялся с ионизированной аминогруппой аминокислоты. В результате установлено, что молекулярные системы «наночастицы силиката марганца-незаменимые аминокислоты» являются энергетически выгодными и химически стабильными. На основе полученных данных можно сделать вывод, что оптимальной конфигурацией данных молекулярных систем является взаимодействие силиката марганца с лизином через ионизированную α -аминогруппу лизина. Данная молекулярная система обладает наибольшими значениями разницы полной энергии ($\Delta E = 73,268$ ккал/моль) и химической жёсткости ($\eta = 0,144$ эВ), которые являются показателями энергетической выгоды и химической стабильности молекулярной системы. После путём смешивания ацетата марганца, L-лизина и силиката натрия были получены наночастицы силиката марганца, стабилизированные L-лизином.

Ключевые слова: наночастицы силиката марганца, незаменимые аминокислоты, квантово-химическое моделирование, лизин, ИК-спектроскопия.

1. Введение

За всю историю развития медицины для изготовления имплантатов использовалось множество материалов [1, 2]. Так, широкую популярность в качестве имплантов при лечении полного или частичного зубочелюстного аппарата приобрел гидроксиапатит [3]. Гидроксиапатит является одной из популярных структур благодаря высокой биосовместимости, однако его низкая стабильность ограничивает его применение [4]. Для увеличения стабильности и биосовместимости гидроксиапатита прибегают к легированию наночастицами металлов. В роли металлов, используемых для легирования, могут выступать различные металлические наночастицы, в том числе марганца, серебра,

магния, кобальта и цинка [5]. Анализируя существующие данные, становится возможным сделать вывод о том, что легирование гидроксиапатита наночастицами металлов позволяет улучшить показатели механической стабильности, биосовместимости, остеоиндуктивности, целостности костной ткани, антибактериальных свойств и других характеристик, что способствует расширению возможностей их применения [6].

В случае использования наночастиц марганца в костной имплантации, можно увеличить биосовместимость и приживаемость протеза, не оказывая токсического действия на организм [7, 8]. Также использование наночастиц марганца не создает помехи при проведении процедуры МРТ [9]. Таким образом, исследование различных форм наночастиц марганца способствует созданию биосовместимых имплантов для их применения в современной медицине, что в свою очередь открывает возможность создания новых методик лечения пациентов с различными видами поражения костных тканей [10]. Так, можно сделать вывод о том, что наночастицы марганца являются перспективным материалом для использования в качестве покрытия для биосовместимых имплантатов [11]. Одним из способов изучения разнообразных соединений наночастиц металлов, в том числе и наночастиц марганца, является компьютерное моделирование [12]. Методы компьютерного моделирования позволяют проводить эксперименты с использованием нейросетей, что в свою очередь позволяет значительно сэкономить ресурсы, задействованные в ходе исследования [13]. Так, в работе [14] было проведено исследование влияния наночастиц марганца на растения *Vigna radiata*, в рамках которого рассмотрено токсическое влияние марганца на *Vigna radiata* и проведено моделирование взаимодействия наночастиц марганца с органическими соединениями, входящими в состав данного растения. По результатам исследования был сделан вывод, о том марганец не оказывает токсического влияния на растения *Vigna radiata*.

Таким образом, целью данной работы является определение оптимальной конфигурации молекулярной системы наночастиц силиката марганца с незаменимыми аминокислотами.

2. Экспериментальная часть

Определение оптимальной конфигурации молекулярной системы наночастиц силиката марганца с незаменимыми аминокислотами проводилось с помощью квантово-химического моделирования, в рамках которого с помощью программного обеспечения QChem [15] рассчитывались полная энергия молекулярного комплекса E , энергия высшей заселённой молекулярной орбитали E_{HOMO} , энергия низшей

свободной молекулярной орбитали E_{LUMO} . Расчет проводился при следующих параметрах – метод: HF, базис: 6-31G, convergence – 5, силовое поле – Gchemical. Расчет осуществлялся на оборудовании центра обработки данных (Schneider Electric) ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет». На основе рассчитываемых значений получали разницу суммы полной энергии составляющих элементов молекулярного комплекса – молекулы аминокислоты и силиката марганца, и полной энергии системы «наночастицы силиката марганца-аминокислота» ΔE , а химическую жёсткость молекулярной системы η , рассчитываемые как:

$$\Delta E = E_0 + E_{MnSiO_3} + E_1, \quad (1)$$

где E_0 – полная энергия аминокислоты, E_1 – полная энергия молекулярного комплекса «наночастица силиката марганца-незаменимая аминокислота»;

$$\eta = (E_{LUMO} - E_{HOMO}) / 2. \quad (2)$$

Для определения оптимальной конфигурации молекулярной системы силиката марганца с незаменимыми аминокислотами на первом этапе проводилось квантово-химическое моделирование молекулы силиката марганца и молекул незаменимых аминокислот: *L*-валин (Val), *L*-лейцин (Leu), *L*-изолейцин (Ile), *L*-метионин (Met), *L*-треонин (Tre), *L*-лизин (Lys), *L*-фенилаланин (Phe), *L*-триптофан (Trp). После проводилось моделирование взаимодействие силиката марганца с незаменимыми аминокислотами. На основе предыдущих исследований моделирование проводилось путём взаимодействия атома кислорода, присоединённого к атому кремния силиката марганца, с ионизированной аминогруппой аминокислоты [16].

Синтез наночастиц силиката марганца, стабилизованных незаменимыми аминокислотами, проводился с использованием ацетата марганца в качестве прекурсора и силиката натрия в качестве осадителя. На первом этапе получали растворы ацетата марганца и силиката натрия с концентрацией 0,8 М, после в раствор силиката натрия добавляли аминокислоту с массовой долей $\omega = 0,27\%$, перемешивали в течение 10 минут при скорости 750 об/мин. На втором этапе полученные суспензии отмывали с помощью метода центрифугирования при скорости 2000 об/мин. Отмытые осадки высушивали в сушильном шкафу при температуре 80°C. Также получали образец наночастиц силиката марганца без добавления незаменимых аминокислот.

Для изучения колебаний связей функциональных групп, образцы исследовали методом инфракрасной спектроскопии с помощью ИК-спектрометра ФСМ-1201 с преобразованием Фурье.

3. Обсуждение результатов

Результаты квантово-химического моделирования силиката марганца и незаменимых аминокислот представлены в Таблице 1.

Таблица 1. Результаты квантово-химического моделирования силиката марганца и незаменимых аминокислот.

Молекулярная система	E , ккал/моль	E_{HOMO} , эВ	E_{LUMO} , эВ	η , эВ
$MnSiO_3$	-1658,876	-0,339	0,047	0,193
Val	-402,112	-0,249	0,016	0,133
Leu	-441,397	-0,260	0,006	0,133
Ile	-441,394	-0,247	0,018	0,133
Met	-800,251	-0,232	0,006	0,119
Tre	-438,015	-0,248	0,006	0,127
Lys	-496,481	-0,177	-0,024	0,077
Phe	-554,424	-0,240	0,002	0,121
Trp	-685,684	-0,195	-0,035	0,080

Результаты квантово-химического моделирования взаимодействия наночастиц силиката марганца с незаменимыми аминокислотами представлены в Таблице 2.

Таблица 2. Результаты квантово-химического моделирования взаимодействия наночастиц силиката марганца с незаменимыми аминокислотами.

Молекулярная система «наночастица силиката марганца-незаменимая аминокислота»	Взаимодействие селена через ионизированную α -аминогруппу незаменимой аминокислоты	E , ккал/моль	ΔE , ккал/моль	E_{HOMO} , эВ	E_{LUMO} , эВ	η , эВ
$MnSiO_3$ -Val	валина	-2133,361	72,373	-0,204	0,051	0,128
$MnSiO_3$ -Leu	лейцина	-2173,457	73,184	-0,197	0,049	0,123
$MnSiO_3$ -Ile	изолейцина	-2173,044	72,774	-0,221	0,061	0,141
$MnSiO_3$ -Met	метионина	-2531,945	72,818	-0,216	0,061	0,139
$MnSiO_3$ -Tre	треонина	-2169,159	72,268	-0,201	0,050	0,126
$MnSiO_3$ -Lys	лизина	-2228,061	73,268	-0,238	0,049	0,144
$MnSiO_3$ -Lys	лизина	-2228,351	72,994	-0,207	0,078	0,143
$MnSiO_3$ -Phe	фенилаланина	-2285,494	72,194	-0,218	0,051	0,135
$MnSiO_3$ -Trp	триптофана	-2416,484	71,924	-0,214	0,071	0,143
	в индольном кольце триптофана	-2416,083	71,523	-0,201	0,041	0,121

Исходя из анализа полученных данных установлено, что молекулярная система «наночастица силиката марганца-незаменимая аминокислота» обладает значением полной энергии большим, чем сумма полной энергии отдельных молекул аминокислоты и силиката марганца ($\Delta E > 71$ ккал/моль), что свидетельствует о высокой энергетической

выгоде взаимодействия данных соединений. Также установлено, что химическая жёсткость молекулярных систем «наночастица силиката марганца-незаменимая аминокислота» находится в диапазоне от 0,121 эВ до 0,144 эВ, что в случае взаимодействия с *L*-изолейцином, *L*-метионином, *L*-лизином, *L*-фенилаланином и *L*-триптофаном превосходит значения химической жёсткости молекул аминокислот, что в свою очередь свидетельствует о повышении химической стабильности молекул при взаимодействии с силикатом марганца.

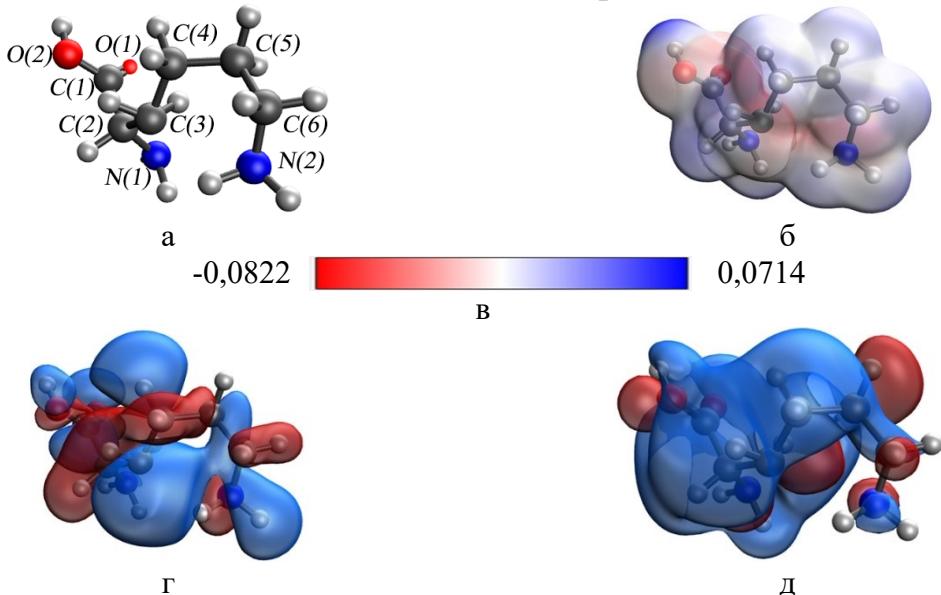


Рис. 1. Результаты квантово-химического моделирования молекулы лизина: а – модель молекулярного комплекса; б – распределение электронной плотности; в – градиент распределения электронной плотности (эВ); г – высшая заселённая молекулярная орбиталь; д – низшая свободная молекулярная орбиталь.

На основе полученных данных, можно сделать вывод, что оптимальной конфигурацией молекулярной системы «наночастицы силиката марганца-незаменимая аминокислота» является взаимодействие $MnSiO_3$ с лизином через ионизированную α -аминогруппу лизина. Данная молекулярная система является наиболее энергетически выгодной ($\Delta E = 73,268$ ккал/моль), и химически стабильной ($\eta = 0,144$ эВ). На рис. 1, 2 представлены квантово-химические модели лизина и молекулярной системы « $MnSiO_3$ -Lys».

На основе полученных моделей распределения электронной плотности и молекулярных орбиталей можно сделать вывод, что при взаимодействии лизина с силикатом марганца происходит смещение электронной плотности в отрицательную область, а также происходит формирование новых молекулярных орбиталей, что свидетельствует об образовании взаимодействия между молекулами лизина и силиката марганца.

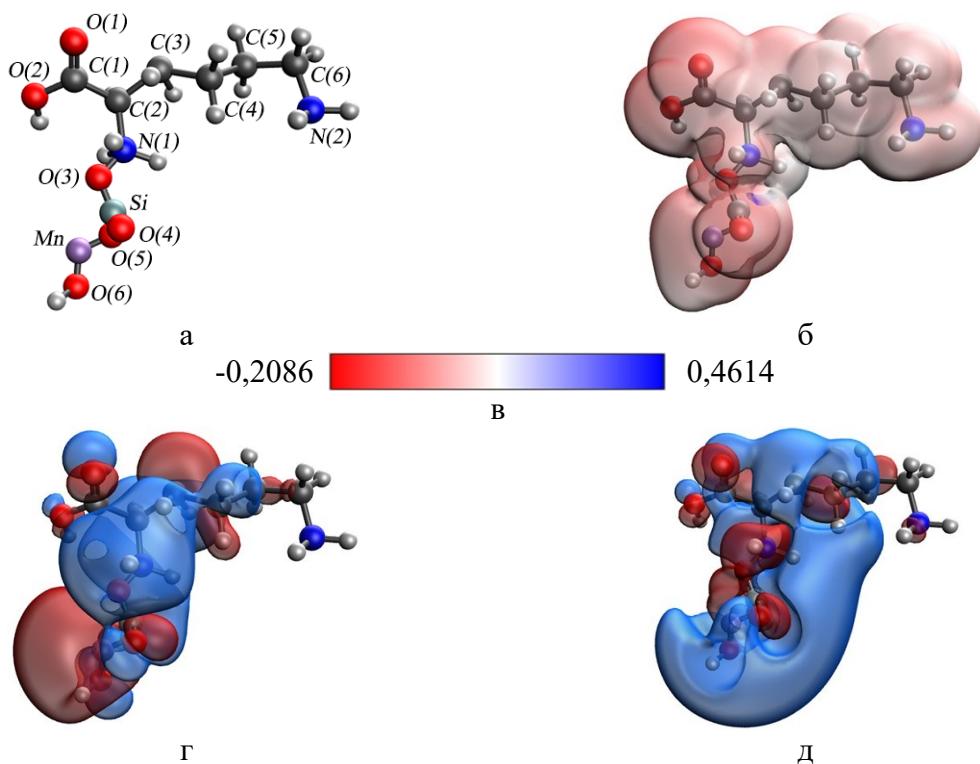


Рис. 2. Результаты квантово-химического моделирования молекулярной системы « $MnSiO_3$ -Лиз», в которой взаимодействие силиката марганца с лизином происходит через ионизированную α -аминогруппу лизина: а – модель молекулярного комплекса; б – распределение электронной плотности; в – градиент распределения электронной плотности (эВ); г – высшая заселённая молекулярная орбиталь; д – низшая свободная молекулярная орбиталь.

ИК-спектры наночастиц силиката марганца, стабилизированных *L*-лизином, *L*-лизина и наночастиц силиката марганца без добавления незаменимых аминокислот представлен на рис. 3.

Анализ ИК-спектра силиката марганца показал, что полоса на 617 cm^{-1} соответствует колебаниям связи $Mn-O$, а полоса на 1023 cm^{-1} – $Mn-O-Si$. Область от 929 до 1080 cm^{-1} соответствует асимметричным колебаниям связи $O-Si-O$, на 1346 и 1415 cm^{-1} – связь $Si-O-Si$. Полоса от 1485 до 1643 cm^{-1} соответствует колебаниям связи $Si-O$. ИК-спектр *L*-лизина представляет собой полосы, характерные для данной аминокислоты: на 550 и 590 cm^{-1} – колебание связи $-CH_2$, на 660 cm^{-1} – связи $-OH$, от 766 до 907 cm^{-1} и от 1411 до 1498 cm^{-1} – связи $-CH_3$, на 1053 и 1101 cm^{-1} – связи $-C-C-$, на 1130 cm^{-1} – ионизированной карбоксильной группы COO^- , в области от 1289 до 1340 cm^{-1} – валентными колебаниями связи $-C-N$. На участке от 1537 до 1654 cm^{-1} наблюдается полоса, характерная для колебаний ионизированной аминогруппы NH^{3+} . Анализ ИК-спектра наночастиц силиката марганца, стабилизированных *L*-лизином показал, что в соединении присутствуют связи, характерные для силиката маргния, а также, что в диапазоне от 1485 до 1654 наблюдается

падение интенсивности полосы, которая характерна для колебаний ионизированной аминогруппы *L*-лизина и связи *Si*–*O* силиката марганца. Падение интенсивности поглощения в данном диапазоне свидетельствует о формировании взаимодействия между кислородом, присоединённым к атому кремния силиката марганца, и ионизированной аминогруппой *L*-лизина, что согласуется с данными [17].

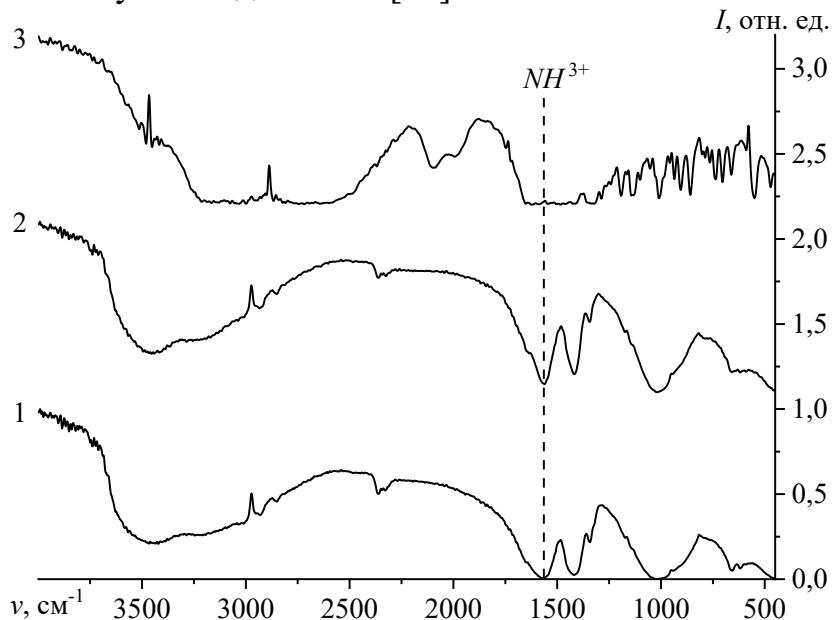


Рис. 3. ИК-спектры: 1 – наночастиц силиката марганца; 2 – наночастиц силиката марганца, стабилизованных *L*-лизином; 3 – *L*-лизина.

4. Заключение

В результате данной работы с помощью квантово-химического моделирования определена оптимальная конфигурация молекулярной системы «наночастицы силиката марганца-незаменимая аминокислота». Установлено, что взаимодействие силиката марганца с аминокислотами является энергетически выгодным и химически стабильным, а также, что оптимальной конфигурацией является молекулярная система « $MnSiO_3$ –Lys», в которой взаимодействие силиката марганца с лизином происходит через ионизированную α -аминогруппу лизина. С помощью ИК-спектроскопии были подтверждены результаты квантово-химического моделирования, а также доказано формирование взаимодействие силиката марганца с незаменимыми аминокислотами через кислород, присоединённый к атому кремния в силикате марганца, и ионизированную аминогруппу аминокислоты.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Совета по грантам Президента РФ (проект СП-476.2022.4) и в рамках программы поддержки развития научных коллективов Ставропольского государственного аграрного университета (Программа стратегического академического лидерства «Приоритет – 2030»).

Библиографический список:

1. **Макарова, В.Н.** История медицины: актуальные проблемы и перспективы изучения / В. Н. Макарова, Е. К. Склярова // Наука и общество – 2019: Материалы международной научной конференции, Ростов-на-Дону, 26 апреля 2019; под ред. Н.Б. Осипян и др., 2019. – М.: Изд-во: Московский университет им. С.Ю. Витте. – С. 317-323.
2. **Савич, В.В.** Дисперсные и нанодисперсные материалы в медицине / В. В. Савич // Конструкции из композиционных материалов. – 2006. – № 4. – С. 114-119.
3. **Фомин, А.А.** Наноструктура покрытий из диоксида титана, модифицированного гидроксиапатитом, на медицинских титановых имплантатах / А.А. Фомин, А.Б. Штейнгаэр, И.В. Родионов и др. // Медицинская техника. – 2013. – № 3 (279). – С. 24-27.
4. **Tosan, F.** Effects of doping metal nanoparticles in hydroxyapatite in Improving the physical and chemical properties of dental implants / F. Tosan, N. Rahnama, D. Sakhai et al. // Nanomedicine Research Journal. – 2021. – Vl. 6. – I. 4. – P. 327-336. DOI: 10.22034/NMRJ.2021.04.002.
5. **Li, Y.** Relationship between the colour change of hydroxyapatite and the trace element manganese / Y. Li, C.P.A.T. Klein, X. Zhang, K. de Groot // Biomaterials. – 1993. – Vol. 14. – I. 13. – P. 969-972. DOI: 10.1016/0142-9612(93)90187-7.
6. **Sobańska, Z.** Applications and biological activity of nanoparticles of manganese and manganese oxides in in vitro and in vivo models / Z. Sobańska, J. Roszak, K. Kowalczyk, M. Stępnik // Nanomaterials. – 2021. – V. 11. – I. 5 – Art. № 1084. 16 p. DOI: 10.3390/nano11051084.
7. **Fujitani, W.** Synthesis of hydroxyapatite containing manganese and its evaluation of biocompatibility / W. Fujitani, Y. Hamada, N. Kawaguchi et al. // Nano Biomedicine. – 2010. – V. 2. – I. 1. – P. 37-46. DOI: 10.11344/nano.2.37.
8. **Mandal, S.** In vitro and in vivo degradability, biocompatibility and antimicrobial characteristics of Cu added iron-manganese alloy / S. Mandal, V. Kishore, M. Bose et al. // Journal of Materials Science & Technology. – 2021. – V. 84. – P. 159-172. DOI: 10.1016/j.jmst.2020.12.029.
9. **Li, B.** Manganese-based layered double hydroxide nanoparticles as a T₁-MRI contrast agent with ultrasensitive pH response and high relaxivity / B. Li, Z. Gu, N. Kurniawan et al. // Advanced Materials. – 2017. – V. 29. – I. 29. – Art. № 1700373. – 8 p. DOI: 10.1002/adma.201700373.
10. **Heiden, M.** Evolution of novel bioresorbable iron–manganese implant surfaces and their degradation behaviors in vitro / M. Heiden, E. Walker, E. Nauman, L. Stanciu // Journal of Biomedical Materials Research Part A. – 2015. – Vol. 103. – I. 1. – P. 185-193. DOI: 10.1002/jbm.a.35155.
11. **Якимов, Л.А.** Биодеградируемые импланты. Становление и развитие. Преимущества и недостатки (обзор литературы) / Л.А. Якимов, Л.Ю. Слиняков, Д.С. Бобров и др. // Кафедра травматологии и ортопедии. – 2017. – №. 1(21). – С. 44-49.
12. **Рыжкова, Д.А.** Роль «магических» ГПУ чисел в устойчивости внутреннего строения нанокластеров Ag₈₉ и Ag₁₅₃ / Д.А. Рыжкова, С.Л. Гафнер, Ю.Я. Гафнер // Физико-химические аспекты изучения кластеров, nanoструктур и наноматериалов. – 2021. – Вып. 13. – С. 593-603. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.593.
13. **Сдобняков, Н.Ю.** Влияние размерного эффекта на закономерности структурообразования в биметаллических наночастицах Au-Co / Н.Ю. Сдобняков, С.С. Богданов, А.Д. Веселов и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, nanoструктур и наноматериалов. – 2021. – Вып. 13. – С. 612-623. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.612.
14. **Pradhan, S.** Photochemical modulation of biosafe manganese nanoparticles on Vigna radiata: a detailed molecular, biochemical, and biophysical study / S. Pradhan, P. Patra, S. Das et al. // Environmental Science & Technology. – 2013. – Vol. 47. – I. 22. – P. 122-131. DOI: 10.1021/es402659t.
15. Q-Chem 6.1 User's Manual. – Режим доступа: <https://manual.q-chem.com/latest/>. – 02.06.2023.
16. **Блинова, А.А.** Компьютерное квантово-химическое моделирование взаимодействия фосфата кальция с аминокислотами / А.А. Блинова, А.В. Блинов, М.А. Пирогов и др. // Физико-химические аспекты изучения кластеров, nanoструктур и наноматериалов. – 2022. – Вып. 14. – С. 352-361. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.352.
17. **Blinova, A.A.** Synthesis and characterization of calcium silicate nanoparticles stabilized with amino acids / A.A. Blinova, A.A. Karamirzoev, A.R. Guseynova et al. // Micromachines. – 2023. – Vol. 14. – I. 2. – Art. № 245, 12 p. DOI: 10.3390/mi14020245.

References:

1. Makarova V.N., Sklyarova E.K. Istoriya meditsiny: aktual'nye problemy i perspektivy izucheniya [History of

- medicine: current problems and prospects for study], *Materialy mezhdunarodnoj nauchnoj konferentsii «Nauka i obshchestvo-2019», Rostov-na-Donu, 26 aprelya 2019* [Proceedings of the international scientific conference «Science and Society-2019», Rostov-on-Don, April 26, 2019], ed. by N.B. Osipyan, Moscow, Moscow Witte University Publ., 2019, pp. 317-323. (In Russian).
2. Savich V.V. Dispersnye i nanodispersnye materialy v meditsine [Dispersed and nanodispersed materials in medicine], *Konstruktsii iz kompozitsionnykh materialov* [Composite structures], 2006, no. 4, pp. 114-119. (In Russian).
3. Fomin A.A., Steinhauer A.B., Rodionov I.V. et al. Nanostructure of composite bioactive titania coatings modified with hydroxyapatite in medical titanium implants, *Biomedical Engineering*, 2013, vol. 47, issue 3, pp. 138-141. DOI: 10.1007/s10527-013-9353-6.
4. Tosan F., Rahnama N., Sakhaei D. et al. Effects of doping metal nanoparticles in hydroxyapatite in Improving the physical and chemical properties of dental implants, *Nanomedicine Research Journal*, 2021, vol. 6, issue 4, pp. 327-336. DOI: 10.22034/NMRJ.2021.04.002.
5. Li Y., Klein C.P.A.T., Zhang X., de Groot K. Relationship between the colour change of hydroxyapatite and the trace element manganese, *Biomaterials*, 1993, vol. 14, issue 13, pp. 969-972. DOI: 10.1016/0142-9612(93)90187-7.
6. Sobańska Z., Roszak J., Kowalczyk K., Stępnik M. Applications and biological activity of nanoparticles of manganese and manganese oxides in in vitro and in vivo models, *Nanomaterials*, 2021, vol. 11, issue 5, art. no. 1084, 16 p. DOI: 10.3390/nano11051084.
7. Fujitani W., Hamada Y., Kawaguchi N. et al. Synthesis of hydroxyapatite containing manganese and its evaluation of biocompatibility, *Nano Biomedicine*, 2010, vol. 2, issue. 1, pp. 37-46. DOI: 10.11344/nano.2.37.
8. Mandal S., Kishore V., Bose M. et al. In vitro and in vivo degradability, biocompatibility and antimicrobial characteristics of Cu added iron-manganese alloy, *Journal of Materials Science & Technology*, 2021, vol. 84, pp. 159-172. DOI: 10.1016/j.jmst.2020.12.029.
9. Li B., Gu Z., Kurniawan N. et al. Manganese-based layered double hydroxide nanoparticles as a T₁-MRI contrast agent with ultrasensitive pH response and high relaxivity, *Advanced Materials*, 2017, vol. 29, issue 29, art. no. 1700373, 8 p. DOI: 10.1002/adma.201700373.
10. Heiden M., Walker E., Nauman E., Stanciu L. Evolution of novel bioresorbable iron–manganese implant surfaces and their degradation behaviors in vitro, *Journal of Biomedical Materials Research Part A*, 2015, vol. 103, issue 1, pp. 185-193. DOI: 10.1002/jbm.a.35155.
11. Yakimov L.A., Slinyakov L.Yu., Bobrov D.S. et al. Biodegradiruemye implanty. Stanovlenie i razvitiye. Preimushchestva i nedostatki (obzor literature) [Biodegradable implants. formation and development. advantages and drawbacks. (review of literature)], *Kafedra travmatologii i ortopedii* [Department of Traumatology and Orthopedics], 2017, no. 1 (21), pp. 44-49. (In Russian).
12. Ryzhkova D.A., Gafner S.L., Gafner Yu.Ya. Rol' «magicheskikh» GPU chisel v ustojchivosti vnutrennego stroeniya nanoklasterov Ag₈₉ i Ag₁₅₃ [Role of «magic» HCP numbers in stability of the internal structure of Ag₈₉ and Ag₁₅₃ nanoclusters], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klastrovo, nanostruktur i nanomaterialov* [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2021, issue 13, pp. 593-603. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.593. (In Russian).
13. Sdobnyakov N.Yu., Bogdanov S.S., Veselov A.D. et al. Vliyanie razmernogo effekta na zakonomernosti strukturoobrazovaniya v bimetallicheskikh nanochastitsakh Au-Co [Influence of the size effect on the regularities of the structure formation in bimetallic Au-Co nanoparticles], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klastrovo, nanostruktur i nanomaterialov* [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2021, issue 13, pp. 612-623. DOI: 10.26456/pcascnn/2021.13.612. (in Russian).
14. Pradhan S., Patra P., Das S. et al. Photochemical modulation of biosafe manganese nanoparticles on Vigna radiata: a detailed molecular, biochemical, and biophysical study, *Environmental Science & Technology*, 2013, vol. 47, issue 22, pp. 122-131. DOI: 10.1021/es402659t.
15. Q-Chem 6.1 User's Manual. Available at:<https://manual.q-chem.com/latest/> (accessed 02.06.2023).
16. Blinova A.A., Blinov A.V., Pirogov M.A. Komp'yuterno kvantovo-khimicheskoe modelirovaniye vzaimodejstviya fosfata kal'tsiya s aminokislotami [Computer quantum chemical modeling of the interaction of calcium phosphate with amino acids], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klastrovo, nanostruktur i nanomaterialov* [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials], 2022, issue 14, pp. 352-361. DOI: 10.26456/pcascnn/2022.14.352. (in Russian).
17. Blinova A.A., Karamirzoev A.A., Guseynova A.R. Synthesis and characterization of calcium silicate nanoparticles stabilized with amino acids, *Micromachines*, 2023, vol. 14, issue 2, art. no 245, 12 p. DOI: 10.3390/mi14020245.

**DETERMINATION OF THE OPTIMAL CONFIGURATION OF THE MOLECULAR
SYSTEM «MANGANESE SILICATE NANOPARTICLES-AN ESSENTIAL AMINO ACID»**

A.A. Blinova¹, E.S. Kastarnova², M.A. Pirogov¹, E.S. Kuznetsov³, P.S. Leontiev¹, D.D. Filippov¹

¹*North-Caucasian Federal University, Stavropol, Russia*

²*Stavropol State Agrarian University, Stavropol, Russia*

³*Stavropol State Medical University, Stavropol, Russia*

DOI: 10.26456/pcascnn/2023.15.940

Abstract: In this study, the optimal configuration of the molecular system «manganese silicate nanoparticles - essential amino acid» was determined using quantum chemical simulation. To begin with, quantum chemical simulation of individual molecules of manganese silicate and essential amino acids was carried out, after which molecular systems «manganese silicate nanoparticles - essential amino acids» were modeled, in which an oxygen atom attached to silicon atom in manganese silicate was combined with an ionized amino group of amino acids. As a result, it was found that the molecular systems «manganese silicate nanoparticles - essential amino acids» are energetically advantageous and chemically stable. Based on the data obtained, it can be concluded that the optimal configuration of these molecular systems is the interaction of manganese silicate with lysine through the ionized α -amino group of lysine. This molecular system has the highest values of the difference in total energy ($\Delta E = 73.268$ kcal/mol) and chemical hardness ($\eta = 0.144$ eV), which are indicators of energy benefits and chemical stability of molecular system. After mixing manganese acetate, *L*-lysine and sodium silicate, manganese silicate nanoparticles stabilized with *L*-lysine were obtained.

Keywords: manganese silicate nanoparticles, essential amino acids, quantum chemical modeling, lysine, IR spectroscopy.

Блинова Анастасия Александровна – к.т.н., доцент кафедры физики и технологии наноструктур и материалов физико-технического факультета ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Кастарнова Елена Сергеевна – к.б.н., научный сотрудник кафедры терапии и фармакологии ФГБОУ ВО «Ставропольский государственный аграрный университет»

Пирогов Максим Александрович – студент 4 курса кафедры физики и технологии наноструктур и материалов физико-технического факультета ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Кузнецов Егор Станиславович – студент 3 курса специалитета педиатрического факультета ФГБОУ ВО «Ставропольский государственный медицинский университет»

Леонтьев Павел Сергеевич – студент 3 курса кафедры физики и технологии наноструктур и материалов физико-технического факультета ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Филиппов Дионис Демокритович – студент 3 курса кафедры физики и технологии наноструктур и материалов физико-технического факультета ФГАОУ ВО «Северо-Кавказский федеральный университет»

Anastasia A. Blinova – Ph. D., Docent, Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, North Caucasus Federal University

Elena S. Kastarnova – Ph. D., Researcher, Department of Therapy and Pharmacology, Stavropol State Agrarian University

Maxim A. Pirogov – 4th year student, Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials of the Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University

Yegor S. Kuznetsov – 3rd year student, Pediatric Faculty, Stavropol State Medical University

Pavel S. Leontiev – 3rd year student, Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials of the Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University

Dionis D. Filippov – 3rd year student, Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials of the Faculty of Physics and Technology, North Caucasus Federal University

Поступила в редакцию/received: 27.07.2023; после рецензирования/revised: 04.09.2023; принятa/accepted: 09.09.2023.