

изолированных молекул и комплексов. Показано что имеет место взаимная поляризация ОСНН при образовании циклического димера пирролидона. Более сильные связи соответствуют большей поляризации соответствующих атомов. Различные функционалы дают разные значения параметров связей, но в большинстве случаев наблюдается хорошее совпадение относительных значений. Работа выполнена при финансовой поддержке Российского Фонда фундаментальных исследований: проект № 20-03-00037-а

#### КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ИОНОВ ЩЕЛОЧНЫХ МЕТАЛЛОВ С ОКСИКИСЛОТАМИ

Чевела В.В.<sup>1</sup>, Иванова В.Ю.<sup>1</sup>, Безрядин С.Г.<sup>2</sup>, Березин Н.Б.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

<sup>2</sup>РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, Москва, Россия

<sup>3</sup>Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия  
sergb@yadim@mail.ru

Исследовано взаимодействия ионов щелочных металлов: Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Cs<sup>+</sup> и тетрабутиламмония с цитрат- и тартрат- ионами различной степени протонизации методами pH-метрии и математического моделирования. Ионы Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Cs<sup>+</sup> образуют с цитрат- ионами формы MH<sub>2</sub>Cit<sup>-</sup>, MH<sub>2</sub>Cit<sup>0</sup>, MHCit<sup>-</sup>, M<sub>2</sub>HCit<sup>-</sup>. В случае тетрабутиламмония отсутствует форма M<sub>2</sub>HCit<sup>-</sup>, что можно объяснить его наибольшим радиусом. Ионы Na<sup>+</sup> и NBu<sub>4</sub><sup>+</sup> образуют с тартрат-ионами комплексы состава MH<sub>2</sub>T<sup>-</sup>, MH<sub>2</sub>T<sup>0</sup>. Константы устойчивости большинства форм убывают в ряду Na<sup>+</sup> > K<sup>+</sup> > Cs<sup>+</sup> > NBu<sub>4</sub><sup>+</sup> в соответствии с увеличением ионного радиуса. Показано, что все экспериментальные данные для изученных систем в диапазоне концентраций H<sub>2</sub>Cit<sup>-</sup> и H<sub>2</sub>T<sup>0</sup> 0.002-0.06 моль/л можно описать равновесиями образования комплексов катион (Na<sup>+</sup>, K<sup>+</sup>, Cs<sup>+</sup>, NBu<sub>4</sub><sup>+</sup>) - анион оксикислоты при использовании констант диссоциации оксикислоты при нулевой ионной силе.

#### СТРУКТУРА И СТЕРЕОЭФФЕКТЫ ОБРАЗОВАНИЯ ОКСИКАРБОКСИЛАТОВ ТИТАНА(IV), АЛЮМИНИЯ(III), ЖЕЛЕЗА(III)

Безрядин С.Г.<sup>1</sup>, Чевела В.В.<sup>2</sup>, Иванова В.Ю.<sup>2</sup>, Березин Н.Б.<sup>3</sup>, Межевич Ж.В.<sup>3</sup>

<sup>1</sup>РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, Москва, Россия

<sup>2</sup>Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

<sup>3</sup>Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия  
sergb@yadim@mail.ru

Методом DFT (программа PRIRODA) рассчитаны геометрические параметры и полные энергии структур ряда комплексов алюминия(III), титана(IV), железа(III) в водном растворе с учетом второй координационной сферы. В расчетах использовалась нользарядная стехиометрическая единица, включающая комплекс и частицы второй координационной сферы. Титан(IV) в растворах титанилсульфата в отсутствии дополнительного избытка ионов водорода находится в виде гидратированных форм гидроксотитанила и тригидроксотитана. В условиях избытка ионов водорода основная форма существования – гидратированный катион дигидроксотитана(IV), что соответствует литературным данным. Первая координационная сфера во всех этих частицах представляет собой искаженный октаэдр. Отсутствие стереоселективности в образовании димерных dl – тартратов титана(IV) является следствием необычно устойчивой структуры dl – тартрата за счет образования внутреннего четырехчленного кольцевого фрагмента Ti<sub>2</sub>O<sub>2</sub>. Гипотетический d- тартрат железа(III) имеет в растворе типичную октаэдрическую геометрию. Для dl- димера найдена новая структура с неэквивалентным окружением ионов железа. Стереоспецифическое образование может быть обусловлено его меньшей энергией по сравнению с d-тартратом.

#### ИССЛЕДОВАНИЕ КОНФОРМАЦИОННЫХ ПЕРЕХОДОВ ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНОГО ГОМОСОПОЛИМЕРА МЕТОДОМ МАЛОУГЛОВОГО РЕНТГЕНОВСКОГО РАССЕЯНИЯ

Амарантов С.В.

ФНИЦ "Кристаллографии и фотоники" Институт кристаллографии им А.В. Шубникова  
Российской академии наук, Москва, Россия  
amarantov\_s@mail.ru

Среди полиаминоалкилметакрилатов наиболее широко используются полимеры на основе поли-N,N-диметиламиноэтилметакрилата (ПДМАЭМ/PDMAEMA) и поли-N,N-диэтиламиноэтилметакрилата