Conference Cluster

ТЕЗИСЫ ДОКЛАДОВ

20-24 сентября 2021 г.
Иваново, Россия

КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2021

XIV МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ «ПРОБЛЕМЫ СОЛЬВАТАЦИИ И КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ В РАСТВОРАХ»

XI МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ «КИНЕТИКА И МЕХАНИЗМ КРИСТАЛЛИЗАЦИИ. КРИСТАЛЛИЗАЦИЯ И МАТЕРИАЛЫ НОВОГО ПОКОЛЕНИЯ»

VI МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ ПО ХИМИИ И ХИМИЧЕСКОЙ ТЕХНОЛОГИИ

XIII ВСЕРОССИЙСКАЯ ШКОЛА-КОНФЕРЕНЦИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ «ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ХИМИЯ ЖИДКОФАЗНЫХ СИСТЕМ» (КРЕСТОВСКИЕ ЧТЕНИЯ)

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
Российская академия наук
Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН
Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН
Ивановский государственный химико-технологический университет

КЛАСТЕР КОНФЕРЕНЦИЙ 2021:

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

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

VI Международная научная конференция по химии и химической технологии

XIII Всероссийская школа-конференция молодых ученых "Теоретическая и экспериментальная химия жидкофазных систем" (Крестовские чтения)

20–24 сентября 2021
г. Иваново

характерны три различные конформации: «плоскостная», «*экзо*»- и редкая «*эндо-экзо*»-конформация. Среди них «плоскостная» конформация, в которой три гидроксиметильные группы лежат в плоскости четвертичного атома углерода, является наиболее характерной для TRIS катионов. Наличие двух атомов водорода при аммонийной группе в DEA катионах приводит к реализации двух конформаций, в которых две гидроксиэтильные ветви ориентированы относительно одного аммонийного атома водорода (квазипротатрановая структура) или направлены к разным атомам водорода $^{+}NH_2$ группы.
Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 20-73-00033).

1. M. Taha, I. Khan, J.A.P. Coutinho. *J. Chem. Thermodynamics*, 2016, **94**, 152–159.
2. V.S. Fundamensky, T.A. Kochina, Y.A. Kondratenko, A.A. Zolotarev, Yu.G. Vlasov, I.S. Ignatyev. *J. Mol. Liq.*, 2017, **230**, 113–120.
3. Yu.A. Kondratenko, A.A. Nikonorova, A.A. Zolotarev, V.L. Ugolkov, T.A. Kochina. *J. Mol. Struct.*, 2020, **1207**, 127813.
4. Y. A. Kondratenko, D. O. Antuganov, O. Yu. Kadnikova, A. A. Zolotarev, V. L. Ugolkov, M. A. Nadporojskii, T. A. Kochina. *J. Mol. Liq.*, 2021, **324**, 114717.

ВИБРАЦИОННЫЙ ПЛОТНОМЕР ВЫСОКОГО ДАВЛЕНИЯ. ПЛОТНОСТЬ СМЕСИ ВОДА–2-ПИРРОЛИДОН

Макаров Д.М.[1], Коунина Л.Е.[2] Егоров Г.И.[1], Колкер А.М.[1]
[1]*Институт химии растворов Российской академии наук, Иваново, Россия*
[2]*Ивановский государственный политехнический университет, Иваново, Россия*
dmm@isc-ras.ru

В данной работе была сконструирована установка для измерения плотности жидкости в широких параметрах состояния. Установка создана на базе плотномера с вибрирующей трубкой DMA HP имеющего диапазон рабочих температур 263.15–473.15 K и давлений до 70 МПа. Для проверки прибора и процедуры калибровки, были измерены плотности чистого толуола и 1 *m* водного раствора NaCl. Были применены две методики калибровки денсиметра. Полученные плотности выбранных эталонных веществ сопоставлены со справочными данными.
В работе также были измерены плотности смеси вода–2-пирролидон в интервале температур 278.15 K–323.15 K и давлений до 70 МПа. Экспериментальные данные плотности были описаны уравнением Тейта в том же диапазоне давления и температуры. Эти данные использовались для получения других объемных свойств смеси. Показано, что избыточные мольные объемы смеси вода–2-пирролидон отрицательны, а с ростом давления и температуры система стремится к идеальной смеси. Экстремумы на концентрационных зависимостях парциальных мольных объемов компонентов, в область низких концентраций 2-пирролидона, характеризуют влияние трехмерной сетки водородных связей воды. Была проведена оценка влияния 2-пирролидона на воду с помощью нескольких термодинамических критериев. Обнаружено, что соблюдается термодинамическая согласованность рассмотренных критериев и показано, что 2-пирролидон имеет гидрофобный характер взаимодействия с водой.
Работа выполнена при финансовой поддержки гранта РФФИ № 20-03-00037

PARTITIONING OF L-TRYPTOPHAN IN AQUEOUS BIPHASIC SYSTEMS CONTAINING DIALKYLIMIDAZOLIUM IONIC LIQUID WITH DIFFERENT ANIONS AND KOSMOTROPIC SALT

Korchak P.A., Safonova E.A.
Institute of Chemistry SPbU, St. Petersburg, Petergof, Russia
st034758@student.spbu.ru

Separation and purification of biomolecules (e.g. amino acids) are the crucial tasks in biotechnology [1]. Some ionic liquids (ILs) can serve as a safe alternative to organic solvents, many of which are toxic or flammable. Aqueous biphasic systems (ABSs) formed by IL, water and inorganic salt are of particular interest for bioextraction. An ability to form two liquid phases with the distribution of solute between these phases makes these systems applicable for the required partitioning of biomolecules. One of the important advantages of ILs is a possibility to modify their chemical structure in order to obtain the desired properties such as an extraction capacity. Among the modified ILs, the amino acid ILs (AAILs) attract much attention due to their low toxicity in comparison with conventional ILs [2]. However, extraction ability of ABSs with ILs or especially with AAILs is poorly studied.
The main aim of this work was to study the distribution of a solute between the liquid phases effect in ABS containing 1-alkyl-3-methylimidazolium ILs with halide and amino acid anions [$C_n$mim]X (where n - number of

carbon atoms in the alkyl chain of AAIL = 4, 6, 8; X = Cl – chloride, Br – bromide, [Leu] – L-Leucinate, [Val] – L-Valinate, [Lys] – L-Lysinate) and K_2HPO_4 and K_3PO_4 as inorganic salts. L-tryptophan was chosen as a model solute due to its high hydrophobicity.

As a result, new data on partition coefficients of L-tryptophan in the selected ABSs were obtained. The results showed that in ABSs with some AAILs, higher distribution coefficients are observed than in the systems with halide ILs. Moreover, a correlation was established between the partition and phase behavior (the results were obtained by us earlier [3]) of ABSs. It was found that, in general, partition coefficients of L-tryptophan are larger for ABSs with a wider heterogeneous region.

It should be concluded that ABSs with AAILs are promising for the extraction of small biomolecules. The results can be useful for understanding the driving force of phase separation and distribution of the solutes.

We thank the Russian Science Foundation, project # 20-13-00038, for financial support. Scientific research were performed at the Research park of St.Petersburg State University («Center for Chemical Analysis and Materials Research», «Center for Magnetic Resonance»)

1. Freire M. G. et al. *Chemical Society Reviews*, 2012, **41**, 4966-4995.
2. Egorova K. S. et al. *Toxicology Research*, 2015, **4**, 152-159.
3. Korchak P. A. et al. *Fluid Phase Equilibria*, 2020, **525**, 112789.

POLYMERIC IONIC LIQUIDS IN DILUTE AQUEOUS SOLUTION: MD SIMULATION OF POLY(DIMETHYL DIALLYL AMMONIUM) SALTS

Gotlib I.Yu, Victorov A.I.
Saint Petersburg State University, Saint Petersburg, Russia
i.gotlib@spbu.ru

Polymeric ionic liquids (PILs) containing amino acid anions is an important new class of PILs that attract an increasing attention. The effect of the anion chemistry on the conformational behavior of the PIL chain is one of the key issues.

In this work we report the results of molecular dynamics simulations for dilute aqueous solutions of poly(dimethyl diallyl ammonium) chloride (PDADMAC) and poly(dimethyl diallyl ammonium) lysinate (PDADMALys). Evolution of the polycation chain from a compact globule into an expanded coil is examined and discussed in terms of theoretical models. The effect of presence of ionic pairs on the free energy of the chain is estimated from the theory of dipolar chains [1, 2]. Conformational and diffusive characteristics of PDADMAC and PDADMALys are compared, revealing the effects of size and shape of the counterion.

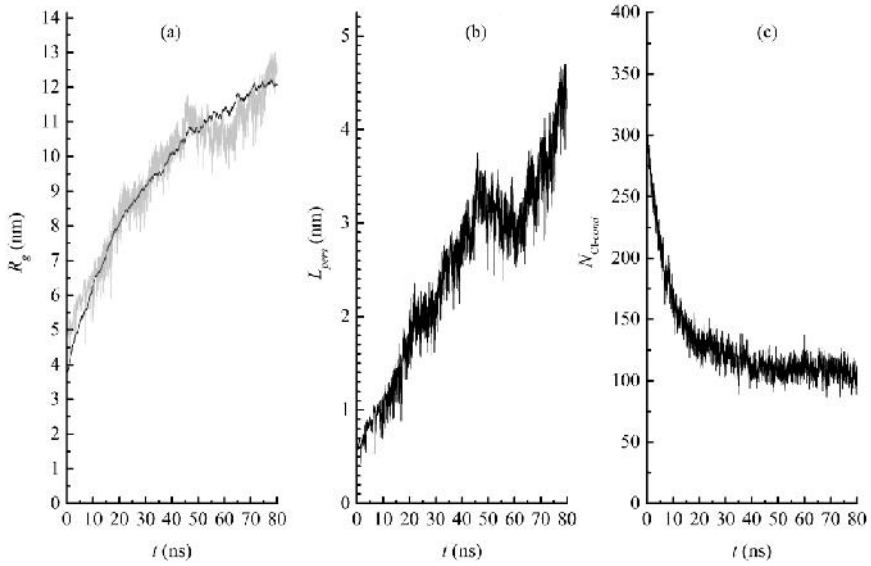

Figure 1. The gyration radius (a), the persistent length (b), and the number of Cl anions condensed on the chain (c) for a single poly(dimethyl diallyl ammonium) chain (400 monomers) in PDADMAC/water during its evolution from a globule to an expanded coil. Black, MD results; gray, the Benoit – Doty approximation for R_g using the persistent length from (b).

The authors thank Russian Science Foundation (grant #20-13-00038) for financial support.

1. Yu. D. Gordievskaya, Yu. A. Budkov, E. Yu. Kramarenko, Soft Matter, 2018, 14, 3232–3235.
2. Yu. Budkov, N. Kalikin, A. Kolesnikov, Chem. Commun., 2021, 57, 3983–3986.