

ИНТЕРПРЕТАЦИЯ ИК-СПЕКТРОВ ХЕЛАТА БИСАЛАНИНАТА ЖЕЛЕЗА(II), ЯВЛЯЮЩИЙСЯ ЭФФЕКТИВНЫМ ПРЕПАРАТОМ ПРИ АНЕМИИ

Абдуллаев Ш.Х

Тургунова Д.С

Андижанский государственный университет

Аннотация: В статье дается информация о гипохромной анемии, препаратов применяемых при ее лечении, бисаланинате железа(II), о его химическом составе, механизмах усваивания, преимуществ от других лекарств. Также рассматривается интерпретация молекулы хелата бисаланината и его колебательных спектров, сопоставляя теоретические и экспериментально-вычисленные данные.

Ключевые слова: ЖДА(железодефицитная анемия), хелаты, бисаланинат железа, ИК-спектр, *Gaussian09W*

Железо один самых значительных микроэлементов в организме человека, находясь лишь в 3-4 г количестве, он участвует во многих ферментативных реакциях, транспорте кислорода, кроветворении и другие. Недостаточное поступление с пищей железа приводит к его дефициту в организме, что способствует к развитию гипохромной анемии железа. По статистике Всемирной организации здоровья (ВОЗ) 25% всего населения страдают анемией [1].

При ЖДА гемоглобин крови уменьшается, у человека появляются головокружение, общая слабость, быстрая утомляемость, недостаточное снабжение организма кислородом. В таком случае больному назначаются препараты двухвалентного и трехвалентного железа для восполнения недостатка этого микроэлемента в организме. Чаще всего, применяют железосодержащие лекарства на основе сульфата железа(II). Однако, согласно информации базы данных MEDLINE считая с 1983 по 2015 годы, были зарегистрированы более чем 250 исследований, которые сообщили об осложнениях и нежелательных побочных действиях при лечении сульфатом железа [2]. Следовательно, стало ясно, что использование синтетических лекарств на основе лекарств имеющих неорганическую природу является неэффективным. Поэтому ученые предложили новый эффективный препарат при лечении ЖДА – хелатные комплексы железа.

Нашему организму более близка хелатная форма минералов, так как у нас уже имеются хелатные соединения такие как гемоглобин и цианокобаламин, поэтому для усвоения хелатов в ЖКТ не требуются отдельных дополнительных биохимических превращений, так как они уже подготовлены к усвоению организмом. Это означает, что они не будут иметь побочных эффектов, из-за того, что не образуют чужеродных веществ незнакомых для организма [3].

Аминокислоты используются в качестве биденатных лигандов для хелатирования железа и образования комплекса металлов. Поскольку аминокислоты всасываются из тонкого кишечника с помощью специфического механизма активного транспорта, эти комплексы могут также всасываться из просвета кишечника как часть молекулы хелата. Кроме того, исследования показали, что существуют некоторые механизмы, которые контролируют биодоступность и всасывание хелатов железа и аминокислот. Этот важный факт снижает опасения по поводу перегрузки железом и токсического действия этих новых соединений [4].

Одним из таких соединений является бисаланинат железа, хелатный комплекс который хорошо растворяется в воде, где центральный атом двухвалентного железа тетракоординирован двумя хелатирующими агентами. Донорно-акцепторная связь атома азота вносит вклад в стабилизацию энергии орбиталей центрального атома металла и геометрию связывающего агента, образуя пятичленное кольцо (Рис.1).

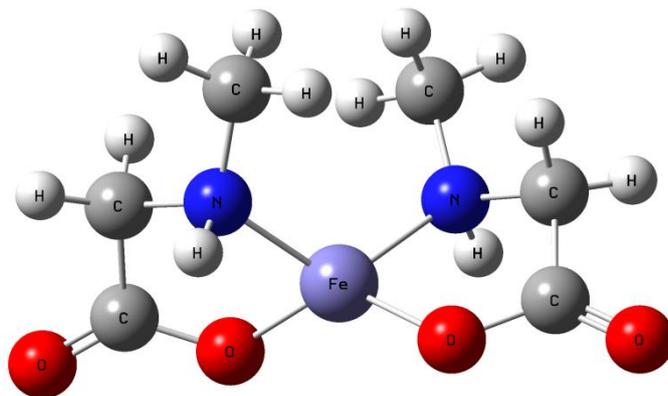


Рисунок 1. Строение молекулы бисаланината железа

Для более уточненного подтверждения строения хелата бисаланината железа нами были рассчитаны колебательные спектры с помощью пакета программ «Gaussian 09W» с применением метода DFT базиса 3-21 G [5].

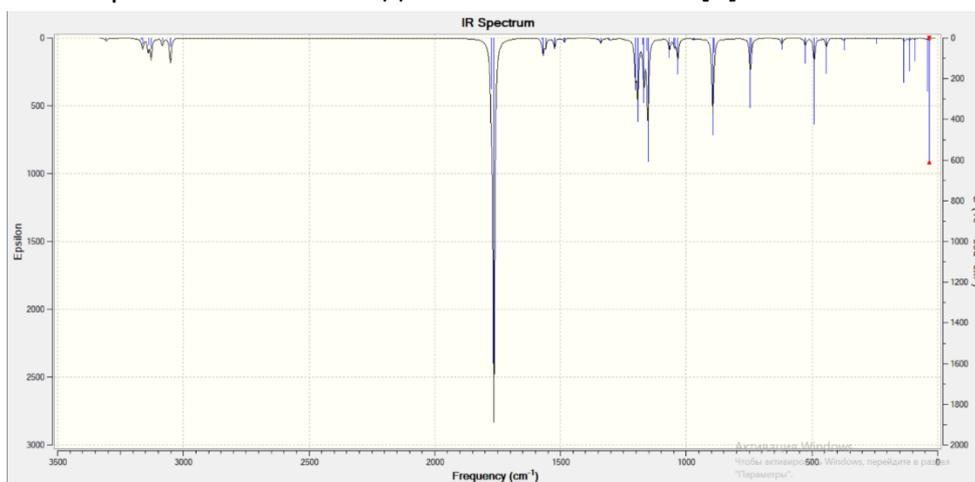


Рисунок 2. ИК-спектроскопия молекулы бисаланината железа

При этом были выявлены всего 69 колебаний, некоторые из которых были выбраны нами для более глубокого изучения их вида колебательного спектра. Данные приведены в таблице 1.

№ колебания	Волновое число, см ⁻¹	Относительная интенсивность полосы поглощения в ИКС
1	33.73	5.1603
2	41.82	2.7412
3	92.92	2.5917
4	109.49	0.0934
5	111.67	4.5318
6	133.99	7.2790
7	156.01	0.1369
28	894.90	106.9286
41	1202.14	76.8867
55	1575.42	2.8534
57	1775.35	111.5887
61	3083.50	5.9480
64	3139.33	27.7331
65	3139.49	0.2292
66	3161.00	21.4617
67	3166.77	4.3903
68	3305.91	4.3785

Таблица 1. Волновые числа и интенсивность колебательных спектров

Из данной таблицы можно увидеть, что колебания с наивысшим волновым значением приходится на валентные несимметричные колебания между атомами N – H однако с относительно низкой интенсивностью равной 2.8561. Колебания между атомами C=O, показали самую высокую интенсивность равной 111.5887 колеблющиеся симметрично валентными колебаниями.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ:

1. Газдиева Д.Х, Анализ применения лекарственных препаратов железа для профилактики и лечения железодефицитной анемии у пациентов старших возрастных групп//MEDICAL SCIENCES / «Colloquium-journal», №3(55),2020.- 52 с.
2. Рукавицын О.А., Бенина Б.Н, Гематология: Национальное руководство,-М.: ГЭОТАР-МЕД, 2017.-231с.
3. Воронов Г.Г. Хелатные формы минералов – шаг в будущее.- Белорусский государственный медицинский университет, Минск, Беларусь, Recipe", 2020, volume 23, № 1.
4. Вовчек.А., Двухвалентное железо нового поколения для предупреждения анемии у беременных.- Здоровье Украины.-№4-2018-9с.