

Т.Р. Усачева, К.И. Кузьмина, М.А. Чешинский, И.А. Кузьмина, В.А. Шарнин

Татьяна Рудольфовна Усачева (✉), Ксения Ивановна Кузьмина, Ирина Алексеевна Кузьмина
Кафедра Общей химической технологии, Ивановский государственный химико-технологический университет, Шереметевский просп., д. 7, Иваново, Российская Федерация, 153000
E-mail: oxt@isuct.ru (✉), oxt703@isuct.ru

Михаил Андреевич Чешинский

Кафедра технической кибернетики и автоматики, Ивановский государственный химико-технологический университет, Шереметевский просп., д. 7, Иваново, Российская Федерация, 153000
E-mail: cheshinskii@mail.ru

Валентин Аркадьевич Шарнин

Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, ул. Академическая, 1, Иваново, Российская Федерация, 153045,
Кафедра общей химической технологии, Ивановский государственный химико-технологический университет, Шереметевский просп., д. 7, Иваново, Российская Федерация, 153000
E-mail: sharn@isuct.ru

БАЗА ДАННЫХ ПО ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИМ ПАРАМЕТРАМ РЕАКЦИЙ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ И СОЛЬВАТАЦИИ В СМЕШАННЫХ РАСТВОРИТЕЛЯХ

Для систематизации термодинамических параметров комплексообразования и сольватации в смешанных растворителях с помощью СУБД MS Access разработана база данных «Термодинамика комплексообразования и сольватации в бинарных растворителях», обеспечивающая быстрый поиск необходимых термодинамических характеристик, а также информации об используемых методах исследований.

Ключевые слова: база данных, комплексообразование, систематизация данных, смешанные растворители, сольватация, СУБД MS Access, термодинамика

T.R. Usacheva, K.I. Kuzmina, M.A. Cheshinsky, I.A. Kuzmina, V.A. Sharnin

Tatiana R. Usacheva (✉), Kseniya I. Kuz'mina, Irina A. Kuz'mina,
Department of General Chemical Technology, Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Sheremetievskiy ave., 7, Ivanovo, Russia, 153000
E-mail: oxt@isuct.ru (✉), oxt703@isuct.ru

Mikhail A. Cheshinskiy

Department of technical cybernetics and automatics, Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Sheremetievskiy ave., 7, Ivanovo, Russia, 153000
E-mail: cheshinskii@mail.ru

Valentin A. Sharnin

Institute of Solution Chemistry, Russian Academy of Sciences, Akademicheskaya str., 1, Ivanovo, 153045
Department of General Chemical Technology, Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Sheremetievskiy ave., 7, Ivanovo, Russia, 153000
E-mail: sharn@isuct.ru

DATABASE ON THERMODYNAMIC PARAMETERS OF REACTIONS OF COMPLEXATION AND SOLVATION IN MIXED SOLVENTS

Study of the effect of solvation on the thermodynamics and kinetics of complexation reactions in mixed solvents are performed in ISUCT and they are one of the main scientific directions of the university. For systematization of thermodynamic parameters of complexation and solvations in the mixed solvents which were obtained by researchers of ISUCT the database «Thermodynamics of a complex formation and solvation in binary solvents» was developed using a MS Access Database Management System which provides fast search of necessary thermodynamic characteristics and also information on the used methods of researches.

Keywords: database, complexation, data systematization, mixed solvents, solvation, DBMS MS Access, thermodynamics

Современное интенсивное развитие наукоемких технологий обусловило острую потребность в быстром поиске научной информации во всех областях естественнонаучных знаний, в том числе в области термодинамики растворов [1].

Важность изучения таких сложных систем, как растворы электролитов и неэлектролитов в смешанных водно-органических растворителях, подчеркивал еще в 1887 г. Д.И. Менделеев, обращая внимание на то, что «...многие вопросы о растворах решаются проще всего и явственнее путем изучения именно таких сложных растворов» [2]. Накопление и обобщение знаний о термодинамических характеристиках реакций в растворах не потеряло свою актуальность, поскольку целенаправленное воздействие на химическую систему посредством растворителя относится к числу важнейших фундаментальных и практических задач [3-6].

Исследования влияния сольватации на термодинамику и кинетику реакций комплексообразования в смешанных растворителях проводятся в ИГХТУ и являются одним из основных научных направлений университета. В результате [7], был разработан комплексный подход к описанию роли растворителя в реакциях комплексообразования, включающий представления о растворителе как химическом реагенте и основанный на использовании термодинамических характеристик каждого реагента. В дальнейшем, на примере реакций комплексообразования аминных и карбоксилатных комплексов ионов *d*-металлов в водно-органических растворителях [8, 9], были установлены основные закономерности в изменении термодинамических характеристик комплексообразования и сольватации реагентов, на основании которых предложены способы прогнозирования изменения устойчивости комплексов и энергетики реакций комплексообразования при замене одного растворителя на другой.

Более чем за 40 лет исследований в этой области накоплен и обобщен материал:

- по термодинамике и кинетике реакций комплексообразования иона Ni^{2+} с аминами (аммиаком, этилендиамином, пиридином и дипиридиллом), включая кислотно-основные равновесия лигандов в смесях воды с метанолом, этанолом, ацетоном, диметилсульфоксидом, диметилформамидом, диметилацетамидом, ацетонитрилом, диоксаном и др.;

- по термодинамике реакций образования аминных (аммиак, этилендиамин, пиридин, дипиридил, метиламин, этиламин) и карбоксилатных (глицинат-ион, ацетат-ион) комплексов ионов Ni^{2+} , Cu^{2+} , Zn^{2+} , Cd^{2+} , Ag^{+} в смесях воды с этанолом, ацетоном и диметилсульфоксидом;

- по термодинамике комплексообразования ионов Ag^{+} с аминами (пиридин, дипиридил, этилендиамин, пиперидин) и с краун-эфиром 18-краун-6 в бинарных смесях неводных растворителей (диметилсульфоксид, диметилформамид, ацетонитрил, метанол);

- по термодинамике комплексообразования ионных и молекулярных комплексов с биологически активными лигандами и краун-эфиром 18-краун-6 в водных растворах этанола, диметилсульфоксида и ацетона.

Результаты этих работ опубликованы в более чем 250 научных трудах, среди которых монографии [7, 8, 10, 11] и статьи, список которых опубликован на сайте ИГХТУ [12]. Проведенные исследования позволили сделать существенный шаг к созданию научных основ для использования растворителя как средства управления процессами в жидкой фазе.

Разработка научных основ подбора эффективных растворителей для проведения химических процессов находится в непрерывном развитии. Научные знания накапливаются в динамике благодаря синтезу новых перспективных

лигандов, возможностям современной высокочувствительной аппаратуры для проведения экспериментов, прогрессу в расчетных методах квантово-химического моделирования и молекулярной динамики. Для решения задачи систематизации уже имеющегося [6-12] и постоянно нарабатываемого экспериментального материала была создана база данных «Термодинамика комплексообразования и сольватации в бинарных растворителях» (БД), которая обеспечивает быстрый поиск необходимых термодинамических характеристик комплексообразования и сольватации реагентов, а также информации об используемых методах исследований.

Разработка базы данных осуществлялась с помощью СУБД MS Access. Основным критерием при выборе СУБД была простота ее использования. СУБД MS Access:

- имеет интуитивно понятный интерфейс;
- предоставляет возможность обновления

БД не только специалистам в области разработки баз данных, но и авторизованным пользователям.

База данных:

- содержит гибкую систему сортировки данных по различным параметрам (химические формулы исследуемых веществ, термодинамические характеристики процессов комплексообразования, условия проведения экспериментов, выходные данные опубликованных статей);

- предусматривает гиперссылки на публикации для обращения к требуемым статьям.

Кроме этого, данная поисковая система имеет структуру, позволяющую адаптировать БД для систематизации данных, накопленных в различных областях фундаментальных и прикладных наук, расширяя, таким образом, области применения программного средства.

БД может находиться не только непосредственно на компьютере, но и на различных портативных носителях информации (например, на USB-флеш-накопителе).

Интерфейс БД представляет собой кнопочную форму (рисунки), обеспечивающую удобный и оперативный поиск хранимой в ней информации. Кнопочная форма также позволяет предотвратить изменение пользователем внутренней структуры базы данных, как намеренное, так и случайное.

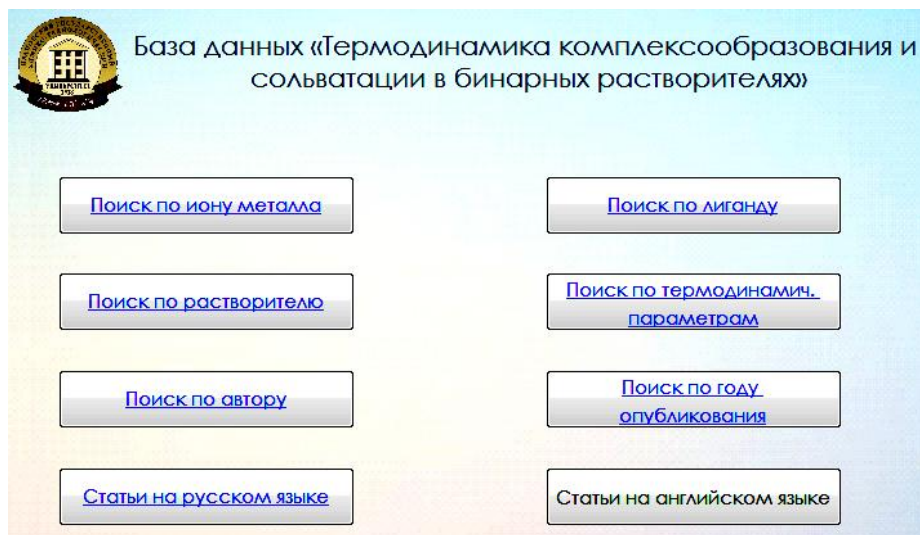


Рис. Интерфейс начальной диалоговой страницы базы данных
Fig. Interface of the home dialog page of the database

Наиболее значимые коммерческие базы термодинамических данных [1, 13-18], несмотря на несравнимо больший объем систематизированного материала, не всегда оперативно обновляют информацию о проведенных исследованиях в области комплексообразования в растворах, поскольку часть работ, выполненных учеными ИГХТУ и других научных школ Российской Федерации, опубликована на русском языке, что затрудняет доступ к ним иностранным разработчикам.

Национальный институт стандартов и технологии (NIST, США) [13], Международный союз теоретической и прикладной химии (IUPAC), отделение Американского химического общества «Chemical abstract service» [14], которые являются мировыми лидерами по систематизации и стандартизации опубликованных результатов исследований в области неорганической, органической, физической и структурной химии, предоставляют свободно [13, 15], в ограниченном режиме [16] и на коммерческой основе [17, 18] доступ к разработанным собственным базам данных, таким как SciFinder, The IUPAC Stability Constants Database «SCQuery for Analytical Chemistry» и др.

Разработка подобных поисковых систем достаточно сложна, что отражается в высокой стоимости коммерческого использования и, как следствие, в ограниченной доступности для широкого круга заинтересованных пользователей.

База данных «Термодинамика комплексообразования и сольватации в бинарных растворителях» не имеет аналогов, идея ее создания и разработки структуры является оригинальной и принадлежит авторам статьи. БД является простым, надежным и универсальным программным про-

дуктом, который позволяет получать нужную информацию и своевременно ее пополнять.

База данных находится в свободном доступе на сайте кафедры общей химической технологии ИГХТУ (<https://www.isuct.ru/e-publ/portal/node/4258>). Надеемся, что она может быть интересна специалистам в области создания новых функциональных материалов и лекарственных препаратов на основе молекулярных и ионных комплексов, разработчикам пилотных проектов, направленных на подбор оптимального состава растворителя для получения координационных

соединений с заранее заданными функциональными свойствами.

Данная БД может служить примером когнитивных технологий, которые объединяют знания, полученные в области термодинамики растворов с возможностями программных методов систематизации накопленной информации.

Работа выполнена в Институте термодинамики и кинетики химических процессов ИГХТУ в рамках государственного задания Министерства образования и науки Российской Федерации, проект № 2293.

ЛИТЕРАТУРА

1. **Abdulagatov I.M.** A global information-expert-system for thermophysical properties. TRC/NIST thermophysical database. Contribution of the russian publications and estimating their quality // *Материалы XIV Российской конференции (с международным участием) по теплофизическим свойствам веществ (PKTS - 14): в 2 т. Казань: Изд-во Отечество. 2014. С. 6-8.*
2. **Менделеев Д.И.** Основы химии. 5-е изд. СПб. 1889. 781 с.
3. **Фиалков Ю.А.** Растворитель как средство управления химическим процессом. Л.: Химия. 1990. 237 с.
4. **Коваленко Г.М.** Разработка условий получения интерполимерных комплексов в бинарных растворителях и возможностей их применения. Дис.. к.т.н. М.: МГУДТ. 2011. 136 с.
5. **Бокша М.Ю.** Растворитель как рецептурный фактор управления процессом переработки и совмещения полимеров. Автореф. дис. ... к.т.н. М.: МИТХТ им. М.В. Ломоносова. 2010. 172 с.
6. **Душина С.В., Шарнин В.А., Александрыйский В.В.** // *Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2012. Т. 55. Вып. 11. С. 3-13.*
7. **Шорманов В.А.** Комплексообразование в неводных растворах. М.: Наука. 1989. С. 143-189.
8. **Шорманов В.А., Шарнин В.А.** Достижения и проблемы теории сольватации: структурно-термодинамические аспекты. Гл.6. / Отв. редактор Кутепов А.М. М.: Наука. 1998. С. 172-205.
9. **Шарнин В.А.** // *Изв. вузов. Химия и хим. технология. 2005. Т. 48. Вып. 7. С. 44-53.*
10. **Usacheva T.R., Sharnin V.A., Matteoli E.** Glycine. Biosynthesis, physiological functions and commercial uses. Ch.1. New York. Nova Science Publishers. 2013. P. 1-33.
11. **Usacheva T.R., Sharnin V.A., Matteoli E.** Advances in Chemistry Research. / Ed. J.C. Taylor. V. 22. Ch. 5. New York. Nova Science Publishers. P. 127-157.
12. https://www.isuct.ru/e-publ/portal/sites/ru.e-publ.portal/files/dep/oht/works_2014.doc/
13. <http://www.nist.gov/srd/>
14. <http://www.cas.org>
15. <http://cds.rsc.org/externalresources.asp>
16. <http://cds.rsc.org/index.asp>
17. <https://scifinder.cas.org/>
18. <http://www.acadsoft.co.uk/>

REFERENCES

1. **Abdulagatov I.M.** A global information-expert-system for thermophysical properties. TRC/NIST thermophysical database. Contribution of the russian publications and estimating their quality // *Proceedings of XIV Russian conference (with Intern. participation) on heat and physical properties of substances (RKTS-14) in 2 Vol. Kazan: Otechestvo. 2014. P. 6-8 (in Russian).*
2. **Mendeleev D.I.** Bases of chemistry. 5th ed. S. Petersburg. 1889. 781 p. (in Russian).
3. **Fialkov Yu.A.** Solvent as the method of control of chemical process. L.: Khimiya. 1990. 237 p. (in Russian).
4. **Kovalenko G.M.** Development of conditions of interpolymer complexes in binary solvents and their application possibilities. Dissertation for candidate degree on technical sciences. M.: MSUDT. 2011. 136 p. (in Russian).
5. **Boksha M.Yu.** Solvent as a prescription factor of control of recycling process and matching of polymers. Extended abstract of candidate dissertation on technical sciences. M.: M.V. Lomonosov MUFCT. 2010. 172 p. (in Russian).
6. **Dushina S.V., Sharnin V.A., Aleksandriyskiy V.V.** // *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol. 2012. V. 55. N 11. P. 3-13 (in Russian).*
7. **Shormanov V.A.** Complex formation in non-aqueous solutions. M.: Nauka. 1989. P. 143-189 (in Russian).
8. **Shormanov V.A., Sharnin V.A.** Progress and problems of solvation theory: structural-thermodynamical aspects. Ch.6. / Ed. by Kutepov A.M. M.: Nauka. 1998. P. 172-205 (in Russian).
9. **Sharnin V.A.** // *Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol. 2005. V. 48. N 7. P. 44-53 (in Russian).*
10. **Usacheva T.R., Sharnin V.A., Matteoli E.** Glycine. Biosynthesis, physiological functions and commercial uses. Ch.1. New York. Nova Science Publishers. 2013. P. 1-33.
11. **Usacheva T.R., Sharnin V.A., Matteoli E.** Advances in Chemistry Research. / Ed. J.C. Taylor. V. 22. Ch. 5. New York. Nova Science Publishers. P. 127-157.
12. https://www.isuct.ru/e-publ/portal/sites/ru.e-publ.portal/files/dep/oht/works_2014.doc/
13. <http://www.nist.gov/srd/>
14. <http://www.cas.org>
15. <http://cds.rsc.org/externalresources.asp>
16. <http://cds.rsc.org/index.asp>
17. <https://scifinder.cas.org/>
18. <http://www.acadsoft.co.uk/>

Поступила в редакцию 23.11.2015 г.

Принята к опубликованию 04.03.2016 г.