

ЭНЕРГИЯ ГИББСА ПЕРЕНОСА КРИПТАНДА[2.2.2] ИЗ ВОДЫ В ВОДНО-ДИМЕТИЛСУЛЬФОКСИДНЫЙ РАСТВОРИТЕЛЬ

© 2024 г. В. А. Исаева¹, Е. И. Погодина¹, А. С. Католикова¹, К. В. Граждан^{1,*}

¹ Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, 153000 Россия

*e-mail: grazhdan_kv@isuct.ru

Поступило в редакцию 5 марта 2024 г.

После доработки 10 апреля 2024 г.

Принято к печати 12 апреля 2024 г.

В работе представлены значения энергии Гиббса переноса криптанада[2.2.2] из воды в смешанный растворитель вода–диметилсульфоксид с переменным содержанием органического компонента. Определение энергии Гиббса переноса выполнено методом межфазного распределения вещества между несмешивающимися фазами при температуре 298 К. Установлено, что с ростом концентрации диметилсульфоксида в растворе происходит ослабление сольватации криптанада[2.2.2].

Ключевые слова: криптан, сольватация, коэффициент распределения, энергия Гиббса, водно-диметилсульфоксидный растворитель

DOI: 10.31857/S00444460X24020106, **EDN:** GUURTI

ВВЕДЕНИЕ

Неводные и водно-органические растворители находят широкое применение в науке и технологии: в аналитических целях [1–4], химическом синтезе, электрохимических, фармацевтических производствах, в электронике, гидрометаллургии [4–11]. Эффекты сольватации в многокомпонентных растворах оказывают влияние на равновесие, кинетику и механизм жидкофазных процессов [11–13]. Информация о термодинамических параметрах пересольватации ионов и молекул при переходе от одного растворителя к другому необходима для интерпретации реакционной способности заряженных и нейтральных частиц в растворах, прогнозирования ускоряющего либо ингибирующего действия растворителя на химические реакции, влияния среды на селективность процессов и смещение химического равновесия [11–13]. Этим определяется актуальность многочисленных исследований сольватации частиц в неводных и смешанных растворителях, включающих как экспериментальные,

так и расчетные методы определения термодинамических характеристик процесса [11, 14, 15].

В настоящей работе поставлена задача определения значений энергии Гиббса переноса криптанада[2.2.2] из воды в водно-диметилсульфоксидный растворитель. Диметилсульфоксид и его смеси с водой используются в электрохимических процессах, биологических исследованиях, процессах экстракции, в косметологии, фармацевтике, кожевенном производстве [8, 10, 12, 16, 17]. Криптан, благодаря высокой селективности связывания катионов и анионов, находят применение как экстрагенты для металлов, высокоселективные сорбенты, ионофоры, катализаторы межфазного переноса, для аналитического определения микрокомпонентов в природных и промышленных объектах, для синтеза препаратов медико-фармацевтического назначения [18–20]. Применение в процессах с участием криптанов неводных и смешанных растворителей, способных в том числе повышать селективность связывания ионов [13, 21], стимулирует исследования, связанные с определением термодинамических параметров сольватации макроциклов.

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для определения энергии Гиббса переноса криптана[2.2.2] из воды в водно-диметилсульфоксидный растворитель использовали метод распределения частиц между двумя несмешивающимися фазами. В качестве неполярной фазы в настоящей работе был выбран гексан. При выборе неполярного растворителя, который не смешивался бы с водными растворами диметилсульфоксида, опирались на миксотропный ряд растворителей [22], а также данные работы [23], в которой рефрактометрическим методом проведен контроль смешиваемости системы вода–диметилсульфоксид–гексан, на основании чего установлено, что гексан не смешивается с водно-диметилсульфоксидным растворителем в области концентраций диметилсульфоксида (ДМСО) 0.0–0.9 мол. доли.

Для расчета энергий Гиббса переноса криптана[2.2.2] из воды в водно-диметилсульфоксидный растворитель использовали экспериментально полученные значения коэффициентов распределения криптана[2.2.2] между несмешивающимися фазами вода–гексан (k_1) и водно-диметилсульфоксидный растворитель – гексан (k_2):

$$\Delta_{\text{tr}}G^\circ = RT \ln([\text{Cryp}]^w/[\text{Cryp}]^{\text{mix}}) = RT \ln(k_2/k_1). \quad (1)$$

Коэффициенты распределения криптана[2.2.2] между несмешивающимися фазами рассчитывали по уравнениям (2), (3):

$$k_1 = [\text{Cryp}]^{\text{hex}}/[\text{Cryp}]^w, \quad (2)$$

$$k_2 = [\text{Cryp}]^{\text{hex}}/[\text{Cryp}]^{\text{mix}}, \quad (3)$$

где $[\text{Cryp}]^i$ – равновесная концентрация криптана[2.2.2] в воде (w), водно-диметилсульфоксидном растворителе (mix) или гексане (hex).

Погрешность определения k_1 и k_2 оценивали, как среднеквадратичное отклонение результатов отдельных измерений от среднего значения измеряемой величины, исходя из обработки результатов параллельных опытов. Для оценки погрешности значений ΔG° переноса криптана[2.2.2] из воды в растворитель вода-диметилсульфоксид использовали формулы определения погрешности косвенно определяемых величин [24].

Результаты определения коэффициентов распределения криптана[2.2.2] между несмешивающимися фазами вода–гексан и водно-диметилсульфоксидный растворитель–гексан приведены в табл. 1. Данные табл. 1 показывают, что, несмотря на значительный рост величины k_2 с повышением содержания ДМСО в растворе, в целом значения коэффициентов распределения криптана[2.2.2] между водно-диметилсульфоксидным растворителем и гексаном не превышают единицы, что свидетельствует о термодинамической невыгодности переноса криптана[2.2.2] из смешанного в безводный органический неполярный растворитель.

Значения энергий Гиббса переноса криптана[2.2.2] из воды в растворитель вода–ДМСО, рассчитанные по коэффициентам распределения, приведены в табл. 1. Собственные данные дополнены значениями ΔG° переноса криптана[2.2.2] из воды в диметилсульфоксид, взятыми из работ [25, 26]. Полученные нами результаты и данные [25, 26] свидетельствуют, что насыщение раствора органическим соразтворителем приводит к ослаблению сольватации макроцикла.

Перед проведением эксперимента по определению энергии Гиббса переноса криптана[2.2.2] из воды в водно-диметилсульфоксидный растворитель была сделана попытка оценить эту величину рас-

Таблица 1. Коэффициенты распределения криптана[2.2.2] между несмешивающимися фазами вода–гексан (k_1), водно-диметилсульфоксидный растворитель–гексан (k_2) и энергия Гиббса переноса криптана[2.2.2] из воды в водно-диметилсульфоксидный растворитель при 298 К.

$x_{\text{ДМСО}}$, мол. доля	$k_1 \pm 0.029$	$k_2 \pm 0.039$	$\Delta_{\text{tr}}G^\circ$, кДж/моль
0.0	0.069		0.0
0.1		0.289	3.51
0.2		0.385	4.26
0.3		0.521	5.01
0.4		0.551	5.15
0.5		0.637	5.51
0.6		0.667	5.62
0.8		0.811	6.11
1.0			6.44 [25] 6.99 [29]

четным путем, исходя из литературных значений $\Delta_{tr}G^\circ(\text{Ag}^+)$ [27], $\Delta_{tr}G^\circ([\text{AgCryp}]^+)$ [28] из воды в смеси вода–ДМСО и значений констант устойчивости в водно-диметилсульфоксидных растворах криптанного комплекса серебра(I) [29]:

$$\Delta_{tr}G_r^\circ = -2.303RT(\lg K^{\text{mix}} - \lg K^{\text{w}}), \quad (4)$$

$$\Delta_{tr}G_r^\circ = \Delta_{tr}G^\circ([\text{AgCryp}]^+) - \Delta_{tr}G^\circ(\text{Cryp}) - \Delta_{tr}G^\circ(\text{Ag}^+), \quad (5)$$

где $\lg K^{\text{mix}}$ и $\lg K^{\text{w}}$ – константы устойчивости комплекса серебра(I) с криптаном[2.2.2] в водно-диметилсульфоксидном и водном растворах соответственно.

Результаты расчета не позволили достоверно оценить параметры переноса криптана[2.2.2] из воды в растворитель вода–диметилсульфоксид, поскольку полученная зависимость $\Delta_{tr}G^\circ(\text{Cryp}) = f(x_{\text{ДМСО}})$ (рис. 1) носит немонотонный характер и противоречит данным [25, 26]. Несоответствие результатов расчета экспериментальным данным частично можно объяснить различием в условиях определения величин, используемых при расчете в уравнении (5) ($T = 298 \text{ К}$ [27, 29], 303 К [28]), а также наложением погрешностей величин, представленных в работах [27–29].

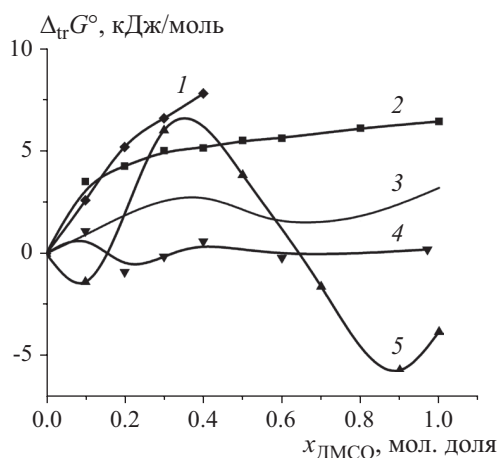


Рис. 1. Изменение энергии Гиббса переноса из воды в водно-диметилсульфоксидный растворитель: 1 – этилендиамина [36], 2 – криптана[2.2.2] (экспериментальное), 3 – реакционных центров криптана[2.2.2] [29], 4 – 18-краун-6-эфира [37], 5 – криптана[2.2.2] [расчет по уравнению (5)].

Известно, что термодинамические параметры сольватации определяются вкладом функциональных групп растворенной молекулы [30–33]. Простой подход к расчету термодинамических параметров сольватации сложных химических соединений в растворах по аддитивности групповых вкладов вызывает затруднения, поскольку не учитывает взаимное влияние атомов и групп в молекуле, стерические эффекты [34, 35], тем не менее сопоставление термодинамических характеристик соединений, содержащих схожие структурные фрагменты, позволяет оценить, пересольватация каких функциональных групп вносит основной вклад в параметры пересольватации молекулы. Трехмерный макроцикл криптан[2.2.2] состоит из двух узловых атомов азота, соединенных оксиэтиленовыми цепочками $[\text{N}(\text{CH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2\text{OCH}_2\text{CH}_2)_3\text{N}]$. Сравнение $\Delta_{tr}G^\circ$ криптана[2.2.2] с энергией Гиббса переноса этилендиамина [36] и 18-краун-6-эфира [37] из воды в водно-диметилсульфоксидные смеси позволяет предположить, что ослабление сольватации криптана[2.2.2] в смешанном растворителе определяется в основном десольватацией атомов азота макроцикла (рис. 1). Этому не противоречат данные работы [29], в которой рассчитана энергия Гиббса переноса реакционных центров криптана[2.2.2] из воды в смеси вода–ДМСО (рис. 1) для процесса комплексообразования криптата серебра(I), если учесть склонность Ag^+ к линейной координации и повышенное сродство к атомам азота по сравнению с атомами кислорода [38].

Рассмотрение значений энергии Гиббса переноса из воды в водно-диметилсульфоксидный растворитель различных гетерофункциональных соединений показывает, что увеличение концентрации ДМСО в растворе может приводить как усилению, так и к ослаблению сольватации частиц. Результаты ряда исследований показывают, что при переходе от воды к водно-диметилсульфоксидным смесям наблюдается усиление сольватации соединений, которые содержат ароматические фрагменты, нитрогруппы, амидные группы (синапиновой кислоты [39], барицитиниба [40], бергерина [41], производных пиридазинона [42], нитробензамида [43], гистидина [44], мелоксикама [45], фенформина [46], никотинамида [47], изотретиноина [48], кумарина [49], тиаметоксама [50], бензойной кислоты [51], кверцетина [52], флавоноида нарингина [53], микофлавина [54])

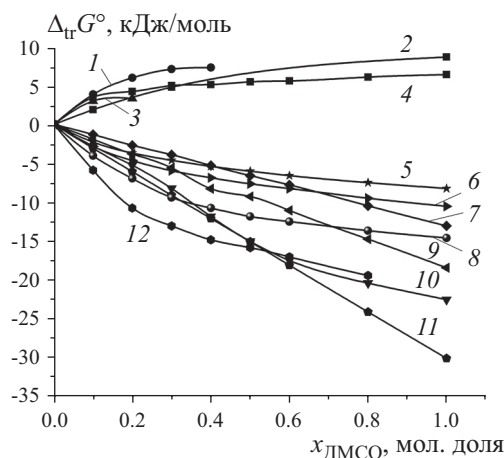


Рис. 2. Изменение энергии Гиббса переноса из воды в водно-диметилсульфоксидный растворитель: 1 – глицина [55], 2 – аммиака [57], 3 – глицилглицина [56], 4 – криптанда[2.2.2], 5 – фенформина [46], 6 – нитробензамида [43], 7 – бергенина [41], 8 – тиаметоксама [50], 9 – синапиновой кислоты [39], 10 – мелоксикама [45], 11 – изотретиноина [48], 12 – гистидина [44].

(рис. 2). Для соединений, содержащих аминогруппы (глицина [55], глицилглицина [56], этилендиамина [36]), аммиака [57], как и для криптанда[2.2.2], характерен рост положительного значения энергии Гиббса переноса из воды в водно-диметилсульфоксидный растворитель (рис. 2). В работе [58] также установлено, что перенос аминов (метил-, диметил- и триметиламина, моноэтиламина, пропиламина) из воды в диметилсульфоксид сопровождается ослаблением их сольватной оболочки.

В литературе процесс пересольватации криптанда[2.2.2] в смешанных растворителях охарактеризован данными об изменении энергии Гиббса переноса макроцикла из воды в смеси вода–ацетонитрил [59]. В работе [59] установлено, что в отличие от водно-диметилсульфоксидных смесей в водно-ацетонитрильном растворителе ослабление сольватации криптанда[2.2.2] происходит лишь при высоком содержании ацетонитрила. При переходе от воды к индивидуальным органическим растворителям ослабление сольватации криптанда[2.2.2] наблюдается в преобладающем большинстве случаев. Данные работ [25, 26, 60] демонстрируют, что перенос криптанда[2.2.2] из воды в неводные растворители (диметилформамид, пропиленкарбонат, нитрометан, жидкие углеводороды, низшие спирты,

эфиры, нитрилы) характеризуется положительной величиной $\Delta_{tr}G^\circ$. Отрицательное значение энергии Гиббса переноса криптанда[2.2.2] наблюдается при переходе от воды к хлороформу и дихлорметану [25].

Сольватирующая способность растворителя определяется рядом параметров, такими как диэлектрическая проницаемость растворителя, его склонность к автопротолизу, полярность, донорно-акцепторные числа и др. [61–67]. Взаимодействия между молекулами растворенного вещества и растворителя устанавливаются с участием разных по природе сил. Зачастую влияние концентрации органического соразтворителя в водно-органических смесях на количественные характеристики процесса сольватации можно оценить с электростатических позиций [61, 68]. В данной работе математическая обработка экспериментальных результатов показала отсутствие линейной корреляции изменения энергии Гиббса переноса криптанда[2.2.2] из воды в смеси вода–ДМСО от обратных значений диэлектрической проницаемости ($1/\epsilon$) [68] и показателей констант автопротолиза (pK_s) [69] водно-диметилсульфоксидного растворителя (рис. 3), что может указывать на проявление специфической сольватации [70]. Для оценки роли специфической сольватации используют донорно-акцепторные числа (D_N (ккал/моль), A_N) [65, 66, 71]. Молекулы, содержащие донорные

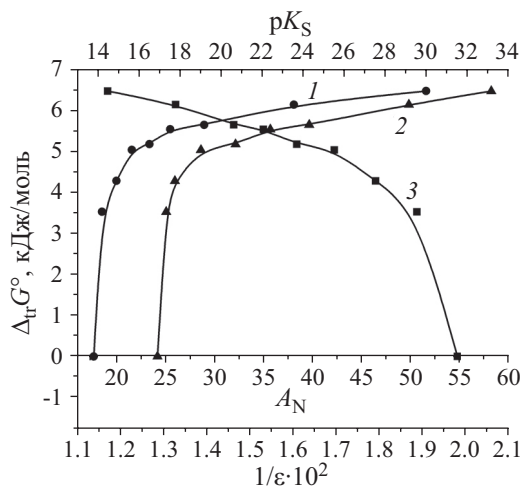


Рис. 3. Функции переноса криптанда[2.2.2] из воды в водно-диметилсульфоксидный растворитель: 1 – $\Delta_{tr}G^\circ(\text{Cryp}) = f(pK_s)$, 2 – $\Delta_{tr}G^\circ(\text{Cryp}) = f(1/\epsilon)$, 3 – $\Delta_{tr}G^\circ(\text{Cryp}) = f(A_N)$.

атомы азота и кислорода, характеризуются высоким значением донорных чисел [например, $D_N = 59.0$ (аммиак [72]), $D_N = 50.0$ (этилендиамин [73]), $D_N = 37.1$ (триэтиламин [74]), $D_N = 19.2$ (диэтиловый эфир [74])], что позволяет судить о высокой электронодонорной способности криптанада[2.2.2]. Соответственно, переход от воды ($D_N = 18$ [75]) к диметилсульфоксиду ($D_N = 29.8$ [71], $D_N = 30.0$ [76]) не создает благоприятные условия для сольватации макроцикла. Зависимость $\Delta_c G^\circ(\text{Cryp})$ от акцепторного числа водно-диметилсульфоксидного растворителя [77] описывается линейной корреляцией, характеризующей определенный вклад специфических взаимодействий в сольватации криптанада[2.2.2], в области концентраций ДМСО 0.3–1.0 мол. доли (рис. 3). Нелинейность зависимостей, представленных на рис. 3, в области малых концентраций диметилсульфоксида может быть связана со структурной перестройкой растворителя при добавлении ДМСО (нарушением высокоструктурированной H-сетки воды, образованием гидратов $n\text{ДМСО} \cdot m\text{H}_2\text{O}$ [78–82]). Некоторые физико-химические свойства и термодинамические параметры водно-диметилсульфоксидных смесей изменяются экстремально в зависимости от концентрации диметилсульфоксида, проходя через максимум или минимум при $x_{\text{ДМСО}} = 0.3\text{--}0.4$ мол. доли [78–86]). Полученные в работе зависимости $\Delta_c G^\circ(\text{Cryp})$ от содержания ДМСО и свойств водно-диметилсульфоксидных смесей имеют перегиб в данной области составов смешанного растворителя.

ВЫВОДЫ

Таким образом в настоящей работе установлено, что увеличение концентрации диметилсульфоксида в водно-органическом растворе приводит к ослаблению сольватации криптанада[2.2.2]. Полученные результаты дополняют справочные данные по термодинамическим свойствам криптанов.

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНАЯ ЧАСТЬ

В работе использовали криптан[2.2.2] (Merck KGaA, Германия, содержание основного компонента $\geq 99\%$), воду (бидистиллят), гексан (ХЧ), диметилсульфоксид (ХЧ), хлорную кислоту (ХЧ).

Определение энергии Гиббса переноса криптанада[2.2.2] из воды в водно-диметилсульфоксидный

растворитель методом распределения частиц между двумя несмешивающимися фазами выполнено при температуре 298 К. Исходный водно-диметилсульфоксидный (водный) раствор криптанада[2.2.2] готовили с концентрацией $8 \cdot 10^{-3}$ моль/л. Для проведения эксперимента в герметичную термостатируемую ячейку помещали равные аликвоты (по 10 мл) водно-диметилсульфоксидного (водного) раствора криптанада[2.2.2] и гексана. В течение 8 ч проводили перемешивание. После отстаивания гетерогенной системы в течение 15 ч отбирали пробу нижнего водно-диметилсульфоксидного (водного) слоя. Равновесную концентрацию криптанада[2.2.2] в нижнем слое устанавливали методом потенциометрического титрования по хлорной кислоте, раствор которой готовился на основе водно-диметилсульфоксидного растворителя соответствующего состава. Равновесную концентрацию криптанада[2.2.2] в верхнем гексановом слое рассчитывали по разности исходной концентрации криптанада[2.2.2] и равновесной в водно-диметилсульфоксидном (водном) слое.

ФИНАНСОВАЯ ПОДДЕРЖКА

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки России (соглашение № 075-15-2021-671) с использованием ресурсов Центра коллективного пользования научным оборудованием Ивановского государственного химико-технологического университета.

КОНФЛИКТ ИНТЕРЕСОВ

Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Ferry J., Larson R.A.* // J. Chromatogr. Sci. 1991. Vol. 29. N 11. P. 476. doi 10.1093/chromsci/29.11.476
2. *Alzakia F.I., Sun W., Pennycook S.J., Tan S.C.* // ACS Appl. Mater. Interfac. 2020. Vol. 12. N 2. P. 3096. doi 10.1021/acsami.9b14510
3. *Liu L., Li B., Ouyang J., Wu Y.* // Food Chem. 2020. Vol. 333. P. 127488. doi 10.1016/j.foodchem.2020.127488
4. *Eugene-Osoikhia T.T., Emesiani M.C.* // Chem. Search J. 2019. Vol. 10. N 2. P. 1. <http://www.ajol.info/index.php/csj>
5. *Сатъясилан М., Сатишкумар К., Неполрадэ А., Малик Д.А., Шупенюк В.* // Макрогетероциклы. 2022. Т. 15. № 1. С. 59. doi 10.6060/mhc224206n

6. Muhieddine M.H., Viswanath S.K., Armstrong A., Galindo A., Adjiman C.S. // *Chem. Eng. Sci.* 2022. Vol. 264. P. 118125. doi 10.1016/j.ces.2022.118125
7. Kurada K.V., Agarwal A., De S. // *Polym. Int.* 2020. Vol. 69. P. 920. doi 10.1002/pi.6034
8. Трубачев А.В., Суханов Е.А. // *Аналитика и контроль.* 2007. Т. 11. № 4. С. 242.
9. Zaitsev D., Egorov I., Agafonov V. // *Chemosensors.* 2022. Vol. 10. N 3. P. 111. doi 10.3390/chemosensors10030111
10. Torkaman P., Yoshimura A., Lavkulich L.M., Veiga M.M. // *Metals.* 2023. Vol. 13. N 11. P. 1855. doi 10.3390/met13111855
11. Maldonado A.M., Basdogan Y., Berryman J.T., Rempe S.B., Keith J.A. // *J. Chem. Phys.* 2020. Vol. 152. P. 130902. doi 10.1063/1.5143207
12. Guo-Zhu J., Jie Q. // *Fluid Phase Equilibr.* 2014. Vol. 365. P. 5. doi 10.1016/j.fluid.2013.12.014
13. Gholiee Y., Salehzadeh S. // *J. Mol. Liq.* 2020. Vol. 309. P. 113149. doi 10.1016/j.molliq.2020.113149
14. Li Z., Shen Y., Huang C. // *J. Chem. Thermodyn.* 2023. Vol. 185. P. 107109. doi 10.1016/j.jct.2023.107109
15. Inoue H., Zhou H., Ando H., Nakagawa S., Yamada T. // *Chem. Sci.* 2024. Vol. 15. P. 146. doi 10.1039/D3SC04955H
16. Liu C., Zhao D., Zhang H., Wang Y., Bai H., Liu Q. // *Fluid Phase Equilibr.* 2021. Vol. 550. P. 113236. doi 10.1016/j.fluid.2021.113236
17. Robertson H., Nelson A.R.J., Prescott S.W., Webber G.B., Wanless E.J. // *Polym. Chem.* 2023. Vol. 14. P. 1526. doi 10.1039/D2PY01487D
18. Хираока М. Краун-соединения. Свойства и применение. М.: Мир, 1986. 363 с.
19. Blevins D.W., Rigney G.H., Fang M.Y., Akula M.R., Osborne G.R. // *Nucl. Med. Biol.* 2019. Vol. 74. P. 41. doi 10.1016/j.nucmedbio.2019.07.008
20. Amendola A., Bergamaschi G., Boiocchi M., Albertoc R., Braband H. // *Chem. Sci.* 2014. Vol. 5. P. 1820. doi 10.1039/c3sc53504e
21. Arnaud-Neu F., Spiess B., Schwing-Weill M.J. // *Am. Chem. Soc.* 1982. Vol. 104. N 21. P. 5641. doi 10.1021/ja00385a014
22. Рудаков О.Б., Востров И.А., Федоров С.В., Филипов А.А., Селеменев В.Ф., Приданцев А.А. Спутник хроматографиста. Методы жидкостной хроматографии. Воронеж: Водолей, 2004. 528 с.
23. Граждан К.В., Гамов Г.А., Душина С.В., Шарнин В.А. // *ЖФХ.* 2012. Т. 86. № 11. С. 1802; *Grazhdan K.V., Gamov G.A., Dushina S.V., Sharnin V.A.* // *Russ. J. Phys. Chem. (A).* 2012. Vol. 86. N 11. P. 1679. doi 10.1134/S0036024412110131
24. Аксенова Е.Н. Элементарные способы оценки погрешностей результатов прямых и косвенных измерений. М.: МИФИ, 2003. 16 с.
25. Marcus Y. // *Rev. Anal. Chem.* 2004. Vol. 23. N 4. P. 269. doi 10.1515/REVAC.2004.23.4.269
26. Abraham M.H., Ling H.C. // *J. Chem. Soc. Farad. Trans. I.* 1984. Vol. 80. P. 3445. doi 10.1039/F19848003445
27. Kalidas C., Hefter G., Marcus Y. // *Chem. Rev.* 2000. Vol. 100. N 3. P. 819. doi 10.1021/cr980144k
28. Kalidas C., Raghunath R. // *Phys. Chem. Liq.* 1999. Vol. 37. P. 175. doi 10.1080/00319109908045124
29. Зяткова Л.А., Гречин А.Г., Афанасьев В.Н. // *Ко-орд. хим.* 2004. Т. 30. № 11. С. 854; *Zyat'kova L.A., Grechin A.G., Afanas'ev V.N.* // *Russ. J. Coord. Chem.* 2004. Vol. 30. N 11. P. 805. doi 10.1023/B:RUCO.0000047468.78685.78
30. Jimenez-Gravalos F., Diaz N., Francisco E., Martin-Pendas A., Suarez D. // *Chem. Phys. Chem.* 2018. Vol. 19. N 24. P. 3425. doi 10.1002/cphc.201800733
31. Chung Y., Vermeire F.H., Wu H., Walker P.J., Abraham M.H., Green W.H. // *J. Chem. Inf. Model.* 2022. Vol. 62. N 3. P. 433. doi 10.1021/acs.jcim.1c01103
32. Tomar D.S., Asthagiri D., Weber V. // *Biophys. J.* 2013. Vol. 105. N 6. P. 1482. doi 10.1016/j.bpj.2013.08.011
33. Soteris I., Orozco M., Javier L.F. // *Brazil. J. Phys.* 2004. Vol. 34. N 1. P. 48. doi 10.1590/S0103-97332004000100008
34. Батов Д.В. // *От химии к технологии.* 2020. Т. 2. № 2. С. 1. doi 10.52957/27821900_2021_02_8
35. Ureel Y., Vermeire F.H., Sabbe M.K., Van Geem K.M. // *Chem. Eng. J.* 2023. Vol. 472. N 15. P. 144874. doi 10.1016/j.cej.2023.144874
36. Шарнин В.А., Усачева Т.Р., Кузьмина И.А., Гамов Г.А., Александровский В.В. Комплексобразование в неводных средах. М.: Ленанд, 2019. 304 с.
37. Усачева Т.Р., Кузьмина И.А., Шарнин В.А., Сидоренко Н.С., Воронина С.И. // *ЖФХ.* 2011. Т. 85. № 6. С. 1047; *Usacheva T.R., Kuz'mina I.A., Sharnin V.A., Sidorenko N.S., Voronina S.I.* // *Russ. J. Phys. Chem. (A).* 2011. Vol. 85. N 6. P. 952. doi 10.1134/S0036024411060331
38. Thaler A., Cox B.G., Schneider H. // *Inorg. Chim. Acta.* 2003. Vol. 351. P. 123. doi 10.1016/S0020-1693(03)00193-2
39. Shakeel F., Haq N., Salem-Bekhit M.M., Raish M. // *J. Mol. Liq.* 2017. Vol. 225. P. 833. doi 10.1016/j.molliq.2016.11.009
40. Alshahrani S.M., Shakeel F. // *Molecules.* 2020. Vol. 25. N 9. P. 2124. doi 10.3390/molecules25092124
41. Shakeel F., Mothana R.A., Haq N., Siddiqui N.A., Al-Oqail M.M., Al-Rehaily A.J. // *J. Mol. Liq.* 2016. Vol. 220. P. 823. doi 10.1016/j.molliq.2016.05.015
42. Shakeel F., Alshehri S., Imran M., Haq N., Alanazi A., Anwer M.K. // *Molecules.* 2020. Vol. 25. N 1. P. 171. doi 10.3390/molecules25010171
43. Yuan Y., Farajtabar A., Kong L., Zhao H. // *J. Chem. Thermodyn.* 2019. Vol. 136. P. 123. doi 10.1016/j.jct.2019.05.007

44. Li W., Farajtabar A., Xing R., Zhu Y., Zhao H. // J. Chem. Eng. Data. 2020. Vol. 65. N 4. P. 1695. doi 10.1021/acs.jced.9b01051
45. Tinjaca D.A., Martinez F., Almanza O.A., Pena M.A., Jouyban A., Acree Jr.W.E. // Liquids. 2022. Vol. 2. P. 161. doi 10.3390/liquids2030011
46. Zhao X., Farajtabar A., Han G., Zhao H. // J. Chem. Thermodyn. 2020. Vol. 144. P. 106085. doi 10.1016/j.jct.2020.106085
47. Cysewski P., Przybyłek M., Kowalska A., Tymorek N. // Int. J. Mol. Sci. 2021. Vol. 22. N 14. P. 7365. doi 10.3390/ijms22147365
48. Shakeel F., Haq N., Alshehri S., Alenazi M., Alwhaibi A., Alsarra I.A. // Molecules. 2023. Vol. 28. P. 7110. doi 10.3390/molecules28207110
49. Ganai S., Mukherjee P., Mahali K., Saha A., Hossain A., Soldatov A.V., Henaish A.M.A., Ahmed J., Roy S. // New J. Chem. 2023. Vol. 47. P. 13547. doi 10.1039/d3nj02412a
50. Zhu C., Zhou Y., Zhao H., Farajtabar A. // Chem. Thermodyn. 2020. Vol. 150. P. 106229. doi 10.1016/j.jct.2020.106229
51. Usacheva T.R., Volynkin V.A., Panyushkin V.T., Lindt D.A., Pham T.L., Nguyen T.T.H., Le T.M.H., Alister D.A., Kabisrov D.N., Kuranova N.N., Gamov G.A., Kushnir R.A., Biondi M., Giancola C., Sharnin V.A. // Molecules. 2021. Vol. 26. N 15. P. 4408. doi 10.3390/molecules26154408
52. Куранова Н.Н., Кабиров Д.Н., Кашина О.В., Фам Т.Л., Усачева Т.Р. // Изв. вузов. Сер. хим. и хим. технол. 2020. Т. 63. № 10. С. 23. doi 10.6060/ivkkt.20206310.6285
53. Jabbari M., Khosravi N., Feizabadi M., Ajloo D. // RSC Adv. 2017. Vol. 7. P. 14776. doi 10.1039/c7ra00038c
54. Li X., Zhu Y., Zhang X., Farajtabar A., Zhao H. // J. Chem. Eng. Data. 2020. Vol. 65. N 4. P. 1976. doi 10.1021/acs.jced.9b01139
55. Гессе Ж.Ф., Исаева В.А., Шарнин В.А. // ЖФХ. 2010. Т. 84. № 2. С. 385; Gesse Zh.F., Isaeva V.A., Sharnin V.A. // Russ. J. Phys. Chem. (A). 2010. Vol. 84. N 2. P. 329. doi 10.1134/S0036024410020299
56. Наумов В.В., Исаева В.А., Шарнин В.А. // ЖФХ. 2014. Т. 88. № 3. P. 443. doi 10.7868/S0044453714030194; Naumov V.V., Isaeva V.A., Sharnin V.A. // Russ. J. Phys. Chem. (A). 2014. Vol. 88. N 3. P. 433. doi 10.1134/S0036024414030194
57. Нищенков А.В., Шарнин В.А., Шорманов В.А., Крестов Г.А. // ЖФХ. 1990. Т. 84. № 1. С. 114.
58. Mucci A., Domain R., Benoit R.L. // Can. J. Chem. 1980. Vol. 58. N 9. P. 953. doi 10.1139/v80-151
59. Cox B. G., Firman P., Gudlin D., Schneider H. // J. Phys. Chem. 1982. Vol. 86. N 25. 4988. doi 10.1021/j100222a030
60. Namor A.F.D., Ponce H.B., Viguria E.C. // J. Chem. Soc. Farad. Trans. I. 1986. Vol. 82. P. 2811. doi 10.1039/F19868202811
61. Чуев Г.Н., Базилевский М.В. // Усп. хим. 2003. Т. 72. № 9. С. 827; Chuev G.N., Basilevsky M.V. // Russ. Chem. Rev. 2003. Vol. 72. N 9. P. 735. doi 10.1070/RC2003v-072n09ABEH000775
62. Xue M., Huang D.-Z., Yang K.-X., Chen L.-Z., Zheng Z.-H., Xiang Y., Huang Q.-W., Wang J.-L. // J. Mol. Liq. 2021. Vol. 330. P. 115639. doi 10.1016/j.molliq.2021.115639
63. Танганов Б.Б., Могнонов Д.М. // Изв. вузов. Прикл. хим. и биотехнол. 2019. Т. 9. № 4. С. 612. doi 10.21285/2227-2925-2019-9-4-612-620
64. Doluia B.K., Bhattacharya S.K., Kundu K.K. // Ind. J. Chem. (A). 2007. Vol. 46. P. 1081.
65. Цыпина Н.А., Кижняев В.Н., Адамова Л.В. // Высокомол. соед. (A). 2003. Т. 45. N 10. С. 1718.
66. Тюнина Е. Ю., Баделин В. Г. // Жидкие кристаллы и их практ. использование. 2010. Вып. 3 (33). С. 64.
67. Эмануэль Н.М., Кнорре Д.Г. Курс химической кинетики. М.: Высшая школа, 1984. 463 с.
68. Yang L.-J., Yang X.-Q., Huang K.-M., Jia G.-Z., Shang H. // Int. J. Mol. Sci. 2009. Vol. 10. P. 1261. doi:10.3390/ijms10031261
69. Bosch E., Fonrodona G., Rafols C., Roses M. // Analyt. Chim. Acta. 1997. Vol. 349. N 1–3. P. 367. doi 10.1016/S0003-2670(97)00191-8
70. Балятинская Л.Н. // Усп. хим. 1979. Т. 48. № 4. С. 772.
71. Gutmann V. // Electrochim. Acta. 1976. Vol. 21. N 9. P. 661. doi 10.1016/0013-4686(76)85034-7
72. Блументаль Г., Энгельс З., Фиц И., Хабердигцль В., Хекнер К.-Х., Хенрион Г., Ландсберг Р., Шмидт В., Шольц Г., Штарке П., Вильке И., Вильке К.-Т. Аноорганикум. М.: Мир, 1984. 668 с.
73. Цветков В.Г., Буслаева М.Н., Кругляк А.И. // Реакц. способн. орг. соед. 1980. Т. 17. Вып. 2(62). С. 129.
74. Райхарт К. Растворители и эффекты среды в органической химии. М.: Мир, 1991. 763 с.
75. Карапетьянц М.Х. Введение в теорию химических процессов. М.: Высшая школа, 1981. 333 с.
76. Katayama M., Shinoda M., Ozutsumi K., Funahashi S., Inada Y. // Analyt. Sci. 2012. Vol. 28. N 2. P. 103. doi 10.2116/analsci.28.103
77. Mayer U., Gerger W., Gutmann V. // Monatsh. Chem. 1977. Vol. 108. N 2. P. 489. doi 10.1007/BF00902004
78. Сергиевский В.В., Скоробогатько Д.С., Рудаков А.М. // ЖФХ. 2010. Т. 84. № 3. С. 412; Sergievskii V.V., Skorobogat'ko D.S., Rudakov A.M. // Russ. J. Phys. Chem. (A). 2010. Vol. 84. N 3. P. 350. doi 10.1134/S0036024410030027
79. Верстакова Е.С., Коробкова С.А., Носаева Т.А. // ЖФХ. 2020. Т. 94. № 4. С. 564. doi 10.31857/S004445372004024X; Verstakov E.S., Korobkova S.A., Nosaeva T.A. // Russ. J. Phys. Chem. (A). 2020. Vol. 94. N 4. P. 738. doi 10.1134/S003602442004024X

80. Aguilar M., Dominguez H., Pizio O. // *Cond. Matter Phys.* 2022. Vol. 25. N 3. P. 33202. doi 10.5488/CMP.25.33202
81. Kirchner B., Reiher M. // *J. Am. Chem. Soc.* 2002. Vol. 124. N 21. P. 6206. doi 10.1021/ja017703g
82. Plowas I., Swiergiel J., Jadzyn J. // *J. Chem. Eng. Data* 2013. Vol. 58. N 6. P. 1741. doi 10.1021/je400149j
83. Wong D.B., Sokolowsky K.P., El-Barghouthi M.I., Fenn E.E., Giammanco C.H., Sturlaugson A.L., Fayer M.D. // *J. Phys. Chem. (B)*. 2012. Vol. 116. P. 5479. doi 10.1021/jp301967e
84. Lam S.Y., Benoi R.L. // *Can. J. Chem.* 1974. Vol. 52. N 5. P. 718. doi 10.1139/v74-113
85. Macdonald D.D., Hyne J.B. // *Can. J. Chem.* 1971. Vol. 49. N. 4. P. 611. doi 10.1139/v71-098
86. Idrissi A., Marekha B., Barj M., Jedlovsky P. // *J. Phys. Chem. (B)*. 2014. Vol. 118. N 29. P. 8724. doi 10.1021/jp503352f

Gibbs Energy of Cryptand[2.2.2] Transfer from Water to Aqueous Dimethyl Sulfoxide Solvent

V. A. Isaeva^{a,*}, E. I. Pogodina^a, A. S. Katolikova^a, and K. V. Grazhdan^{a,*}

^a *Ivanovo State University of Chemistry and Technology, Ivanovo, 153000 Russia*

^{*}*e-mail: grazhdan_kv@isuct.ru*

Received March 5, 2024; revised April 10, 2024; accepted April 12, 2024

We represent the Gibbs energies of cryptand[2.2.2] transfer from water to different composition water–dimethyl sulfoxide solvent. The Gibbs energies were determined by interphase distribution of cryptand[2.2.2] between two immiscible solvents. We conclude, that when the dimethyl sulfoxide concentration increases, the cryptand[2.2.2] solvation is weakening.

Keywords: cryptand, solvation, distribution coefficient, Gibbs energy, water–dimethyl sulfoxide solvent