

Современная наука и инновации.  
2024. № 2 (46). С. 37-47.  
Modern Science and Innovations.  
2024;2(46):37-47.

ТЕХНИЧЕСКИЕ НАУКИ /  
TECHNICAL SCIENCE

ИНФОРМАТИКА, ВЫЧИСЛИТЕЛЬНАЯ ТЕХНИКА  
И УПРАВЛЕНИЕ / INFORMATICS, COMPUTER  
ENGINEERING AND MANAGEMENT

Научная статья / Original article

УДК 004.94 + 546.46

<https://doi.org/10.37493/2307-910X.2024.2.4>

**Андрей Владимирович Блинов**

[Andrey V. Blinov]<sup>1\*</sup>,

**Алексей Алексеевич Гвозденко**

[Alexey A. Gvozdenko]<sup>2</sup>,

**Алексей Борисович Голик**

[Alexey B. Golik]<sup>3</sup>,

**Максим Андреевич Колодкин**

[Maxim A. Kolodkin]<sup>4</sup>,

**Максим Александрович Пирогов**

[Maxim A. Pirogov]<sup>5</sup>

**Компьютерное квантово-химическое  
моделирование стабилизации основного  
карбоната магния молекулами  
биополимеров**

**The computer quantum chemical modeling of  
basic magnesium carbonate stabilized by  
biopolymers**

<sup>1, 2, 3, 4, 5</sup>Северо-Кавказский федеральный университет, г. Ставрополь, Россия /  
North-Caucasus Federal University, Stavropol, Russia

\*Автор, ответственный за переписку: Андрей Владимирович Блинов, [blinov.a@mail.ru](mailto:blinov.a@mail.ru) /  
Corresponding author: Andrey V. Blinov, [blinov.a@mail.ru](mailto:blinov.a@mail.ru)

**Аннотация.** В рамках данной работы проведено компьютерное квантово-химическое моделирование стабилизации основного карбоната магния молекулами биополимеров: гидроксипропилцеллюлозой, метилцеллюлозой, хитозаном и гиалуроновой кислотой. Моделирование проводилось посредством соединения основного карбоната магния и биополимера через атом магния и различные функциональные группы, соответственно. В результате анализа данных, полученных в ходе компьютерного квантово-химического моделирования, установлено, что стабилизация основного карбоната магния биополимерами является энергетически выгодной ( $\Delta E > 736$  ккал/моль) и химически стабильной ( $0,034 \leq \eta \leq 0,075$  эВ). Также определена оптимальная конфигурация взаимодействия основного карбоната магния с каждым биополимером. В результате установлено, что стабилизация основного карбоната магния хитозаном, в случае которой взаимодействие происходит через гидроксильную группу, присоединённую к C3 остатка глюкозамина, обладает оптимальными значениями разницы энергии ( $\Delta E = 736,224$  ккал/моль) и химической жёсткости ( $\eta = 0,059$  эВ) по сравнению с другими биополимерами.

**Ключевые слова:** основной карбонат магния, биополимеры, компьютерное квантово-химическое моделирование, хитозан

**Финансирование:** исследования проведены при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FSRN-2023-0037).

**Для цитирования:** Блинов А. В., Гвозденко А. А., Голик А. Б., Колодкин М. А., Пирогов М. А. Компьютерное квантово-химическое моделирование стабилизации основного карбоната магния молекулами биополимеров // Современная наука и инновации. 2024. № 2 (46). С. 37-47. <https://doi.org/10.37493/2307-910X.2024.2.4>

**Abstract.** As part of this work, computer quantum chemical modeling of the stabilization of basic magnesium carbonate by biopolymer molecules: hydroxyethylcellulose, methylcellulose, chitosan and hyaluronic acid was carried out. The simulation was carried out by combining the basic magnesium carbonate and biopolymer through a magnesium atom and various functional groups, respectively. As a result of the analysis of data obtained during computer quantum chemical modeling, it was found that the stabilization of basic magnesium carbonate by biopolymers is energetically advantageous ( $\Delta E > 736$  kcal/mol) and chemically stable ( $0.034 \leq \eta \leq 0.075$  eV). The optimal configuration of the interaction of the basic magnesium carbonate with each biopolymer has also been determined. As a result, it was found that the stabilization of the basic magnesium carbonate by chitosan, in which the interaction occurs through a hydroxyl group attached to the C<sub>3</sub> of the glucosamine residue, has optimal values of the difference in energy ( $\Delta E = 736.224$  kcal/mol) and chemical hardness ( $\eta = 0.059$  eV) compared with other biopolymers.

**Keywords:** basic magnesium carbonate, biopolymers, computer quantum chemical modeling, chitosan

**Funding:** the research was carried out with the financial support of the Ministry of Science and Higher Education of the Russian Federation (project FSRN-2023-0037).

**For citation:** Blinov AV, Gvozdenko AA, Golik AB, Kolodkin MA, Pirogov MA. The computer quantum chemical modeling of basic magnesium carbonate stabilized by biopolymers. *Modern Science and Innovations*. 2024;2(46):37-47. (In Russ.). <https://doi.org/10.37493/2307-910X.2024.2.4>

**Введение.** В настоящее время наноразмерные материалы находят широкое применение в области медицины, косметологии, сельского хозяйства, электроники, химической и пищевой промышленности. Это обусловлено уникальными свойствами материалов в наноразмерном состоянии, такими как увеличение площади поверхности частиц, а вследствие увеличение реакционной способности, вариативность свойств в зависимости от состава, что открывает широкие возможности использования наноматериалов [1].

Одним из перспективных наноразмерных материалов для производства удобрений, имплантатов, пищевых продуктов являются карбонаты эссенциальных микроэлементов. Так, в работе [2] описан биосинтез наноразмерного карбоната магния и карбоната кальция на основе экстракта листьев Моринги масличной (лат. *Moringa oleifera*) и было доказано положительное влияние нанодобрений на основе наночастиц карбоната магния и карбоната кальция на рост биомассы арахиса и его урожайность. Также в работе [3] разработаны гидрогели желатиновой камеди, которые используются в качестве биоматериалов каркаса, способствующих регенерации межпозвоночных дисков. Полученные гидрогели были минерализованы карбонатами кальция и магния. В результате установлено, что минерализация желатиновой камеди карбонатами кальция и магния приводит к повышению адгезии и понижению цитотоксичности.

Структуры, содержащие биополимеры и карбонаты различных микроэлементов улучшают характеристики различных биоматериалов, используемых для регенерации костной ткани [4–7]. В связи с этим перспективным направлением является исследование процесса стабилизации карбонатов различных микроэлементов молекулами биополимеров. К примеру, в работе [8] проведён синтез наночастиц карбонатов кальция и магния в присутствии полиакриловой кислоты. В результате исследования установлено, что полиакриловая кислота оказывает стабилизирующее действие на частицы, уменьшая их размер и замедляя процесс кристаллизации. Также в работе [9] получены осадки карбонатов кальция и магния в растворах полиэтиленгликоля. Установлено, что полиэтиленгликоль приводит к сохранению фазового состава осадка, повышению седиментационной устойчивости дисперсий карбонатов кальция и магния.

Таким образом, целью данной работы является проведение компьютерного квантово-химического моделирования стабилизации основного карбоната магния молекулами биополимеров.

**Материалы и методы исследований. Экспериментальная часть.** Компьютерное квантово-химическое моделирование стабилизации основного карбоната магния

молекулами биополимеров проводилось путём соединения основного карбоната магния через атом металла с биополимером через различные функциональные группы (гидроксильная группа, этилгидроксильная группа, аминогруппа, карбоксильная группа) [10–13]. В качестве биополимеров рассматривали гидроксиэтилцеллюлозу, метилцеллюлозу, хитозан и гиалуроновую кислоту [14–17].

Компьютерное квантово-химическое моделирование проводилось в программном обеспечении *QChem* с использованием молекулярного редактора *IQmol*. Расчёты проводились на оборудовании центра обработки данных (*Schneider Electric*) ФГАОУ ВО Северо-Кавказского федерального университета с использованием следующих параметров построения: расчёт – *Energy*, метод – *B3LYP*, базис – *6-31G\**, *convergence* – 5, силовое поле – *Ghemical* [18–20].

В результате компьютерного квантово-химического моделирования рассчитаны значения полной энергии молекулярной системы ( $E$ ), энергии высшей заселенной молекулярной орбитали ( $E_{HOMO}$ ), энергии низшей свободной молекулярной орбитали ( $E_{LUMO}$ ), разность энергии биополимера и молекулярной системы «основной карбонат магния + биополимер» ( $\Delta E$ ) и химическая жёсткость ( $\eta$ ) [21, 22].

**Результаты исследований и их обсуждение.** В результате компьютерного квантово-химического моделирования стабилизации основного карбоната магния молекулами биополимеров получены квантово-химические расчёты, представленные в таблице 1.

**Таблица 1 – Результаты компьютерного квантово-химического моделирования стабилизации основного карбоната магния молекулами биополимеров**

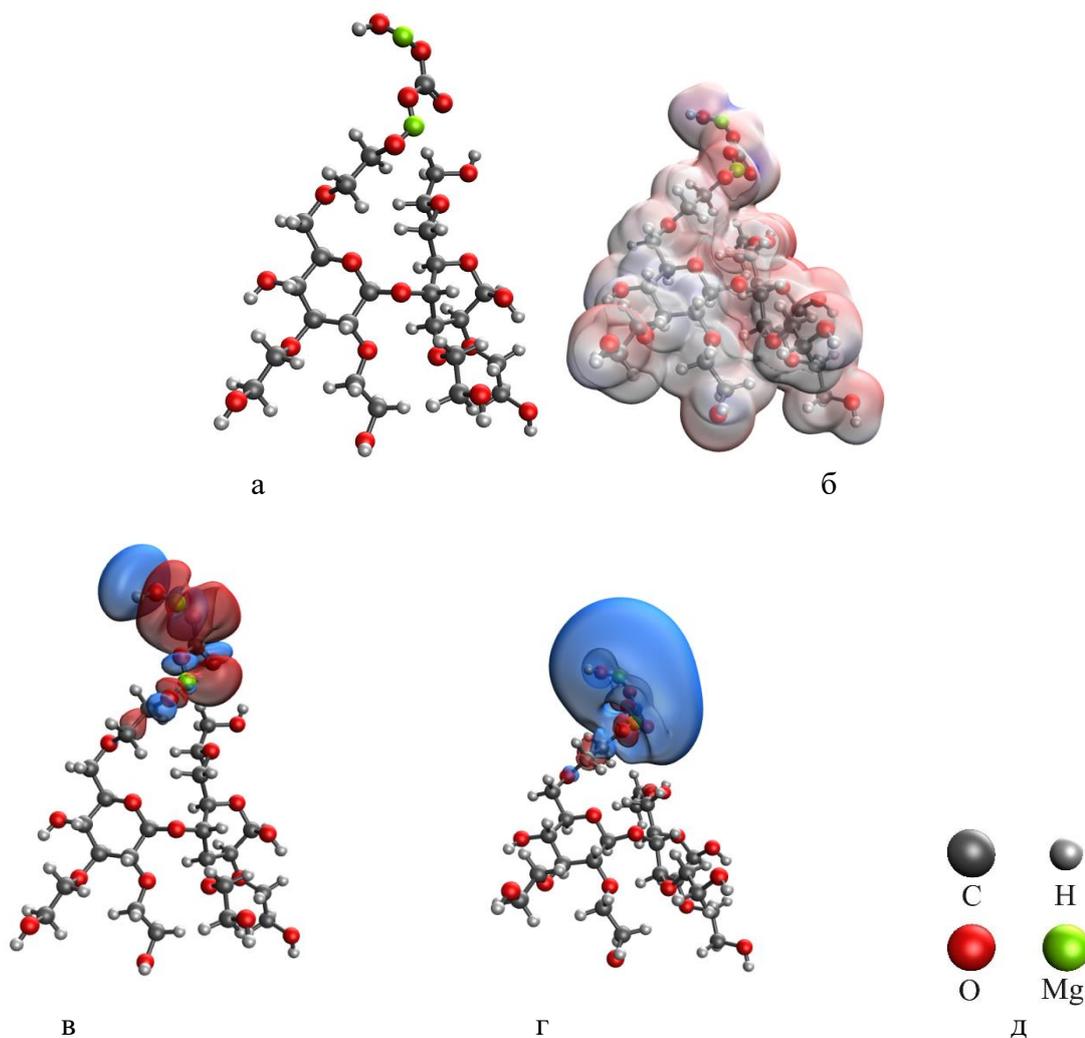
**Table 1 – Results of computer quantum-chemical modeling of the stabilization of basic magnesium carbonate by biopolymer molecules**

Молекулярная система	Взаимодействие с биополимером	$E$ , ккал/моль	$\Delta E$ , ккал/моль	$E_{HOMO}$ , эВ	$E_{LUMO}$ , эВ	$\eta$ , эВ
Гидроксиэтилцеллюлоза	–	-2220,750	–	-0,235	0,041	0,138
Метилцеллюлоза	–	-1455,031	–	-0,229	0,041	0,135
Хитозан	–	-1258,049	–	-0,225	0,030	0,128
Гиалуроновая кислота	–	-1429,434	–	-0,232	-0,002	0,115
Основной карбонат магния + гидроксиэтилцеллюлоза	Через гидроксильную группу, присоединённую к $C_6$ остатка глюкозамина	-2956,923	736,173	-0,174	-0,061	0,057
	Через гидроксильную группу, присоединённую к $C_3$ остатка глюкозамина	-2956,920	736,170	-0,173	-0,057	0,058
	Через аминогруппу, присоединённую к $C_2$ остатка глюкозамина	-2956,923	736,173	-0,166	-0,045	0,061
Основной карбонат магния + метилцеллюлоза	Через гидроксильную группу, присоединённую к $C_3$ остатка глюкопиранозы	-2191,190	736,159	-0,164	-0,047	0,059
	Через гидроксильную группу, присоединённую к $C_4$ остатка глюкопиранозы	-2191,205	736,174	-0,157	-0,058	0,050
Основной карбонат магния + хитозан	Через гидроксильную группу,	-1994,103	736,054	-0,179	-0,111	0,034

Молекулярная система	Взаимодействие с биополимером	$E$ , ккал/моль	$\Delta E$ , ккал/моль	$E_{\text{нomo}}$ , эВ	$E_{\text{лumo}}$ , эВ	$\eta$ , эВ
	присоединённую к $C_6$ остатка глюкозамина					
	Через гидроксильную группу, присоединённую к $C_3$ остатка глюкозамина	-1994,273	736,224	-0,182	-0,064	0,059
	Через аминогруппу, присоединённую к $C_2$ остатка глюкозамина	-1994,104	736,055	-0,156	-0,048	0,054
Основной карбонат магния + гиалуроновая кислота	Через карбоксильную группу, присоединённую к $C_6$ остатка глюкоуроновой кислоты	-2165,622	736,188	-0,162	-0,049	0,057
Основной карбонат магния + гиалуроновая кислота	Через гидроксильную группу, присоединённую к $C_3$ остатка глюкоуроновой кислоты	-2165,591	736,157	-0,173	-0,055	0,059
	Через гидроксильную группу, присоединённую к $C_2$ остатка глюкоуроновой кислоты	-2165,449	736,015	-0,199	-0,050	0,075
	Через гидроксильную группу, присоединённую к $C_4$ остатка N-ацетилглюкозамина	-2165,497	736,063	-0,155	-0,045	0,055
	Через гидроксильную группу, присоединённую к $C_6$ остатка N-ацетилглюкозамина	-2165,499	736,065	-0,164	-0,059	0,053
	Через вторичную аминогруппу в ацетамидном радикале, присоединённом к $C_2$ остатка N-ацетилглюкозамина	-2165,518	736,084	-0,156	-0,040	0,058

На основе полученных данных можно сделать вывод, что стабилизация основного карбоната молекулами биополимеров является энергетически выгодной ( $\Delta E > 736$  ккал/моль), а так же химически стабильными ( $0,034 \leq \eta \leq 0,075$  эВ). Также исходя из полученных результатов определены оптимальные конфигурации взаимодействия основного карбоната магния с биополимерами.

Так, оптимальным взаимодействием гидроксипропилцеллюлозы с основным карбонатом магния ( $\Delta E = 736,173$  ккал/моль,  $\eta = 0,061$  эВ) является соединение через этилгидроксильную группу, присоединённую к  $C_6$  остатка глюкопиранозы, представленное на рисунке 1.



**Рисунок 1 – Результаты моделирования взаимодействия молекул гидроксиэтилцеллюлозы и основного карбоната магния через этилгидроксильную группу, присоединённую к C<sub>6</sub> остатка глюкопиранозы в гидроксиэтилцеллюлозе**

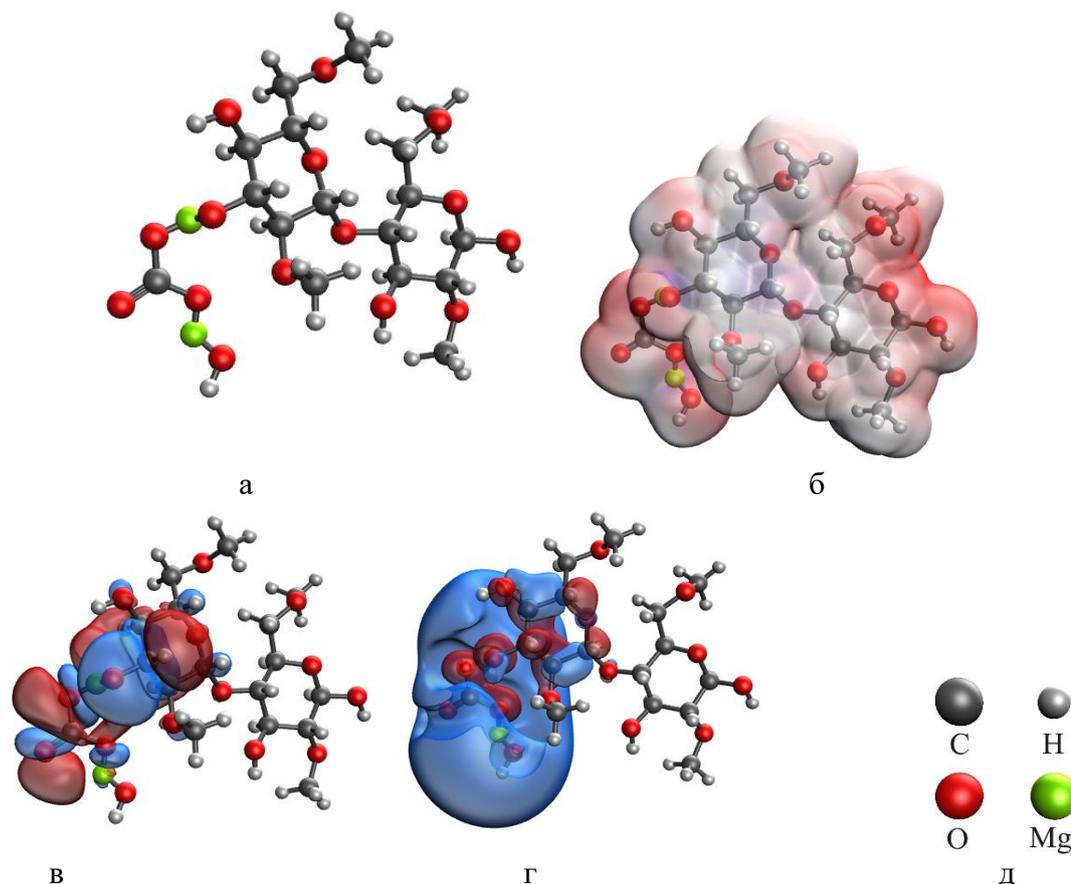
**a – модель молекулярного комплекса; б – распределение электронной плотности; в – высшая заселённая молекулярная орбиталь;**

**г – низшая свободная молекулярная орбиталь; д – расшифровка атомов**

**Figure 1 – Results of modeling the interaction of hydroxyethyl cellulose molecules and basic magnesium carbonate through the ethyl hydroxyl group attached to C<sub>6</sub> of the glucopyranose residue in hydroxyethyl cellulose**

**a – model of the molecular complex; b – electron density distribution; c – highest occupied molecular orbital; d – lowest unoccupied molecular orbital; d – decoding of atoms**

Оптимальным взаимодействием метилцеллюлозы с основным карбонатом магния ( $\Delta E = 736,159$  ккал/моль;  $\eta = 0,059$  эВ) является соединение через гидроксильную группу, присоединённую к C<sub>3</sub> остатка глюкопиранозы, представленное на рисунке 2.

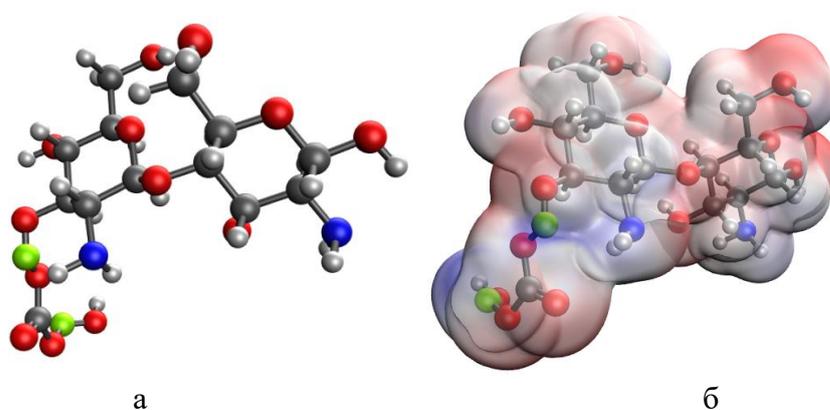


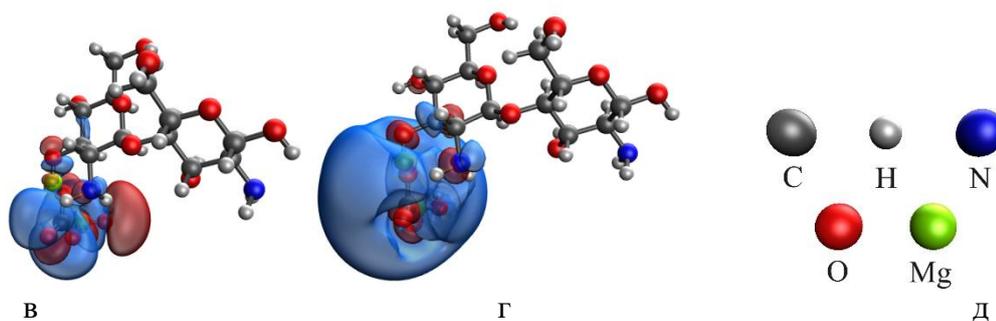
**Рисунок 2 – Результаты моделирования взаимодействия молекул метилцеллюлозы и основного карбоната магния через гидроксильную группу, присоединённую к C<sub>3</sub> остатка глюкопиранозы в метилцеллюлозе**

**а – модель молекулярного комплекса; б – распределение электронной плотности; в – высшая заселённая молекулярная орбиталь; г – низшая свободная молекулярная орбиталь; д – расшифровка атомов**

**Figure 2 – Results of modeling the interaction of methylcellulose molecules and basic magnesium carbonate through the hydroxyl group attached to C<sub>3</sub> of the glucopyranose residue in methylcellulose**  
**a – model of the molecular complex; b – electron density distribution; c – highest occupied molecular orbital; d – lowest unoccupied molecular orbital; e – decoding of atoms**

Оптимальным взаимодействием хитозана с основным карбонатом магния ( $\Delta E = 736,224$  ккал/моль;  $\eta = 0,059$  эВ) является соединение через гидроксильную группу, присоединённую к C<sub>3</sub> остатка глюкозамина, представленное на рисунке 3.

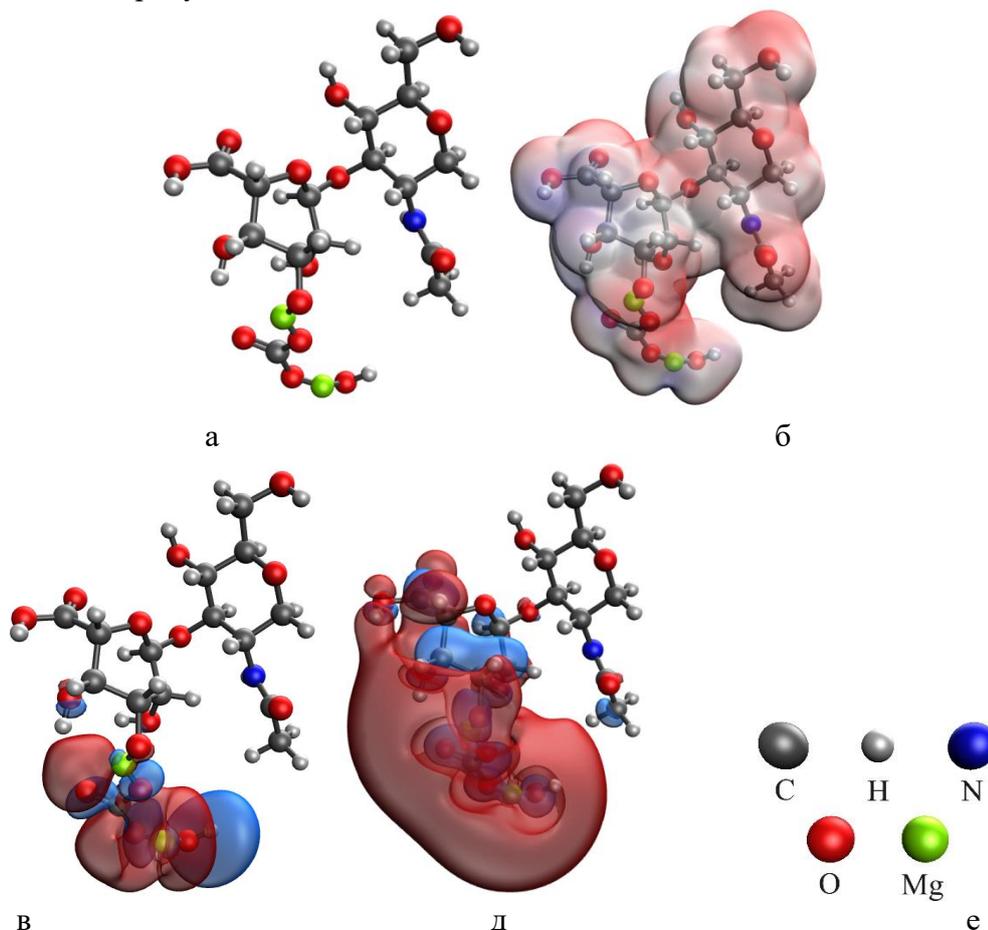




**Рисунок 3 – Результаты моделирования взаимодействия молекул хитозана и основного карбоната магния через гидроксильную группу, присоединённую к  $C_3$  остатка глюкозамина в хитозане**  
 а – модель молекулярного комплекса; б – распределение электронной плотности; в – высшая заселённая молекулярная орбиталь; г – низшая свободная молекулярная орбиталь;  
 е – расшифровка атомов

**Figure 3 – Results of modeling the interaction of chitosan molecules and basic magnesium carbonate through the hydroxyl group attached to  $C_3$  of the glucosamine residue in chitosan**  
 a – model of the molecular complex; b – electron density distribution; c – highest occupied molecular orbital; d – lowest unoccupied molecular orbital; e – decoding of atoms

При взаимодействии основного карбоната магния с гиалуроновой кислотой оптимальным взаимодействием ( $\Delta E = 736,157$  ккал/моль;  $\eta = 0,059$  эВ) является соединение через карбоксильную группу, присоединённую к  $C_3$  остатка глюконовой кислоты, представленное на рисунке 4.



**Рисунок 4 – Результаты моделирования взаимодействия молекул гиалуроновой кислоты и основного карбоната магния через гидроксильную группу, присоединённую к  $C_3$  остатка глюконовой кислоты в гиалуроновой кислоте**  
 а – модель молекулярного комплекса; б – распределение электронной плотности; в – высшая заселённая молекулярная орбиталь; г – низшая свободная молекулярная орбиталь;

## е – расшифровка атомов

**Figure 4 – Results of modeling the interaction of hyaluronic acid molecules and basic magnesium carbonate through the hydroxyl group attached to C3 of the glucuronic acid residue in hyaluronic acid**  
**a – model of the molecular complex; b – electron density distribution; c – highest occupied molecular orbital;**  
**d – lowest unoccupied molecular orbital; e – decoding of atoms**

Также исходя из полученных данных можно сделать вывод, что основной карбонат магния, стабилизированный хитозаном путём взаимодействия атома магния с гидроксильной группой, присоединённой к C<sub>3</sub> остатка глюкозамина в хитозане, обладает оптимальными значениями разницы энергии и химической стабильности.

**Заключение.** В результате компьютерного квантово-химического моделирования стабилизации основного карбоната магния молекулами биополимеров, определены оптимальные конфигурации взаимодействия основного карбоната магния и биополимеров. Также на основе полученных данных установлено, что оптимальным стабилизатором для основного карбоната магния является хитозан.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Gato M. A. et al. Physicochemical properties of nanomaterials: implication in associated toxic manifestations // *BioMed research international*. 2014. Vol. 2014. P. 1–8.
2. Nelwamondo A. M. et. al. Biosynthesis of magnesium oxide and calcium carbonate nanoparticles using *Moringa oleifera* extract and their effectiveness on the growth, yield and photosynthetic performance of groundnut (*Arachis hypogaea* L.) genotypes // *Heliyon*. 2023. No. 9. P. 19419.
3. Douglas T. E. L. et al. Enzymatic, urease-mediated mineralization of gellan gum hydrogel with calcium carbonate, magnesium-enriched calcium carbonate and magnesium carbonate for bone regeneration applications // *Journal of tissue engineering and regenerative medicine*. 2017. Vol. 11. No. 12. P. 3556–3566.
4. Douglas T. E. L. et al. Stabilization of amorphous calcium carbonate with nanofibrillar biopolymers // *Advanced Functional Materials*. 2012. Vol. 22. No. 16. P. 3460–3469.
5. Воробьёв А. Д. и др. Влияние химической структуры карбоксилсодержащих полимеров на морфологию осадков и устойчивость дисперсий карбонатов // *Доклады Национальной академии наук Беларуси*. 2023. Т. 67. № 2. С. 111–118.
6. Butler M. F. et al. Calcium carbonate crystallization in the presence of biopolymers // *Crystal growth & design*. 2006. Vol. 6. No. 3. P. 781–794.
7. Butler M. F. et al. Hollow calcium carbonate microsphere formation in the presence of biopolymers and additives // *Crystal Growth and Design*. 2009. Vol. 9. No. 1. P. 534–545.
8. Шестак И. В. и др. Полиакриловая кислота и композиции на ее основе для ингибирования осадкообразования в водооборотных системах // *Журнал прикладной химии*. 2009. Т. 82. № 10. С. 1742–1745.
9. Шестак И. В. и др. Особенности формирования осадков карбонатов кальция и магния в растворах полиэтиленгликоля // *Известия Национальной академии наук Беларуси. Серия химических наук*. 2011. № 2. С. 13–18.
10. Stefánsson A. et al. Magnesium bicarbonate and carbonate interactions in aqueous solutions: An infrared spectroscopic and quantum chemical study // *Geochimica et Cosmochimica Acta*. 2017. Vol. 198. P. 271–284.
11. Versluis P., Popp A. K., Velikov K. P. Interaction between biopolyelectrolytes and sparingly soluble mineral particles // *Langmuir*. 2011. Vol. 27. No. 1. P. 83–90.
12. Payne S. R., Heppenstall-Butler M., Butler M. F. Formation of thin calcium carbonate films on chitosan biopolymer substrates // *Crystal growth & design*. 2007. Vol. 7. No. 7. P. 1262–1276.
13. Azulay D. N., Abbasi R., Ben Simhon Ktorza I. et al. Biopolymers from a bacterial extracellular matrix affect the morphology and structure of calcium carbonate crystals // *Crystal Growth & Design*. 2018. Vol. 18. No. 9. P. 5582–5591.

14. Проказников М. А. и др. Функционализация хитозана взаимодействием с ароматическими альдегидами // Вестник Ярославского государственного университета им. П.Г. Демидова. Серия Естественные и технические науки. 2012. № 3. С. 72–78.
15. Nasatto P. L., Pignon F., Silveira J. L. Methylcellulose, a cellulose derivative with original physical properties and extended applications // *Polymers*. 2015. Vol. 7. No. (5). P. 777–803.
16. Королевич М. В., Адрианов М. В. Метод и результаты теоретического анализа спектро-структурных корреляций производных моносахаридов и брассиностероидов // Вестник Национальной академии наук Беларуси. Серия физика-математических наук. 2013. № 2. С. 96–103.
17. Сигаева Н. Н., Колесов С. В., Назаров П. В., Вильданова Р. Р. Химическая модификация гиалуроновой кислоты и ее применение в медицине // Вестник Башкирского университета. 2012. Т. 17. № 3. С. 1220–1241.
18. Блинов А. Р. и др. Компьютерное квантово-химическое моделирование взаимодействия наночастиц селена с четвертичными аммониевыми соединениями // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2023. № 15. С. 357–366.
19. Epifanovsky E. et al. Software for the frontiers of quantum chemistry: An overview of developments in the Q-Chem 5 package // *The Journal of Chemical Physics*. 2021. Vol. 155. No. 8.
20. Shao Y. et al. Advances in molecular quantum chemistry contained in the Q-Chem 4 program package // *Molecular Physics*. 2015;113(2):184–215.
21. Блинова А. А. Определение оптимальной конфигурации молекулярной системы «наночастицы силиката марганца-незаменимая аминокислота» // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов. 2023. № 15. С. 940–949.
22. Blinov A. V. et al. Modeling of the formation of triple complexes of the essential trace element iron with riboflavin and essential amino acids // *Modern Science and Innovations*. 2023. No. 3 (43). P. 108–116.

## REFERENCES

1. Gatoo MA et al. Physicochemical properties of nanomaterials: implication in associated toxic manifestations. *BioMed research international*. 2014;2014:1-8.
2. Nelwamondo AM et al. Biosynthesis of magnesium oxide and calcium carbonate nanoparticles using *Moringa oleifera* extract and their effectiveness on the growth, yield and photosynthetic performance of groundnut (*Arachis hypogaea* L.) genotypes. *Heliyon*. 2023;9:19419.
3. Douglas TEL et al. Enzymatic, urease-mediated mineralization of gellan gum hydrogel with calcium carbonate, magnesium-enriched calcium carbonate and magnesium carbonate for bone regeneration applications. *Journal of tissue engineering and regenerative medicine*. 2017;11(12):3556-3566.
4. Bassett DC et al. Stabilization of amorphous calcium carbonate with nanofibrillar biopolymers. *Advanced Functional Materials*. 2012;22(16):3460-3469.
5. Vorobiev AD et al. Effect of the chemical structure of carboxyl-containing polymers on precipitate morphology and carbonate dispersions stability. *Doklady of the National Academy of Sciences of Belarus*. 2023;67(2):111-118. (In Russ.).
6. Butler MF et al. Calcium carbonate crystallization in the presence of biopolymers. *Crystal growth & design*. 2006;6(3):781-794.
7. Butler MF et al. Hollow calcium carbonate microsphere formation in the presence of biopolymers and additives. *Crystal Growth and Design*. 2009;9(1):534-545.
8. Shestak IV et al. Polyacrylic acid and compositions based on it for inhibiting sedimentation in water circulation systems. *Zhurnal prikladnoi khimii = Journal of Applied Chemistry*. 2009;82(10):1742-1745. (In Russ.).

9. Shestak IV et al. Specific features of CaCO<sub>3</sub> and MgCO<sub>3</sub> deposition in poly(ethylene glycol) solutions. Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Chemical series. 2011;2:13-18. (In Russ.).
10. Stefánsson A et al. Magnesium bicarbonate and carbonate interactions in aqueous solutions: An infrared spectroscopic and quantum chemical study. Geochimica et Cosmochimica Acta. 2017;198:271-284.
11. Versluis P, Popp AK, Velikov KP. Interaction between biopolyelectrolytes and sparingly soluble mineral particles. Langmuir. 2011;27(1):83-90.
12. Payne SR, Heppenstall-Butler M, Butler MF. Formation of thin calcium carbonate films on chitosan biopolymer substrates. Crystal growth & design. 2007;7(7):1262-1276.
13. Azulay DN, Abbasi R, Ben Simhon Ktorza I et al. Biopolymers from a bacterial extracellular matrix affect the morphology and structure of calcium carbonate crystals. Crystal Growth & Design. 2018;18(9):5582-5591.
14. Prokaznikov MA et al. The function of hitozan by reaction with aromatic aldehydes. Vestnik Yaroslavskego gosudarstvennogo universiteta im. P.G. Demidova. Seriya Estestvennye i tekhnicheskie nauki = Bulletin of Yaroslavl State University named after P.G. Demidov. Natural and technical sciences series. 2012;3:72-78. (In Russ.).
15. Nasatto PL, Pignon F, Silveira JL. Methylcellulose, a cellulose derivative with original physical properties and extended applications. Polymers. 2015;7(5):777-803.
16. Korolevich MV, Andrianov VM. Method and results of the theoretical analysis of spectral and structural correlations of derivatives of monosaccharides and brassinosteroids. Proceedings of the National Academy of Sciences of Belarus. Physics and Mathematics Series. 2013;2:96-103. (In Russ.).
17. Sigaeva NN, Kolesov SV, Nazarov PV, Vil'danova RR. Chemical modification of hyaluronic acid and its application in medicine. Bulletin of Bashkir University. 2012;17(3):1220-1241. (In Russ.).
18. Blinov et al. Computer quantum-chemical modeling of the interaction of selenium nanoparticles with quaternary ammonium compounds. Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. 2023;15:357-366. (In Russ.).
19. Epifanovsky E et al. Software for the frontiers of quantum chemistry: An overview of developments in the Q-Chem 5 package. The Journal of Chemical Physics. 2021;155(8).
20. Shao Y. et al Advances in molecular quantum chemistry contained in the Q-Chem 4 program package. Molecular Physics. 2015;113(2):184-215.
21. Blinova AA et al. Determination of the optimal configuration of the molecular system "manganese silicate nanoparticles-an essential amino acid". Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials. 2023;15:940-949. (In Russ.).
22. Blinov AV. Modeling of the formation of triple complexes of the essential trace element iron with riboflavin and essential amino acids. Modern Science and Innovations. 2023;3(43):108-116.

### ИНФОРМАЦИЯ ОБ АВТОРАХ

**Андрей Владимирович Блинов** – кандидат технических наук, и.о. заведующего кафедрой физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, Северо-Кавказский федеральный университет, +79887679460, <https://orcid.org/0000-0001-9321-550X>, [blinov.a@mail.ru](mailto:blinov.a@mail.ru)

**Алексей Алексеевич Гвозденко** – ассистент кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, Северо-Кавказский федеральный университет, +79887060469, <https://orcid.org/0000-0001-7763-5520>, [gvozdenko.1999a@gmail.com](mailto:gvozdenko.1999a@gmail.com)

**Алексей Борисович Голик** – ассистент кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, Северо-Кавказский федеральный университет, +79180124774, <https://orcid.org/0000-0003-2580-9474>, [lexgoldman@gmail.com](mailto:lexgoldman@gmail.com)

**Максим Андреевич Колодкин** – заведующий учебно-лабораторным комплексом кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, Северо-Кавказский федеральный университет, +79881032147, <https://orcid.org/0009-0004-2045-4787>, [mkolodkin@ncfu.ru](mailto:mkolodkin@ncfu.ru)

**Максим Александрович Пирогов** – студент 4 курса бакалавриата кафедры физики и технологии наноструктур и материалов, физико-технический факультет, Северо-Кавказский федеральный университет, +79614883920, <https://orcid.org/0000-0001-9217-6262>, [pirogov.m.2002@gmail.com](mailto:pirogov.m.2002@gmail.com)

#### INFORMATION ABOUT THE AUTHORS

**Andrey V. Blinov** – PhD, Head of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North-Caucasus Federal University, +79887679460, <https://orcid.org/0000-0001-9321-550X>, [blinov.a@mail.ru](mailto:blinov.a@mail.ru)

**Alexey A. Gvozdenko** – Assistant of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North-Caucasus Federal University, +79887060469, <https://orcid.org/0000-0001-7763-5520>, [gvozdenko.1999a@gmail.com](mailto:gvozdenko.1999a@gmail.com)

**Alexey B. Golik** – Assistant of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North-Caucasus Federal University, +79180124774, <https://orcid.org/0000-0003-2580-9474>, [lexgoldman@gmail.com](mailto:lexgoldman@gmail.com)

**Maxim A. Kolodkin** – Head of the Educational and Laboratory Complex of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North-Caucasus Federal University, +79881032147, <https://orcid.org/0009-0004-2045-4787>, [mkolodkin@ncfu.ru](mailto:mkolodkin@ncfu.ru)

**Maxim A. Pirogov** – Student of the Department of Physics and Technology of Nanostructures and Materials, Faculty of Physics and Technology, North-Caucasus Federal University, +79614883920, <https://orcid.org/0000-0001-9217-6262>, [pirogov.m.2002@gmail.com](mailto:pirogov.m.2002@gmail.com)

**Вклад авторов:** все авторы внесли равный вклад в подготовку публикации.

**Конфликт интересов:** авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

**Contribution of the authors:** the authors contributed equally to this article.

**Conflict of interest:** the authors declare no conflicts of interests.

*Статья поступила в редакцию: 13.03.2024;  
одобрена после рецензирования: 19.04.2024;  
принята к публикации: 10.06.2024.*

*The article was submitted: 13.03.2024;  
approved after reviewing: 19.04.2024;  
accepted for publication: 10.06.2024*