

Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
САНКТ-ПЕТЕРБУРГСКИЙ
ПОЛИТЕХНИЧЕСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ ПЕТРА ВЕЛИКОГО

ХII МЕЖДУНАРОДНОЕ КУРНАКОВСКОЕ СОВЕЩАНИЕ ПО ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОМУ АНАЛИЗУ

Сборник статей

27–29 сентября 2022 года

Санкт-Петербург



ПОЛИТЕХ-ПРЕСС

Санкт-Петербургский
политехнический университет
Петра Великого

Санкт-Петербург

2022

СТРУКТУРА СМЕШАННЫХ СЕТОК В ВОДНЫХ СИСТЕМАХ ДИОЛОВ И АМИНОСПИРТОВ

Агаян Г.М.², Балабаев Н.К.³, Новаковская Ю.В.², Родникова М.Н.¹,
Кононова Е.Г.⁴, Федоренко О.К.⁵

¹Институт общей и неорганической химии им. Н.С. Курнакова РАН, Москва

²Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Москва

³Институт математических проблем биологии РАН – филиал Института
прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, Путино

⁴Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Москва

⁵Высший химический колледж РАН РХТУ им. Д. И. Менделеева

rodnikova@igic.ras.ru

Алифатические диолы и аминоспирты, так же как и вода, обладают пространственной сеткой водородных связей в жидкой фазе. Они смешиваются с водой во всех соотношениях, образуя смешанные сетки, структура которых зависит от соотношения компонентов. Водные растворы, так же как и чистые аминоспирты и диолы, имеют большое переохлаждение жидкой фазы, которое мы объясняем наличием пространственных сеток Н-связей. Они широко применяются в криобиологии, в частности, для длительного хранения живых клеток и тканей.

Мы исследовали водные системы этиленгликоля (ЭГ), 1,3-пропандиола (ЗПД), моноэтаноламина (МЭА) и 3-аминопропанол-1 (ЗАП). Методы исследования: квантово-химические расчеты, ИК-спектроскопия, молекулярная динамика, теория графов и симплексы Делоне. Во всех системах в разбавленных растворах превалирует сетка воды, в концентрированных растворах – сетки добавленных диолов и аминоспиртов, в области средних концентраций ~ 40-70 моль% – смешанные водно-диоловые и водно-аминоспиртовые сетки. Разница в смешанных водно-диоловых и водно-спиртовых сетках связана с наличием аминной группы в молекуле аминоспирта. Подчеркнем, что именно средние концентрации водных растворов диолов, а особенно аминоспиртов, обладающие преимущественно смешанными сетками, применяются в криобиологии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки России в рамках государственного задания ИОНХ РАН. Основные расчеты были проведены на суперкомпьютерах K100 и K60 ИПМ им. М.В.Келдыша РАН и МСЦ РАН.