

## МАТЕМАТИЧЕСКАЯ МОДЕЛЬ И ПРОГРАММА ДЛЯ РАСЧЕТА КОНСТАНТ ОБРАЗОВАНИЯ КОМПЛЕКСОВ

Рукк Н. С., Михайлов В. А., Осипов Р. А., Скрябина А. Ю., Замалютин В. В.

МИТХТ им. М.В. Ломоносова, Россия, 119571, Москва, проспект Вернадского, д. 86,  
тел. (495) 936-89-12, e-mail: roukkn@inbox.ru, r.a.osipov@gmail.com

Известно [1], что некоторые лекарственные препараты проявляют бóльшую биологическую активность, когда они входят в состав комплексных соединений. Вследствие этого все большее внимание уделяется исследованию биологической активности комплексов *d*- и *f*-элементов с органическими лигандами. В этой связи представляет интерес биологически активный лиганд – антипирин (1-фенил-2,3-диметилпиразолон-5, AP), его способность протонироваться, а также образовывать комплексные соединения со многими переходными элементами. Потенциометрическое титрование водных растворов AP раствором HCl показало, что AP является очень слабым основанием, вследствие чего определение функции Бьеррума по формуле  $n_B = \frac{c_{\text{HCl}} - [\text{H}^+]}{c_{\text{AP}}}$  из-за близости  $c_{\text{HCl}}$  и  $[\text{H}^+]$  сопряжено со значительной экспериментальной ошибкой. Исследование функции Бьеррума с учетом этого обстоятельства, тем не менее, позволило показать, что в водном растворе образуются протонированные частицы  $\text{APH}^+$ ,  $\text{APH}_2^{2+}$  и  $\text{AP}_2\text{H}^+$  и найти следующие оценки констант образования:  $1.8 < \lg \beta_1 < 2$ ,  $4.2 < \lg \beta_2 < 4.4$ ,  $3.8 < \lg \beta_{1/2} < 4$ . Исследование перхлоратов состава  $\text{APHClO}_4$  и  $2\text{APHClO}_4$  методом РСА подтвердило существование катионов  $\text{APH}^+$  и  $\text{AP}_2\text{H}^+$  в твердой фазе.

Для определения состава протонированных частиц и оценки констант образования производилась минимизация – методами Нелдера-Мида (*Nelder-Mead*) и дифференциальной эволюции (*Differential Evolution*) – суммы квадратов отклонений экспериментальных значений  $n_B$  от вычисленных по формуле

$$n_B = \frac{\beta_1 [\text{H}^+] + 2\beta_2 \frac{[\text{H}^+]^2}{\gamma_1^2} + \beta_{1/2} [\text{AP}][\text{H}^+]}{1 + \beta_1 [\text{H}^+] + \beta_2 \frac{[\text{H}^+]^2}{\gamma_1^2} + 2\beta_{1/2} [\text{AP}][\text{H}^+]},$$

где  $\gamma_1$  – коэффициент активности однозарядных ионов, с помощью математического пакета Wolfram *Mathematica* 7 [2].

### Литература

1. *Abdel-Latif S.A., Hassib H.B., Issa Y.M.* Studies on some salicylaldehyde Schiff base derivatives and their complexes with Cr(III), Mn(II), Fe(III), Ni(II) and Cu(II) // *Spectrochim. Acta.* **Vol. A67**, 2007. Pp. 950-957.
2. *Brett Champion, Adam Strzebonski.* Constrained optimization. — USA, Champaign: Wolfram Research, Inc., 2008. 71 pages.