УДК 544.022; 546.05 *Оригинальная статья*

Квантово-химический расчёт соединения цинка(II) с глицином: синтез, строение, свойства, константы устойчивости

Д.В. Беспалов, О.А. Голованова
ФГАОУ ВО «Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского»
644077, Россия, Омская область, Омск, пр. Мира, 55а
d.v.bespalov@rambler.ru

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.800

Аннотация: Комплексное применение квантово-химических методов функционала плотности (*DFT*/*B*3*LYP*) в базисе 6-31*G*(*d*,*p*) и полуэмпирического *GFN*2-*xTB*, позволили достоверно построить модель изолированной молекулы комплекса цинка с глицином. Оптимизирована структура, рассчитаны термодинамические характеристики и инфракрасный спектр, исследуемого соединения. С помощью потенциометрического титрования, по методике Кальвина-Мельхиора, определены константы устойчивости комплексов в системе цинк-глицин. Синтезирован соединение $ZnGly_2$. Методами комплексонометрии и формольного титрования подтверждено мольное соотношение в комплексе цинк-глицин равное 1:2. Приведены инфракрасные спектры синтезированного соединения. Сравнение инфракрасных спектров экспериментальных и теоретических результатов подтвердило адекватность и сходимость выбранных квантово-химических методов. Методом рентгенофазового анализа определили вероятный состав комплекса, а также и рассчитали параметры элементарной ячейки методом дихотомии, и через расчёт ван-дер-ваальсовых объёмов атомов, подтвердили наличии молекулы воды в кристаллической решётке, определён средний размер кристаллитов по методу Селякова – Шеррера. Полученные данные расширяют представления о координационной химии цинка и создают основу для рационального дизайна биоактивных соединений, направленных на регуляцию гомеостаза. Данные могут быть использованы для предотвращения патологий, связанных с нарушением метаболизма цинка и формированием наноразмерных агрегатов.

Ключевые слова: синтез, аминокислоты, комплексы цинка, глицин, метод функционала плотности, молекулярное моделирование.

Беспалов Дмитрий Вячеславович – преподаватель кафедры неорганической химии, ФГАОУ ВО «Омский государственный университет им. Ф.М. Достоевского»
Голованова Ольга Александровна – д.г.-м.н., профессор, заведующая кафедрой неорганической химии, ФГАОУ ВО «Омский Государственный Университет имени Ф.М. Достоевского»

Original paper

Quantum-chemical calculation of the zinc(II) glycine complex: synthesis, structure, properties, determination of stability constants

D.V. Bespalov, O.A. Golovanova
Omsk State University named after F.M. Dostoevsky, Omsk, Russia

DOI: 10.26456/pcascnn/2026.18.800

Abstract: The combined application of quantum-chemical methods of density functional theory (*DFT*/*B*3*LYP*) with the 6-31*G*(*d*,*p*) basis set and the semiempirical *GFN*2-*xTB* method allowed to construct a reliable model of an isolated molecule of the zinc glycine complex. The structure was optimized, and the thermodynamic characteristics and infrared spectrum of the studied complex were calculated. Using potentiometric titration according to the Calvin-Melchior method, the stability constants of the complexes in the zinc–glycine system were determined. The $ZnGly_2$ complex was synthesized. The 1:2 molar ratio was confirmed by complexometric and formol titration methods. The infrared spectra of the synthesized compound are presented. A comparison of the experimental and theoretical infrared spectra confirmed the reliability and consistency of the selected quantum-chemical

© Д.В. Беспалов, О.А. Голованова, 2026

methods. X-ray phase analysis was used to determine the probable composition of the complex, and the unit cell parameters were calculated using the dichotomy method. The presence of a water molecule in the crystal lattice was confirmed by calculating the van der Waals volumes of atoms, and the average crystallite size was determined using the Scherrer method. The obtained data expand the understanding of the coordination chemistry of zinc and provide a basis for the rational design of bioactive compounds aimed at regulating homeostasis. These data can be used in medicine to prevent pathologies associated with impaired zinc metabolism and the formation of some nanoscale aggregates.
Keywords: synthesis, amino acids, zinc complexes, glycine, density functional method, molecular simulation.

Dmitry V. Bespalov – Lecturer, Department of Inorganic Chemistry, Omsk State University named after F.M. Dostoevsky, ORCID: 0009-0009-1479-8571
Olga A. Golovanova – Dr. Sc., Professor, Head of the Department of Inorganic Chemistry, Dostoevsky Omsk State University named after F.M. Dostoevsky, ORCID: 0000-0001-9995-5672

Поступила в редакцию/received: 17.03.2026; после рецензирования/revised: 15.04.2026; принята/accepted: 19.04.2026.

1. Введение

Роль микроэлементов в поддержании гомеостаза человеческого организма важна, причем ионы цинка занимают одно из центральных мест в иерархии биологически значимых для организма человека металлов [1]. Нарушение баланса цинка критически отражается на ключевых физиологических функциях: работу ферментов, регуляцию экспрессии генов и иммунный ответ [2].

В биохимической регуляции и усвоения цинка особое значение имеют эндогенные и экзогенные лиганды, среди которых аминокислоты (АК) являются наиболее эффективными хелатирующими агентами. Глицин, являясь простейшей протеиногенной аминокислотой, обладает уникальной способностью формировать координационные связи с ионами переходных металлов, образуя стабильные хелатные циклы [3]. В некоторых условия, цинк с глицином может образовывать не только хелатные комплексы, но и соли [4]. Значит, структура и характер взаимодействия глицина с цинком в биологических жидкостях и тканях может существенно влиять на кинетику и метаболические пути усвоения, как цинка, так и аминокислоты. С одной стороны, хелатирование глицином повышает биодоступность цинка и снижает его раздражающее воздействие на слизистые оболочки ЖКТ, с другой – избыточная стабильность комплекса может препятствовать высвобождению иона в целевых тканях или нарушать конкурентный баланс с другими биометаллами [5].

Несмотря на широкое применение солей и хелатов цинка в медицине, молекулярная архитектура комплексов цинк-глицин, особенно в условиях, приближенных к физиологическим, остается предметом дискуссий. Ключевые вопросы касаются точной геометрии координационной сферы металла, влияния протонирования лиганда на стабильность связи и конформационной динамики комплекса в водной

среде. Также малоизучены механизмы, определяющие кинетику диссоциации комплекса при взаимодействии с транспортными белками и ферментативными системами организма [6]. Отсутствие комплексного и структурированного подхода к изучению моделей комплексов, описывающих термодинамические и кинетические параметры связывания цинка с глицином в биологических матрицах, существенно ограничивает возможность прогнозирования фармакокинетики и токсикологического профиля таких соединений в клинической практике.

Применение методов квантовохимического моделирования для анализа структуры и энергетических характеристик соединения цинк-глицин, совместно с потенциометрическими методами определения констант устойчивости способно восполнить существующие пробелы в понимании природы взаимодействия цинка с глицином. Данные исследования актуальны в контексте комплексного подхода, систематического исследования. Полученные результаты могут быть использованы в дизайне лекарственных форм и биологически активных добавок, где стабильность хелатных комплексов в среде организма человека являются определяющими факторами их эффективности [7]. Более того, глубокое понимание структуры комплекса открывает перспективы для разработки терапевтических агентов, направленных на коррекцию дефицита цинка с минимизацией окислительного стресса, а также в лекарственных препаратах, обладающих в том числе, антиоксидантной защитой клеток [8].

2. Экспериментальная часть

Определение констант устойчивости в системе цинк-глицин выполняли методом потенциометрического титрования. В работе применяли модификацию методики Кальвина-Мельхиора с фиксированной ионной силой [9]. Потенциометрическое титрование проводили на иономере И-160-МИ с использованием стеклянного электрода и хлор-серебренного электрода, и фиксанала 0,1000 М $NaOH$ с шагом 0,2 мл. По результатам строили кривую комплексообразования в координатах $\bar{n} - Lg[L]$. Ступенчатые константы устойчивости комплекса цинка с глицином получали по методу полунейтраллизации Бъеррума. Далее проводили расчет мольных долей (α) всех форм в системе цинк (II)-глицин для построения диаграмм распределения.

Методика синтеза разрабатывалась с опорой на ранее опубликованные работы, где описывалось получение структурно схожих соединений [10]. Отличительная особенность в том, что смесь Gly и $ZnCl_2$ растирали в ступке для измельчения, после полученную смесь растворяли в небольшом количестве воды и pH доводили до значения равного 9

раствором 0,1 Н $NaOH$.

Содержание Zn^{2+} определяли титриметрически с использованием комплексона III (трилон Б, 0,01 н) и индикатора эриохром чёрный Т. Формольное титрование по стандартной методике Серенсена – для глицина как лиганда [11]. Групповой состав соединения исследовали методом порошковой инфракрасной спектроскопии (ИК) с преобразованием Фурье с использованием таблеток на основе KBr, прибор ФСМ 2202. Рентгенофазовый анализ (РФА) порошкообразный образец исследовали на дифрактометре ДРОН-3М. Визуализация и идентификация пиков выполнена в программах OriginPro 2021, QualX2.0, Fityk. Параметры элементарной ячейки рассчитаны методом дихотомии в пакете программ FullProf Suite [12]. Оценку размера кристаллитов осуществлялась по формуле Селякова – Шеррера. Для установления количества воды в предполагаемом комплексном соединении использовали следующие уравнение:

$$\rho = Z \cdot M/(N_A \cdot V_{cell}),\ Z = V_{cell} \cdot K/V_{vdw}, \quad (1)$$

где Z – количество формульных единиц в ячейке, M – молярная масса гидрата, V_{cell} – объем элементарной ячейки, K – коэффициент упаковки, V_{vdw} – Ван-Дер-Ваальсовый объем, расчёт модифицирован на основе работы [13].

Построение модели изолированной молекулы бис-глицинового комплекса цинка использовали программное обеспечение Chemcraft [14]. Минимизации энергии соединения осуществлялась в GAMESS US, поддерживающее квантово-химические расчёты методом DFT с функционалом B3LYP, с использованием базисного набора 6-31G(p,d) [15]. Для моделирования воздействия конденсированной среды на свойства изучаемого соединения применялась методика поляризуемого континуума (PCM) [16]. Оптимизация геометрии, и расчёт колебательных частот спектров ИК спектроскопии с использованием квантово-химического полуэмпирического метода GFN2-xTB [17], реализованного в программе xTB [18], интегрированной в Chemcraft.

3. Результаты и обсуждения

На основе полученных результатов потенциометрического титрования для системы цинк-глицин построены интегральные и дифференциальные кривые титрования (см. рис. 1 а, 1 б). Вычисленные термодинамические параметры сведены в Таблице 1. Диаграмма распределения ионных форм комплексных соединений для системы цинк–глицин в водной среде (см. рис. 2) демонстрирует, что комплекс состава $ZnGly_2$ существует в интервале pH 9-10.

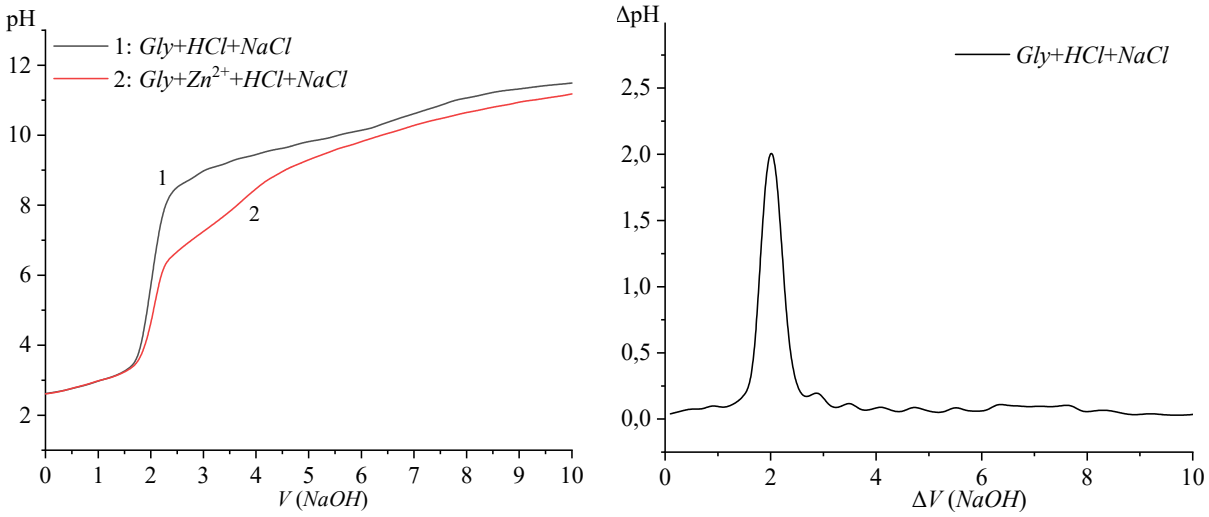


Рис. 1. Кривые потенциометрического титрования: а – интегральные для двух систем, б – дифференциальный для системы без цинка.

Таблица 1. Термодинамические характеристики комплексных соединений в водном растворе при 298,15К, ионная сила 0,1.

Ионные формы комплексных соединений	Ступенчатые константы устойчивости lgK	Ступенчатые $\Delta G°$ образования, кДж/моль	Общие константы устойчивости $lg\beta$	Общие $\Delta G°$ образования, кДж/моль
$[Zn:Gly]^+$	5,24	-29,89	5,24	-29,89
$[Zn:Gly_2]$	3,43	-19,59	8,67	-49,48

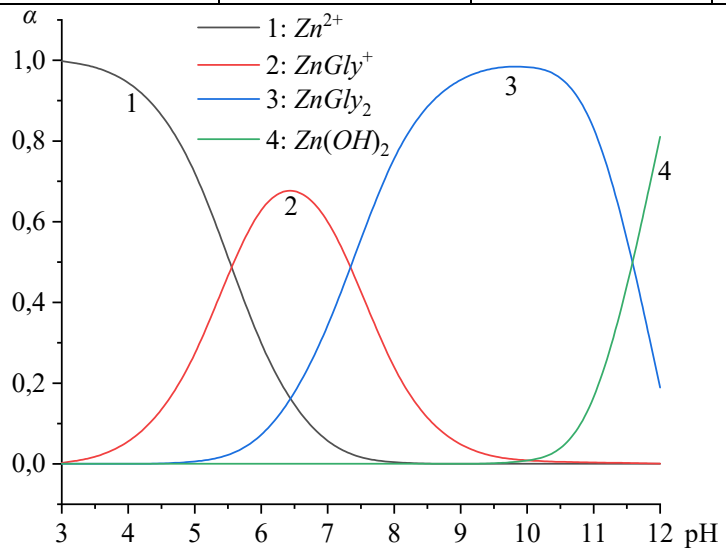


Рис. 2. Диаграмма распределения ионов и соединений цинка с глицином в водном растворе.

Полученные экспериментальные значения констант устойчивости комплексов цинка согласуются с литературными данными. Сравнение с результатами потенциометрического титрования в работах [19-21], демонстрирует расхождение не более чем на 0,3-0,4 логарифмические единицы, что находится в пределах экспериментальной погрешности метода. Полученные результаты подтверждают надежность

использованной методики потенциометрического титрования и могут быть использованы для дальнейшего изучения координационной химии, как цинка, так и других металлов комплексообразователей.

Синтезировано соединение цинка с глицином. Согласно результатам комплексонометрического и формольного титрования синтезированного соединения, мольное соотношение компонентов в полученном комплексе $Zn:Gly$ составило 1:2. ИК-спектроскопический анализ подтвердил, что полученное вещество структурно отличается от исходного L-глицина и представляет собой координационное соединение цинка с глицином. Ключевые различия их спектров отражены на рис. 3 а, б.

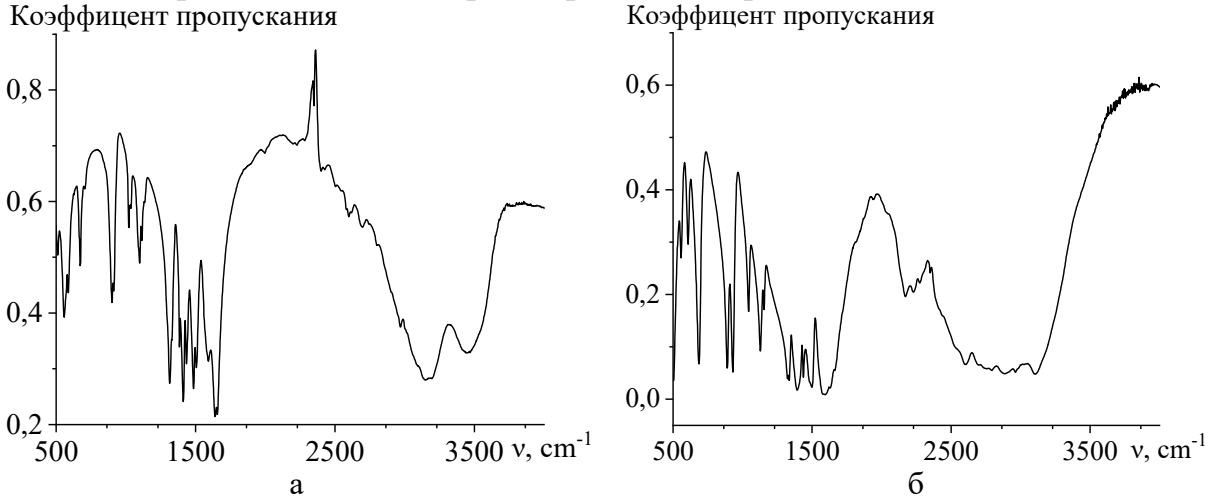


Рис. 3. ИК спектры: а – глицинат цинка, б – L-глицин.

Образование координационного соединения глицината цинка подтверждается данными ИК-спектроскопии. Во-первых, наблюдается смещение характерных полос в низкочастотной области 500-1500 см$^{-1}$. Во-вторых, зафиксировано изменение положения полосы карбоксильной группы на 12 см$^{-1}$, а в диапазоне 3100-3500 см$^{-1}$ возникают новые пики, что свидетельствует о взаимодействии цинка с донорными атомами азота и кислорода лиганда. Экспериментальная дифрактограмма осадка была сопоставлена с аналогичными дифрактограммами потенциальных соединений. Данные сопоставимы с $ZnGly_2$ моногидратом [22]. Дифрактограмма синтезированного соединения проанализированна по основным интенсивным линиям. Определены параметры элементарной ячейки и средний размер частиц. Сингония кристалла – триклинная, P1, a = 8,6780Å, b = 8,7603Å, c = 11,9648Å, α = 102,873°, β = 102,865°, γ = 111,880°, V = 774,45Å^3, $D_{average}$ = 33,62 нм. Средняя погрешность определения положения рефлексов составила $\Delta(2\theta)$ = 0,0102°.

Дополнительным подтверждением присутствия воды послужил расчёт по формулам (1) в рамках комплексного исследования соединений. Исходя из работы [22] кристаллографическая плотность равна 1,99 г/см^3.

Рассчитывали Ван-дер-Ваальсовый объём для $ZnGly_2$, он соответственно равен V_{vdw} = 240,77 Å, при K = 0,74, Z = 2. Отсюда, при M = 231,5 г/моль получали ρ = 1,99 г/см^3, следовательно, в соединении одна молекула воды, формула соединения $ZnGly_2 \cdot H_2O$.

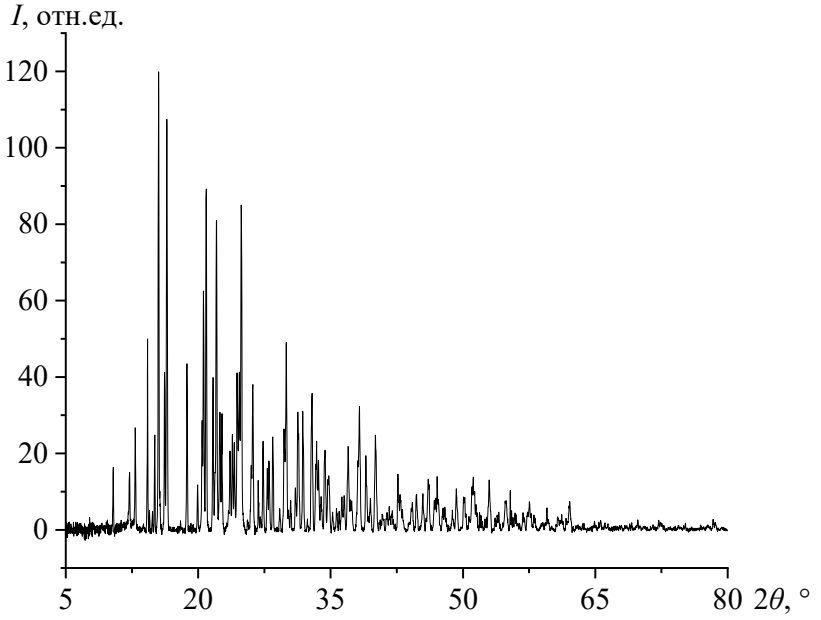
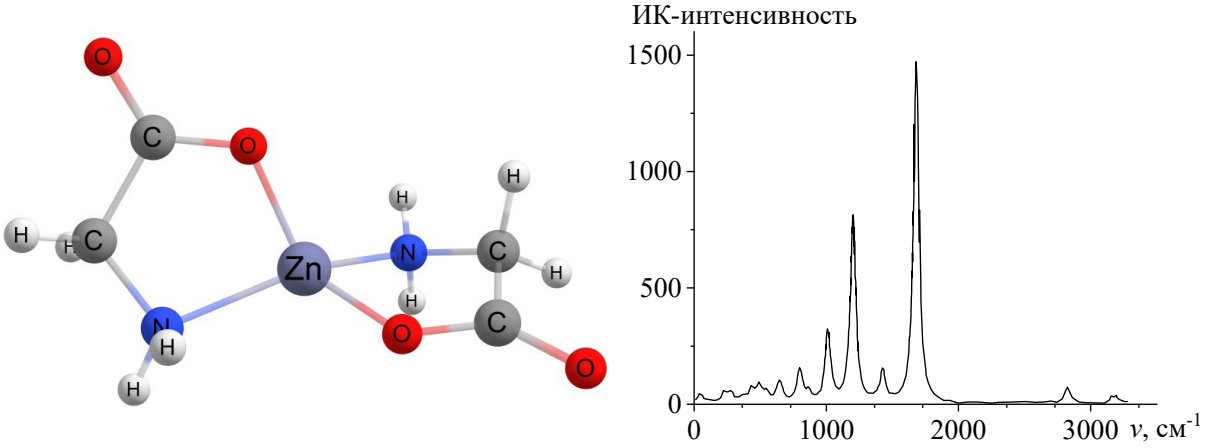


Рис. 4. РФА глицината цинка.

Смоделирована изолированная молекула глицината цинка. Структура оптимизирована, энергия минимизирована, она равна -2329,88 Eh (-1,016·10^{-14} Дж). На рис. 5 а приведено строение исследуемого соединения. Оптимизированная геометрия соответствует истинному минимуму потенциальной энергии, о чём свидетельствует отсутствие мнимых частот в расчёте колебательных спектров. Расчётный спектр методом GFN2-xTB приведён на рис. 5 б. В предыдущих работах [23] были подробно рассмотрены частоты гармонических колебаний ИК-спектров подобных соединений. Расчетные частоты гармонических колебаний требуют масштабирования для сопоставления с экспериментом, в данной работе применён коэффициент 0,95, что согласуется с латеритными данными для полуэмпирического метода GFN2-xTB [17, 24]. Сравнение данных экспериментальной и расчётной ИК спектроскопии представлены в Таблице 2. Погрешность в области отпечатков пальцев в расчётной модели, в сравнении с экспериментом менее 1%. Расхождение в области 3200-3500 см$^{-1}$ может возникать для сильных взаимодействий комплексов переходных металлов в рамках выбранного метода квантово-химического расчёта GFN2-xTB с погрешностью примерно 4%. Рассчитаны термодинамические характеристики исследуемого соединения при T = 298,15 К, данные представлены в Таблице 3.



а б

Рис. 5. Квантово-химический расчёт глицината цинка: а – модель геометрии изолированной молекулы, б – ИК спектр, метод GFN2-xTB.

Таблица 2. Сравнение теоретических $\nu_{GFN2-xTB}$ и экспериментальных ν_{exp} основных частот гармонических колебаний в ИК спектрах.

ν_{exp}, см$^{-1}$	$\nu_{GFN2-xTB}$, см$^{-1}$	ν_{exp}, см$^{-1}$	$\nu_{GFN2-xTB}$, см$^{-1}$	ν_{exp}, см$^{-1}$	$\nu_{GFN2-xTB}$, см$^{-1}$
511	512	1115	1111	1640	1640
557	564	1314	1316	1655	1662
587	599	1385	1383	1996	1999
673	672	1411	1413	2969	2958
706	703	1435	1437	3146	3143
901	906	1486	1491	3192	3195
1021	1022	1506	1504	3438	3254
1099	1096	1592	1595	3469	3277

Таблица 3. Термодинамические параметры модельного соединения цинка с глицином рассчитанные методом GFN2-xTB при стандартной температуре (298,15 K).

Параметр	Значение в Хартри	Значение в кДж/моль
$E(SCF)$	-35,360	-92,842
ZPE	0,134	+352,8
$E_0 = E + ZPE$	-35,226	-92,487
U	-35,213	-92,455
H	-35,212	-92,453
S	-	489,200 Дж/(моль К)
G (Полная энергия Гиббса)	-35,268	-92,600
ΔG образования	-	-53,8 ± 20

Энергию реакции образования комплекса $ZnGly_2$ рассчитывали по схеме $[Zn(H_2O)_4]^{2+} + 2Gly^- \rightarrow ZnGly_2 + 4H_2O$. Определили полные энергии для каждого участника реакции ΔG образования составило -0,02049 Eh, что соответствует -53,8 ± 20 кДж/моль с учётом погрешности расчёта, что указывает на термодинамическую устойчивость комплекса. Константа устойчивости комплекта $lg\beta = 9{,}42 \pm 1{,}88$ сопоставима с значением полученным экспериментально и данными работ [19-21]. Расчётные

частоты гармонических колебаний методом GFN2-xTB хорошо согласуются с экспериментальными данными для данного комплексного соединения, т.е. может быть применена и для описания подобных систем.

4. Заключение

В рамках систематического исследования системы цинк(II) – глицин был синтезирован комплекс состава $[ZnGly_2]\cdot H_2O$. Применены классические методы, потенциометрического и физико-химического анализа с современными подходами квантово-химического моделирования (DFT, GFN2-xTB), что позволило достоверно установить состав, строение и термодинамические параметры комплекса. Достоверность приведённых расчётов подтверждена экспериментальными и литературными данными. Полученные результаты вносят вклад в координационную химию биогенных металлов и могут быть использованы для дизайна лекарственных препаратов и биологически активных добавок на основе цинка. Дальнейшие исследования могут быть направлены на изучение кинетики и термодинамики комплекса в биологических матрицах.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № 075-03-2025-469).

Библиографический список:

1. **Stiles, L.I.** Role of zinc in health and disease / L.I. Stiles, K. Ferrao, K.J. Mehta // Clinical and Experimental Medicine. – 2024. – V. 24. – I. 1. – Art. № 38. – 20 p. DOI: 10.1007/s10238-024-01302-6.
2. **Liu, S.** Zinc homeostasis: an emerging therapeutic target for neuroinflammation related diseases / S. Liu, N. Wang, Y. Long, et al. // Biomolecules. – 2023. – V. 13. – I. 3. Art. № 416. – 15 p. DOI: 10.3390/biom13030416.
3. **Marukhlenko, A.V.** Chelation of zinc with biogenic amino acids: description of properties using balaban index, assessment of biological activity on spirostomum ambiguum cellular biosensor, influence on biofilms and direct antibacterial action / A.V. Marukhlenko, M.A. Morozova, A.M.J. Mbarga, et al. // Pharmaceuticals (Basel). – 2022. – V. 15. – I. 8. – Art. № 979. – 17 p. DOI: 10.3390/ph15080979.
4. **Bette, S.** On two glycine zinc sulfate phases with exotic cation coordination geometries / S. Bette, B. Hinrichsen, R.E. Dinnebier // Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie. – 2017. – V. 643. – I. 23. – P. 1855-1860. DOI: 10.1002/zaac.201700217.
5. **Schlegel, P.** Bioavailability of zinc glycinate in comparison with zinc sulphate in the presence of dietary phytate in an animal model with Zn labelled rats / P. Schlegel, W. Windisch // Journal of Animal Physiology and Animal Nutrition. – 2006. – V. 90. – I. 5-6. – P. 216-222. DOI: 10.1111/j.1439-0396.2005.00583.x.
6. **Maret, W.** Coordination dynamics of zinc in proteins / W. Maret, Y. Li // Chemical Reviews. – 2009. – V. 109. – I. 10. – P. 4682-4707. DOI: 10.1021/cr800556u.
7. **Kim, J.** Optimal density-functional theory method for zinc–amino acid complexes determined by analyzing structural and Fourier-transform infrared spectroscopy data / J. Kim, S.H. Kim, K. Jeong // RSC Advances. – 2024. – V. 14. – I. 2. – P. 1051-1055. DOI: 10.1039/D3RA07172C.
8. **Zulfigar, Z.** Protective role of zinc glycine in LPS-induced acute kidney injury in geese: Inhibition of oxidative stress and ferroptosis through Nrf2/GPX4 signaling / Z. Zulfigar, M.A. Asif, L. Al-Mitib et al. // Poultry Science. – 2026. –V. 105. – I. 3. – Art. № 106414. – 12 p. DOI: 10.1016/j.psj.2026.106414.
9. **Celvin, M.** Stability of chelate compounds. IV. Effect of the metal ion1 / M. Celvin, N.C. Melchior // Journal of the American Chemical Society. – 1948. – V. 70. – I. 10. – P. 3270-3273. DOI: 10.1021/ja01190a020.
10. **Беспалов, Д.В.** Квантово-химический расчёт соединения цинка(II) с гистидином: синтез, строение и свойства / Д.В. Беспалов, О.А. Голованова // Физико-химические аспекты изучения кластеров,

наноструктур и наноматериалов. – 2025. – Вып. 17. – С. 353-361. DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.353.
11. **Беспалов, Д.В.** Квантово-химический расчёт соединения магния(II) с триптофаном: синтез, строение, свойства / Д.В. Беспалов, О.А. Голованова // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. – 2024. – Вып. 16. – С. 448-456. DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.448.
12. **Boultif, A.** Powder pattern indexing with the dichotomy method / A. Boultif, D. Louër // Journal of Applied Crystallography. – 2004. – V. 37. – I. 5. – P. 724-731. DOI: 10.1107/S0021889804014876.
13. **Zhao, Y.H.** Fast calculation of van der Waals volume as a sum of atomic and bond contributions and its application to drug compounds / Y.H. Zhao, M.H. Zissimos // The Journal of Organic Chemistry. – 2003. – V. 68. – I. 19. – P. 7368-7373. DOI: 10.1021/jo034808o.
14. **Zhurko, G.A.** Chemcraft – graphical program for visualization of quantum chemistry computations / G.A. Zhurko. Available at: https://www.chemcraftprog.com. (accessed 22.12.2025).
15. **Alexeev, Y.** GAMESS as a free quantum-mechanical platform for drug research / Y. Alexeev, M.P. Mazanetz, O. Ichihara, D.G. Fedorov // Current Topics in Medicinal Chemistry. – 2012. – V. 12. – I. 18. – P. 2013-2033. DOI: 10.2174/156802612804910269
16. **Tomasi, J.** Quantum mechanical continuum solvation models / J. Tomasi, B. Mennucci, R. Cammi // Chemical Reviews. – 2005. – V. 105. – I. 8. – P. 2999-3094. DOI: 10.1021/cr9904009.
17. **Bannwarth, C.** GFN2-xTB - an accurate and broadly parametrized self-consistent tight-binding quantum chemical method with multipole electrostatics and density-dependent dispersion contributions / C. Bannwarth, S. Ehlert, S. Grimme // Journal of Chemical Theory and Computation. – 2019. – V. 15. – I. 3. – P. 1652-1671. DOI: 10.1021/acs.jctc.8b01176.
18. **Bannwarth, C.** Extended tight-binding quantum chemistry methods / C. Bannwarth, E. Caldeweyher, S. Ehlert et al. // WIREs Computational Molecular Science. – 2020. – V. 11. – I. 2. – Art. № e1493. – 49 p. DOI: 10.1002/wcms.1493.
19. **Neiband, M.S.** Potentiometric study of binary complexe of amino acid glycine with metal ion Zn^{2+} in aqueous solution / M.S. Neiband // Journal of Materials and Environmental Science. – 2015. – V. 6. – I. 11. – P. 3052-3059.
20. **Siegel, A.** Equilibrium binding studies of zinc-glycine complexes to ion-exchange resins and clays / A. Siegel // Geochimica et Cosmochimica Acta. – 1966. – V. 30. – I. 8. – P. 757-768. DOI: 10.1016/0016-7037(66)90130-X.
21. **Casale, A.** Thermodynamic parameters for the formation of glycine complexes with magnesium(II), calcium(II), lead(II), manganese(II), cobalt(II), nickel(II), zinc(II) and cadmium(II) at different temperatures and ionic strengths, with particular reference to natural fluid conditions / A. Casale, A.D. Robertis, C.D. Stefano et al. // Thermochimica Acta. – 1995. – V. 255. – P. 109-141. DOI: 10.1016/0040-6031(94)02181-M.
22. **Newman, J.M.** Structure of bis(glycinato)zinc(ii) monohydrate, a five-coordinate zinc(ii) complex / J.M. Newman, C.A. Bear, T.W. Hambley, H.C. Freeman // Acta Crystallographica Section C: Crystal Structure Communications. – 1990. – V. 46. – I. 1. – P. 44-48. DOI: 10.1107/s0108270189005664.
23. **Bespalov, D.V.** Magnesium glycinate and tyrosinate: structure calculations and IR spectra by the DFT method / D.V. Bespalov, O.A. Golovanova // Russian Journal of Physical Chemistry A. – 2024. – V. 98. – I. 7. – P. 1380-1387. DOI: 10.1134/S0036024424700377.
24. **Grimme, S.** A robust and accurate tight-binding quantum chemical method for structures, vibrational frequencies, and noncovalent interactions of large molecular systems parametrized for all spd-block elements (Z = 1–86) / S. Grimme, C. Bannwarth, P. Shushkov // Journal of Chemical Theory and Computation. – 2017. – V. 13. – I. 5. – P. 1989-2009. DOI: 10.1021/acs.jctc.7b00118.

References:

1. Stiles L.I., Ferrao K., Mehta K.J. Role of zinc in health and disease, *Clinical and Experimental Medicine*, 2024, vol. 24, issue 1, art. no. 38, 20 p. DOI: 10.1007/s10238-024-01302-6.
2. Liu S., Wang N., Long Y. et al. Zinc homeostasis: an emerging therapeutic target for neuroinflammation related diseases, *Biomolecules*, 2023, vol. 13, issue 3, art. no. 416, 15 p. DOI: 10.3390/biom13030416.
3. Marukhlenko A.V., Morozova M.A., Mbarga A.M.J. et al. Chelation of zinc with biogenic amino acids: description of properties using balaban index, assessment of biological activity on spirostomum ambiguum cellular biosensor, influence on biofilms and direct antibacterial action, *Pharmaceuticals (Basel),* 2022, vol. 15, issue 8, art. no. 416, 17 p. DOI: 10.3390/ph15080979.
4. Bette S., Hinrichsen B., Dinnebier R.E. Two glycine zinc sulfate phases with exotic cation coordination geometries, *Zeitschrift für anorganische und allgemeine Chemie,* 2017, vol. 643, issue 23, pp.1855-1860. DOI: 10.1002/zaac.201700217.
5. Schlegel P., Windisch W. Bioavailability of zinc glycinate in comparison with zinc sulphate in the presence of

dietary phytate in an animal model with Zn labelled rats, *Journal of Animal Physiology and Animal Nutrition,* 2006, vol. 90, issue 5-6, pp. 216-222. DOI: 10.1111/j.1439-0396.2005.00583.x.
6. Maret W., Li Y. Coordination dynamics of zinc in proteins, *Chemical Reviews,* 2009, vol. 109, issue 10. pp. 4682-4707. DOI: 10.1021/cr800556u.
7. Kim J., Kim S.H., Jeong K. Optimal density-functional theory method for zinc–amino acid complexes determined by analyzing structural and Fourier-transform infrared spectroscopy data, *RSC Advances,* 2024, vol. 14, issue 2. pp. 1051-1055. DOI: 10.1039/D3RA07172C.
8. Zulfigar Z., Asif M.A., Al-Mitib L., et al.. Protective role of zinc glycine in LPS-induced acute kidney injury in geese: inhibition of oxidative stress and ferroptosis through Nrf2/GPX4 signaling, *Poultry Science,* 2026, vol. 105, issue 3, art. no. 106414, 12 p. DOI: 10.1016/j.psj.2026.106414.
9. Celvin M, Melchior N.C. Stability of chelate compounds. IV. Effect of the metal ion1, *Journal of the American Chemical Society,* 1948, vol. 70, issue 10. pp. 3270-3273. DOI: 10.1021/ja01190a020.
10. Bespalov D.V., Golovanova O.A. Kvantovo-khimicheskij raschyot soedineniya tsinka(II) s gistidinom: sintez, stroenie i svojstva [Quantum-chemical calculation of zinc (II) compound with histidine: synthesis, structure, and properties], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials],* 2025, issue 17, pp. 353-361. DOI: 10.26456/pcascnn/2025.17.353. (In Russian).
11. Bespalov D.V., Golovanova O.A. Kvantovo-khimicheskij raschyot soedineniya magniya(II) s triptofanom: sintez, stroenie, svojstva [Quantum-chemical calculation of magnesium(II) compound with tryptophan: synthesis, structure, properties], *Fiziko-khimicheskie aspekty izucheniya klasterov, nanostruktur i nanomaterialov [Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials],* 2024, issue 16, pp.448-456. DOI: 10.26456/pcascnn/2024.16.448. (In Russian).
12. Boultif A., Louër D. Powder pattern indexing with the dichotomy method, *Journal of Applied Crystallography*, 2004, vol. 37, issue 5, pp. 724-731. DOI: 10.1107/S0021889804014876.
13. Zhao Y.H., Zissimos M.H. Fast calculation of van der Waals volume as a sum of atomic and bond contributions and its application to drug compounds, *The Journal of Organic Chemistry,* 2003, vol. 68, issue 19, pp. 7368-7373. DOI: 10.1021/jo034808o.
14. Zhurko G.A. Chemcraft – graphical program for visualization of quantum chemistry computations. Available at: https://www.chemcraftprog.com. (accessed 22.12.2025).
15. Alexeev Y., Mazanetz M.P., Ichihara O., Fedorov D.G. GAMESS as a free quantum-mechanical platform for drug research, *Current Topics in Medicinal Chemistry*, 2012, vol. 12, issue. 18. pp. 2013-2033. DOI: 10.2174/156802612804910269.
16. Tomasi J., Mennucci B., Cammi R. Quantum mechanical continuum solvation models, *Chemical Reviews*, 2005, vol. 105, issue. 8. pp. 2999-3094. DOI: 10.1021/cr9904009.
17. Bannwarth C., Ehlert S., Grimme S. GFN2-xTB - an accurate and broadly parametrized self-consistent tight-binding quantum chemical method with multipole electrostatics and density-dependent dispersion contributions, *Journal of Chemical Theory and Computation,* 2019, vol. 15, issue 3. pp. 1652-1671. DOI: 10.1021/acs.jctc.8b01176.
18. Bannwarth C., Caldeweyher E., Ehlert S., et al. Extended tight-binding quantum chemistry methods, *WIREs Computational Molecular Science,* 2020, vol. 11, issue 2, art. no. e1493, 49 p. DOI: 10.1002/wcms.1493.
19. Neiband M.S. Potentiometric study of binary complexe of amino acid glycine with metal ion Zn^{2+} in aqueous solution, *Journal of Materials and Environmental Science,* 2015, vol. 6, issue 11. pp. 3052-3059.
20. Siegel A. Equilibrium binding studies of zinc-glycine complexes to ion-exchange resins and clays, *Geochimica et Cosmochimica Acta,* 1966, vol. 30, issue 8. pp. 757-768. DOI: 10.1016/0016-7037(66)90130-X.
21. Casale A., Robertis A.D., Stefano C.D. et al. Thermodynamic parameters for the formation of glycine complexes with magnesium(II), calcium(II), lead(II), manganese(II), cobalt(II), nickel(II), zinc(II) and cadmium(II) at different temperatures and ionic strengths, with particular reference to natural fluid conditions, *Thermochimica Acta,* 1995, vol. 255, pp. 109-141. DOI: 10.1016/0040-6031(94)02181-M.
22. Newman J.M., Bear C.A., Hambley T.W., Freeman H.C. Structure of bis(glycinato)zinc(ii) monohydrate, a five-coordinate zinc(ii) complex, *Acta Crystallographica Section C: Crystal Structure Communications,* 1990, vol. 46, issue 1. pp. 44-48. DOI: 10.1107/s0108270189005664.
23. Bespalov D.V., Golovanova O.A. Magnesium glycinate and tyrosinate: structure calculations and IR spectra by the DFT method, *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2024, vol. 98, no. 7, pp. 1380-1387. DOI: 10.1134/S0036024424700377.
24. Grimme S, Bannwarth C., Shushkov P. A robust and accurate tight-binding quantum chemical method for structures, vibrational frequencies, and noncovalent interactions of large molecular systems parametrized for all spd-block elements (Z = 1–86), *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2017, vol. 13, issue 5, pp. 1989-2009. DOI: 10.1021/acs.jctc.7b00118.