

CONFERENCE CLUSTER
SOLVATION
CRYSTALLIZATION
SMART MATERIALS
2018

КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2018



XIII Международная
научная конференция
«Проблемы сольватации
и комплексообразования
в растворах»



X Международная
научная конференция
«Кинетика и механизм
кристаллизации.
Кристаллизация и материалы
нового поколения»



Международный симпозиум
«Умные материалы»

Летняя школа-конференция
молодых ученых
«Моделирование умных материалов»

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

1-6 июля 2018 г.
Суздаль, Россия

**Федеральное агентство научных организаций
Российский фонд фундаментальных исследований
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН
Российская академия наук
Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
Ивановский государственный химико-технологический университет**

КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2018:

**XIII Международная научная конференция
«Проблемы сольватации и комплексообразования в
растворах»**

**X Международная научная конференция
«Кинетика и механизм кристаллизации.
Кристаллизация и материалы нового поколения»**

Международный симпозиум «Умные материалы»

1 – 6 июля 2018 г.

г. Суздаль, Россия

DENSITIES, DYNAMIC VISCOSITIES AND REFRACTIVE INDICES OF AMINO ACID IONIC LIQUIDS BASED ON 1-ETHYL-3-METHYLIMIDAZOLIUM IN AQUEOUS SOLUTIONS AT SEVERAL TEMPERATURES

Fedotova V.S., Alopina E.V., Smirnova N.A.
St. Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia
veronique.fedotova@yandex.ru

Amino acid ionic liquids (AAILs) derived from natural amino acid have attracted considerable attention. Several research groups are focusing on the synthesis, properties, and application of AAILs or their derivatives. Because of the strong hydrogen bonding ability of the AAILs, these “greener solvents” have shown interesting characteristics in many fields, such as the excellent ability to dissolve biomaterials like DNA, cellulose, or carbohydrates, a specific viscous property, unique chirality, the particular hybrid capability as a surfactant. Moreover, the high number of possible combinations between cations and anions allows the properties of ILs to be developed for a specific task [1-3].

In this work, a number of AAILs based on 1-ethyl-3-methylimidazolium as the cation and L-valine, L-leucine, L-lysine as the anions were synthesized and characterized (Figure 1).

The structures of the obtained AAILs were confirmed by ^1H NMR and ^{13}C NMR spectroscopies. The experimental dynamic viscosity and density data of aqueous solutions of these AAILs in the concentration range 0-97 wt % were measured in the temperature range $298.15\text{-}318.15 \pm 0.05$ K. The density data have been used to calculate the molar volumes, V_m , for all the systems at studied temperatures. The refractive indices of aqueous solutions of these AAILs in the concentration range 0-97 wt % were measured at temperatures 298.15 K.

The densities and the refractive indices of the aqueous solutions with the same AAIL concentration decrease in the following sequence: $[\text{C}_2\text{mim}][\text{Lys}] > [\text{C}_2\text{mim}][\text{Val}] > [\text{C}_2\text{mim}][\text{Leu}]$. It has been stated that in the field of high AAIL concentrations in the binary system water + $[\text{C}_2\text{mim}][\text{AA}]$ (AA = Lys, Val, Leu) the change in the density values versus the AAIL concentration is nonlinear. The viscosity is more sensitive to the water content than the density. The viscosity decreases with temperature in the whole temperature range under study. Further studies of the structure of aggregates would be of interest.

Acknowledgements. The reported study was funded by RFBR according to the research project № 16-03-00723a. The NMR measurements were carried out at the Center for Magnetic Resonance, St. Petersburg State.

1. N.A. Smirnova, E.A. Safonova. *J. Phys. Chem. A*, 2010, **84**, 1–11.
2. G. Tao, L. He, W. Liu, L. Xu, W. Xiong, T. Wang, Y. Kou. *Green Chem.*, 2006, **8**, 639–646.
3. E. Alopina, Yu. Dobryakov, E. Safonova, N. Smirnova, E. Kolobova, L. Kartsova, *Colloids and Surfaces A*, 2018, **544**, 137–143.

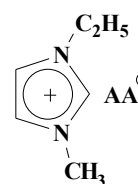


Figure 1. Structure of AAILs studied in this work. These are $[\text{C}_n\text{mim}][\text{AA}]$ molecules where AA = Val, Lys, Leu anions.

УСТАНОВЛЕНИЕ ОСОБЕННОСТЕЙ ВЛИЯНИЯ РАСТВОРИТЕЛЯ НА ВЕЛИЧИНУ ХИМИЧЕСКИХ СДВИГОВ ХАРАКТЕРИСТИЧЕСКИХ ГРУПП АЛКАЛОИДОВ МЕТОДАМИ 2D ЯМР СПЕКТРОСКОПИИ

Белов К.В.¹, Ходов И.А.^{2,3}, Киселев М.Г.²

¹ Ивановский государственный университет, биолого-химический факультет, г. Иваново, Россия

² Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

³ Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия
iakh@isc-ras.ru

Класс алкалоидов, будучи биологически активными соединениями, эксплуатируемыми во многих аспектах человеческой деятельности (сельское хозяйство, медицина, фармакология), вызывают большой интерес в физико-химическом сообществе. Изучение данного обширного класса соединений является одной из актуальных задач современной химии. Одним из классических соединений в ряду алкалоидов, является стрихнин, гетероциклический ароматический алкалоид. Анализ сложной структуры данного соединения, позволяет выявить структурные особенности большинства представителей этого класса, именно поэтому изучение стрихнина является важным этапом в понимании химической структуры представителей класса алкалоидов в целом.

Для достижения поставленной задачи, был использован современный комплексный подход, включающий в себя одномерные (^1H , ^{13}C) и двумерные (HMBC, HSQC, TOCSY с различными временами spin-lock) методы ядерного магнитного резонанса (ЯМР). В ходе эксперимента по изучению структуры

стрихнина в органических растворителях (C_6D_6 , DMSO) были применены современные гомо и гетероядерные подходы, позволяющие провести полный анализ химической структуры исследуемого вещества. Выбор различных по своей природе растворителей обусловлен необходимостью пронаблюдать изменения, происходящие в спектрах ЯМР при переходе от неполярного к более полярному растворителю.

Таким образом, анализ полученных данных позволил определить влияние растворителя на величины химических сдвигов в 1D спектрах стрихнина при смене растворителя. Кроме того, выявлены причины, обуславливающие данный эффект, построены соответствующие зависимости, характеризующие смещение резонансных сигналов в протонных спектрах при увеличении полярности растворителя. Была рассчитана потенциальная поверхность молекулы исследуемого вещества и выявлены соответствующие корреляции.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров, а также при финансовой поддержке фондов РФФИ (проекты №16-53-150007, №17-03-00459 и №18-03-00255), федеральной целевой программы № RFMEFI61618X0097 и в рамках государственного задания номер государственной регистрации: 01201260481.

ТЕРМОДИНАМИКА КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ НЕКОТОРЫХ АМИНОКАРБОНОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ С ИОНАМИ D-МЕТАЛЛОВ

Гридчин С.Н.

*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия
sergei_gridchin@mail.ru*

Среди комплексонов, имеющих наибольшее практическое значение, особое место занимают производные этилендиамин-N,N,N',N'-тетрауксусной кислоты. Вследствие удачного сочетания и взаимного расположения в молекуле донорных центров это соединение оказалось одним из наиболее эффективно действующих универсальных комплексонов, нашедших широкое применение в различных областях технологии, аналитической химии, медицины. В то же время, этот лиганд характеризуется низкой селективностью комплексообразования. Одним из перспективных направлений повышения избирательности комплексообразования по отношению к некоторым катионам является увеличение числа метиленовых звеньев между атомами азота и введение в этот фрагмент функциональных групп, содержащих донорные атомы.

В настоящей работе представлены результаты потенциометрических, спектрофотометрических и калориметрических исследований процессов кислотно-основного взаимодействия и образования комплексов цинка(II), кадмия(II), никеля(II), кобальта(II), меди(II) и марганца(II) в водных растворах некоторых перспективных комплексонов – производных этилендиаминтетрауксусной кислоты, а также ряда модельных соединений – аминокислот и моноаминных комплексонов.

В качестве объектов исследования использованы триметилендиамин-N,N,N',N'-тетрауксусная, гексаметилендиамин-N,N,N',N'-тетрауксусная, 2-гидроксипропилен-1,3-диамин-N,N,N',N'-тетрауксусная, этилендиамин-N,N,N',N'-тетрауксусная, этилендиамин-N,N'-диглутаровая, имино-N,N-диуксусная, N-(β-гидроксиэтил)имино-N,N-диуксусная, нитрило-N,N,N-триуксусная, глутаминовая, аспарагиновая кислоты, аспарагин, валин, аланин, глицин, серин, гомосерин, треонин.

При 298.15 К в интервале значений ионной силы от 0.1 до 1.5 моль/л определены величины констант и тепловых эффектов исследованных равновесий. Полученные результаты сопоставлены с данными для ряда родственных аминокарбонных соединений. Проанализировано влияние природы и концентрации “фонового” электролита на реализацию протолитических и координационных равновесий. Рассчитаны стандартные термодинамические характеристики ($\lg K^\circ$, ΔG° , ΔH° , ΔS°) соответствующих реакций. Рассмотрены возможные причины изменения энтальпийного и энтропийного вкладов в устойчивость комплексов в зависимости от строения центрального иона и структуры лиганда (дентатность и способ координации лиганда, наличие гидрофобных и гидрофильных заместителей, особенности сольватации цвиттер-ионов, степень гидратации исходных реагентов и продуктов реакции, возможность вхождения молекул воды во внутреннюю координационную сферу центрального иона).

Работа выполнена в НИИ Термодинамики и кинетики химических процессов ИГХТУ в рамках Государственного задания (базовая часть), проект 4.7104.2017/8.9.