

Основные результаты, полученные по 1 этапу

В результате проделанной работы, были установлены следующие ключевые закономерности координационной химии биологически активных лигандов и их структурных аналогов:

1. Синтезированы алкилзамещенные линейные олигопирролы и их соли с бромистоводородной кислотой.
2. По результатам исследования взаимодействий алкилзамещенных 2,2'-дипирролилметена симметричного и несимметричного строения с ацетатами Cu(II), Ni(II), Co(II), Zn(II), Cd(II) и Hg(II) в диметилформаamidных растворах установлено, что в этих системах в зависимости от концентрационных условий и природы металла-комплексообразователя наблюдается образование гетеро- и гомолигандных комплексов. Найдены ступенчатые и полные константы образования металлокомплексов. Установлены ключевые закономерности влияния природы металлов и лигандов на стабилизацию комплексов дипирролилметенов с *d*-элементами.
3. С использованием метода электронной спектроскопии установлено, что взаимодействие алкилзамещенного 2,2'-дипирролилметена с солями La(III), Pr(III), Sm(III), Dy(III), Ho(III), Er(III) и Yb(III) приводит к образованию *трис*(дипирролилметеновых) комплексов. Данные по ЭСП и константам образования комплексов лантанидов совместно с полученными ранее результатами позволили провести анализ природы связей M–L в хелатах 2,2'-дипирролилметенов с *p*-, *d*- и *f*-элементами. Установлена взаимосвязь между устойчивостью комплексов и силой поляризующего действия иона комплексообразователя на хромофорную π-систему дипирролилметена, что позволяет отнести данные гетероциклические лиганды к зондам, высокочувствительным к изменениям соотношения между ионным и ковалентным вкладом в координационные взаимодействия.
4. Получены термодинамические характеристики реакции образования $[CuL]^{2+}$ (ΔG , ΔH , ΔS), а также энтальпии переноса никотинамида и комплексного иона

$[\text{CuL}]^{2+}$. Установлено, что основность никотинамида уменьшается с ростом концентрации диметилсульфоксида (или этанола) в смешанном растворителе из воды в ее смеси с диметилсульфоксидом и этанолом. Анализ энтальпийных характеристик сольватации реагентов показал, что водно-диметилсульфоксидных растворах основной вклад в $\Delta_t H_r^\circ$ комплексообразования вносит изменение сольватации лиганда. Это соответствует общим закономерностям в изменении термодинамических характеристик реакций комплексообразования и сольватации реагентов в водно-органических растворителях. В водных растворах этанола такая корреляция нарушается, что может быть связано с различной пересольватацией отдельных структурных фрагментов молекулы никотинамида.

5. Прямым калориметрическим методом измерены тепловые эффекты взаимодействия растворов L-гомосерина, D-аспарагина, L-глутамина и L-глутаминовой кислоты с растворами азотной кислоты и гидроксида калия при температуре 298.15K и значениях ионной силы 0.1, 0.3, 0.5, 1.0 (KNO_3), и определены тепловые эффекты 12 реакций протонирования и нейтрализации указанных аминокислот. Рассчитаны стандартные термодинамические характеристики (pK , ΔG° , ΔH° , ΔS°) исследованных реакций.

6. Методом потенциометрического титрования изучены процессы комплексообразования L-аспарагина и L-глутамина с ионами кальция в водном растворе при 298.15 K и значениях ионной силы $I = 0.5, 1.0, 1.5$ (KNO_3). В Установлено образование нормальных и протонированных комплексов состава CaL^+ и CaHL^{2+} . Рассчитаны значения концентрационных и термодинамических констант устойчивости комплексов кальция с L-аспарагином и L-глутамином.

Результаты представленной работы позволяют в настоящее время сформулировать подходы к направленной модификации биологически активных лигандов и их структурных аналогов для создания металлокомплексных структур заданного состава и строения.

Обнаруженные закономерности используются в образовательном процессе.

В дополнение к научно-исследовательской работе, в ходе выполнения работ по государственному контракту, был разработан план деятельности Научно-образовательного центра «Теоретическая и экспериментальная химия» в части работ, выполняемых по государственному контракту и проведена Летняя школа юных химиков для учащихся старших классов средних школ г. Иваново и Ивановской области.

Таким образом, наряду с важнейшими для координационной химии результатами, тесное взаимодействие науки и образования в рамках настоящего проекта позволят сформировать у будущих выпускников устойчивые профессиональные навыки и мотивацию к участию в научных исследованиях, опыт использования фундаментальных результатов в решении прикладных задач химии и химической технологии. Комплекс предложенных мероприятий позволит сформировать у будущих специалистов надежную и обширную научную базу, которая даст возможность в короткие сроки завершить при обучении в начатые научные исследования аспирантуре, и в конечном итоге позволит разработать систему подготовки специалистов химического профиля высокой квалификации, направленную на решение проблемы ротации научных и педагогических кадров.