**Энергия Гиббса переноса криптанда[2.2.2] из воды в водно-диметилсульфоксидный и водно-этанольный растворители**

***Католикова А.С.***

*Студентка, 4 курс бакалавриата*

*Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия*

*E-mail:* [*katolikova17@mail.ru*](mailto:katolikova17@mail.ru)

Криптанд[2.2.2] представляет собой объемный полициклический лиганд, в структуре которого узловые атомы азота соединены тремя оксиэтиленовыми цепочками, каждая из которых содержит два эфирных атома кислорода (N(CH2CH2OCH2CH2OCH2CH2)3N).

В работе методом распределения частиц между двумя несмешивающимися фазами при температуре T=298 K определены значения энергии Гиббса переноса криптанда[2.2.2] из воды в водно-диметилсульфоксидный растворитель в диапазоне концентраций 0.0÷0.8 мол.д. ДМСО и в водно-этанольный растворитель в диапазоне концентраций 0.0÷0.5 мол.д. EtOH. В качестве неполярной фазывыбран гексан*.*

Коэффициенты распределения криптанда[2.2.2] между несмешивающимися фазами и значения энергии Гиббса переноса рассчитывали по уравнениям:

k1 = [Cryp]hex/[Cryp]w,

k2= [Cryp]hex/[Cryp]mix,

ΔtrGо = RT ln ([Cryp]w / [Cryp]mix) = RT ln (k2 / k1),

где [Cryp]i – равновесная концентрация криптанда[2.2.2] в воде (w), в водно-диметилсульфоксидном (водно-этанольном) растворителе (mix), в гексане (hex).

В табл. 1 приведены полученные в настоящей работе данные, а также значения энергии Гиббса переноса криптанда[2.2.2] из воды в диметилсульфоксид, взятое из [1,2] и из воды в этанол, полученное расчетным путем в работе [3].

Таблица 1. Коэффициенты распределения криптанда[2.2.2] между несмешивающимися фазами вода−гексан (k1), водно-диметилсульфоксидный (водно-этанольный) растворитель−гексан (k2) и энергия Гиббса переноса криптанда[2.2.2] из воды в водно-диметилсульфоксидный (водно-этанольный) растворитель, Т = 298 K.

|  |  |  |  |  |  |  |  |  |  |
| --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- | --- |
| ХДМСО, (ХEtOH) мол.д. | 0.0 | 0.1 | 0.2 | 0.3 | 0.4 | 0.5 | 0.6 | 0.8 | 1.0 |
| k1 | 0.069 |  |  |  |  |  |  |  |  |
| k2(гексан/H2O-ДМСО) |  | 0.289 | 0.385 | 0.521 | 0.551 | 0.637 | 0.667 | 0.811 |  |
| k2(гексан/H2O-EtOH) |  | 0.077 | 0.148 | 0.170 | 0.175 | 0.232 |  |  |  |
| ΔtrG°(H2O→H2O-ДМСО) | 0.0 | 3.51 | 4.26 | 5.01 | 5.15 | 5.51 | 5.62 | 6.11 | 6.44[1]  6.99[2] |
| ΔtrG°(H2O→H2O-EtOH) | 0.0 | 0.3 | 1.9 | 2.2 | 2.3 | 3.0 |  |  | 4.35[3] |

Таким образом по результатам эксперимента было установлено, что с ростом содержания как ДМСО, так и этанола в растворе значение энергии Гиббса переноса криптанда[2.2.2] из воды в водно-органический растворитель увеличивается, что свидетельствует об ослаблении сольватации данного макроцикла.

**Литература**

1. Marcus Y. // Rev. Anal. Chem. 2004. Vol. 23. N 4. Р. 269. doi 10.1515/REVAC.2004.23.4.269

2. Abraham M.H., Ling H.C. // J. Chem. Soc. Farad. Trans. I. 1984. Vol. 80. P. 3445. <https://doi.org/10.1039/F19848003445>

3. Namor A.F.D., de Ponce H.B., Viguria E.C. // J. Chem. Soc. Farad. Trans. I. 1986. V. 82. P. 2811. <https://doi.org/10.1039/F19868202811>