

Ամենամյա հաշվետու գիտաժողով-2025,
Հոկտ. 5-10, 2025, Դիլիջան

ԱՐԵՎԱՅԻՆ ԷՆԵՐԳԻԱՅԻ ՎԵՐԱՓՈԽՄԱՆ ՀԱՄԱՐ ՀԵՌԱՆԿԱՐԱՅԻՆ
ՀԻՔՐԻԴԱՅԻՆ ՆՈՐ ՆՅՈՒԹԵՐ

Արամ Մ. Պետրոսյան¹, Ջերալդ Գիստեր², Գայանե Ս. Տոնոյան¹, Վահրամ Վ.
Ղազարյան¹, Աշխեն Լ. Զատիկյան³, Գրետա Կ. Գևորկյան¹, Միլենա Ս. Պետրոսյան¹,
Ռուբեն Յու. Զիլինգարյան, Արթուր Ա. Մարգարյան, Արտակ Հ. Մկրտչյան¹

¹*Institute of Applied Problems of Physics, Yerevan, Armenia*

²*Institute of Mineralogy and Crystallography, Vienna, Austria*

³*Yerevan State University, Yerevan, Armenia*

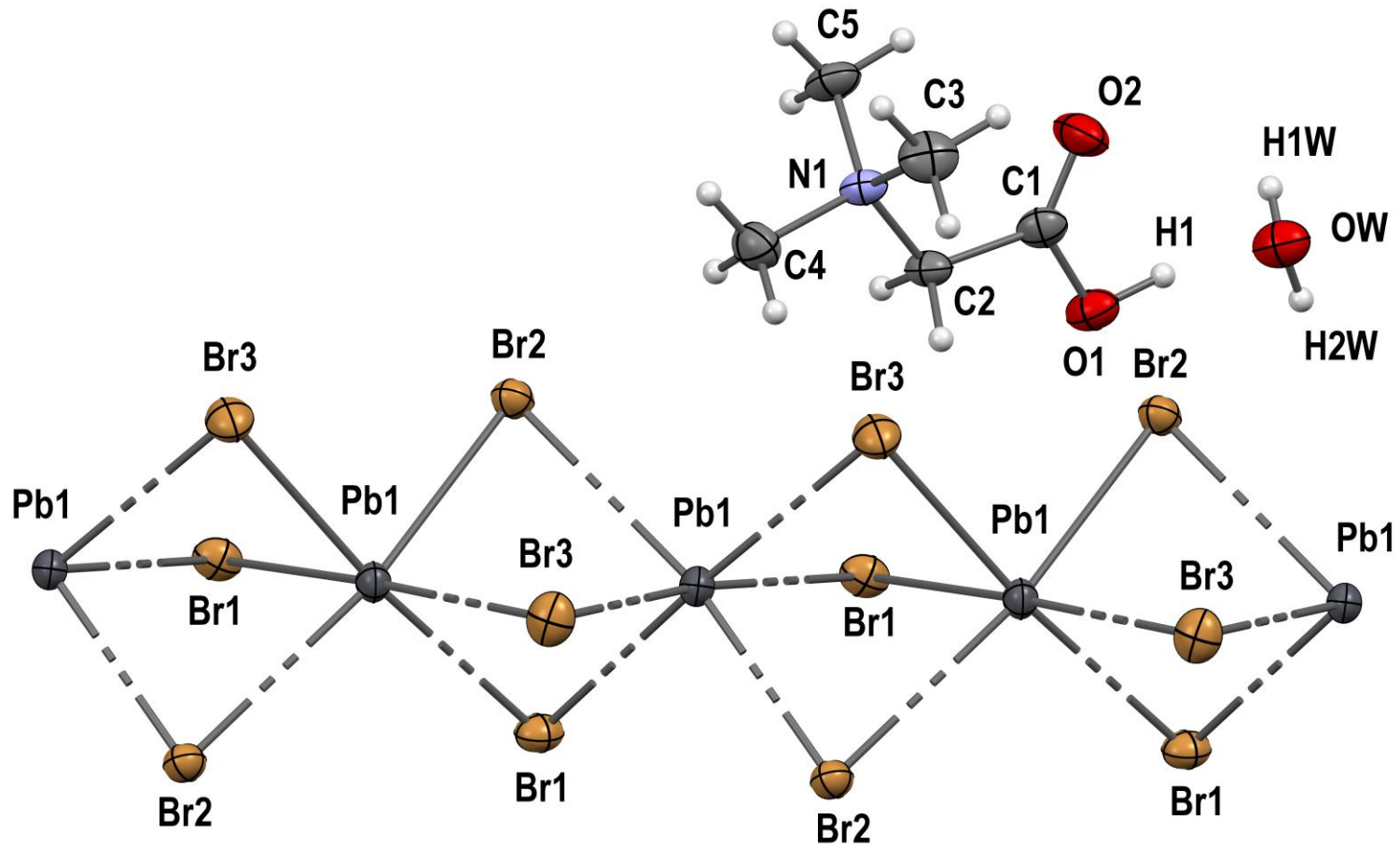
Առավել հեռանկարային 6 աղ

#	Composition	Արգելված գոտի, eV
1	$(\text{DMGH})_4(\text{Bi}_2\text{I}_9)(\text{I}_3)(\text{I}_2)_{0.5} \cdot 2\text{H}_2\text{O}$	1.62
2	$(\text{DMGH} \cdots \text{DMG} \cdots \text{DMGH})_2(\text{Bi}_3\text{I}_{12})(\text{I}_3)$	1.82
3	$(\text{BetH} \cdots \text{BetH})_3(\text{Bi}_2\text{I}_{10})(\text{I}_3)_{1.5}(\text{I}_5)_{0.5}(\text{I}_2)_{1.5}$	1.33
4	$(\beta\text{-AlaH})(\text{BiI}_4)(\text{I}_2)_{0.5}$	1.75
5	$(\text{L-ArgH}_2)_2(\text{Bi}_2\text{I}_8)_2(\text{I}_2)_3 \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	1.53
6	$(\text{L-HisH}_2)_2(\text{Bi}_3\text{I}_{13}) \cdot 5\text{H}_2\text{O}$	1.79

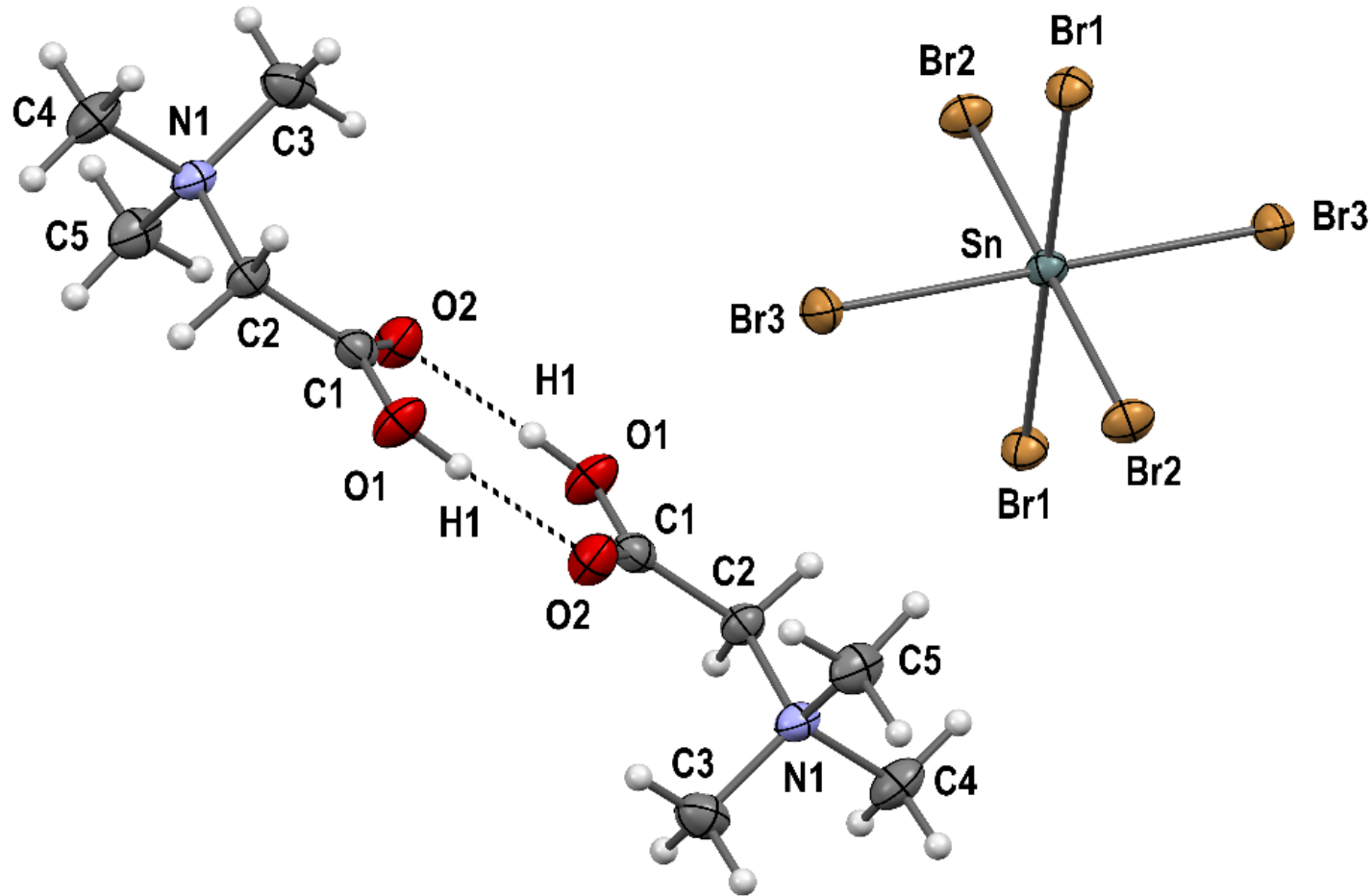
Աղյուսակ 1. Ստացված բյուրեղները, սիմետրիայի տարածական խումբը, տարրական բջջի (Z) և անկախ մասի (Z') ֆորմուլային միավորների թվերը: #-ը ընդհանուր թիվն է, ##-ը 4-րդ տարվա ընդացքում:

#	##	Բյուրեղ	Տարած. խումբ	Z	Z'
108	1	(BetH)(PbBr ₃).H ₂ O	<i>P</i> 2 ₁ / <i>c</i>	4	1
109	2	(BetH⋯BetH)(SnBr ₆)	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>	2	0.5
110	3	(L-OrnH ₂)(I ₃)(I)(I ₂)	<i>P</i> 1	2	2
111	4	(GuH) ₁₅ (I ₃) ₁₀ (I) ₅	<i>C</i> 2/ <i>c</i>	4	0.5
112	5	2Gly.(I ₂)	<i>P</i> $\bar{1}$	4	2
113	6	(DMGH) ₂ (BiCl ₅).H ₂ O	<i>P</i> 2 ₁ / <i>c</i>	4	1
114	7	(β -AlaH⋯ β -AlaH)(BiBr ₅)	<i>P</i> 2 ₁ / <i>n</i>	4	1
115	8	(L-HisH ₂) ₂ (BiI ₆)(I).4H ₂ O	<i>C</i> 2	2	0.5
116	9	Տես ստորև			
117	10	Տես ստորև			
118	11	Տես ստորև			

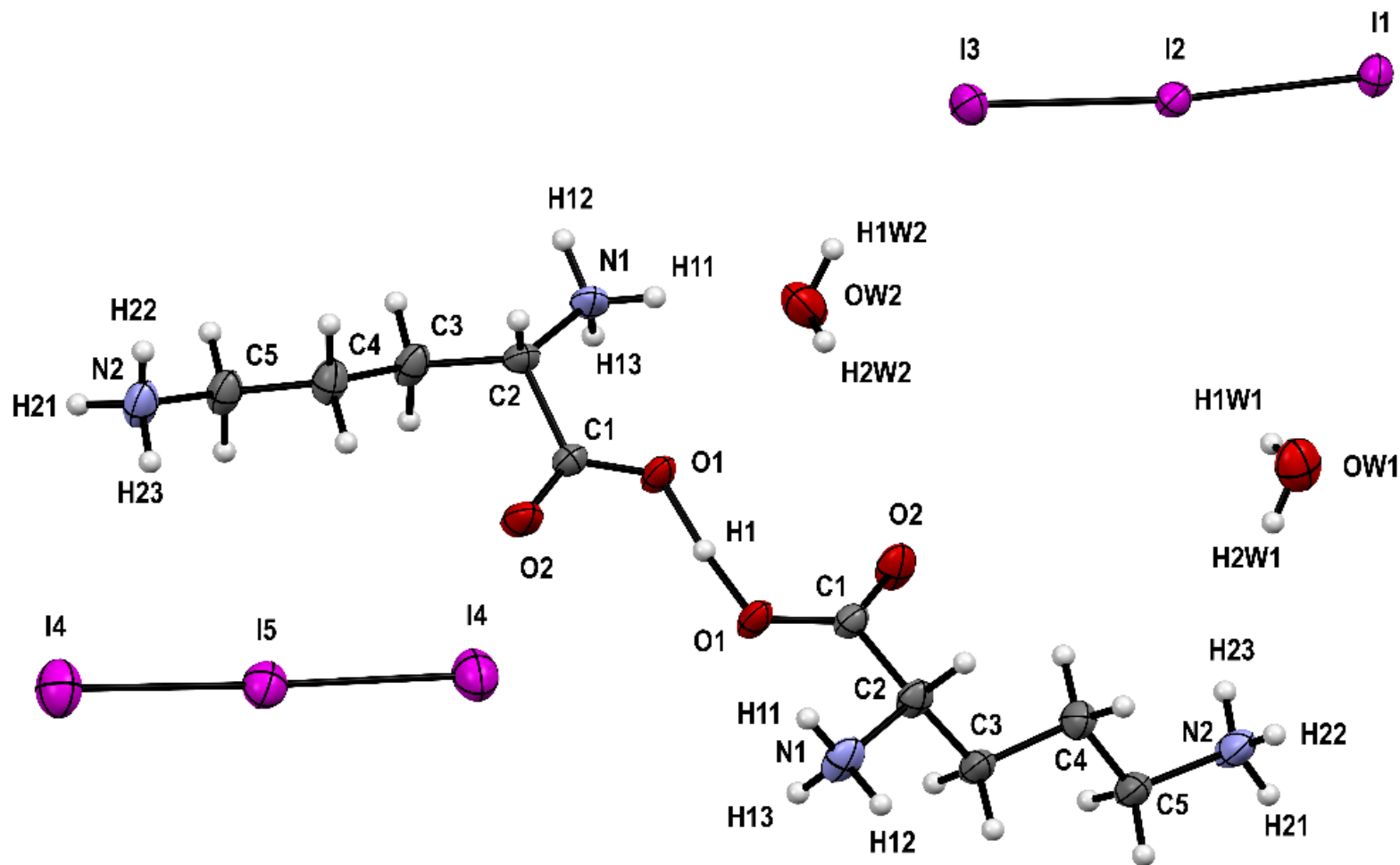
##1, (BetH)(PbBr₃).H₂O-ի կառուցվածքը: տ.խ. $P2_1/c$, $Z=4$, $Z'=1$



##2, (BetH...BetH)(SnBr₆)-ի կառուցվածքը:
տարածական խումբ $P2_1/n$, $Z=2$, $Z'=0.5$

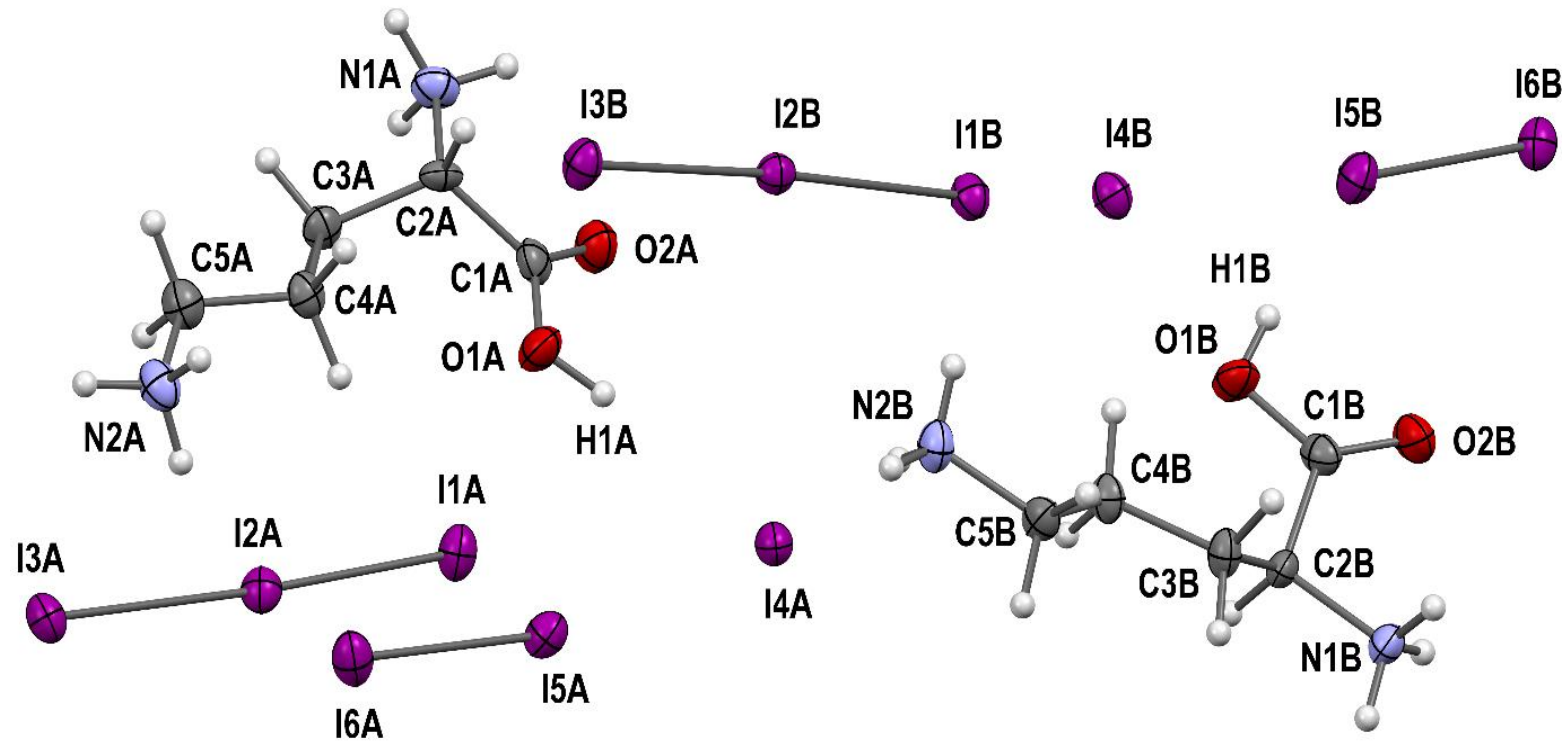


#86, (L-OrnH-H-L-OrnH)_{0.5}(I₃)_{1.5}·2H₂O-ի կառուցվածքը:



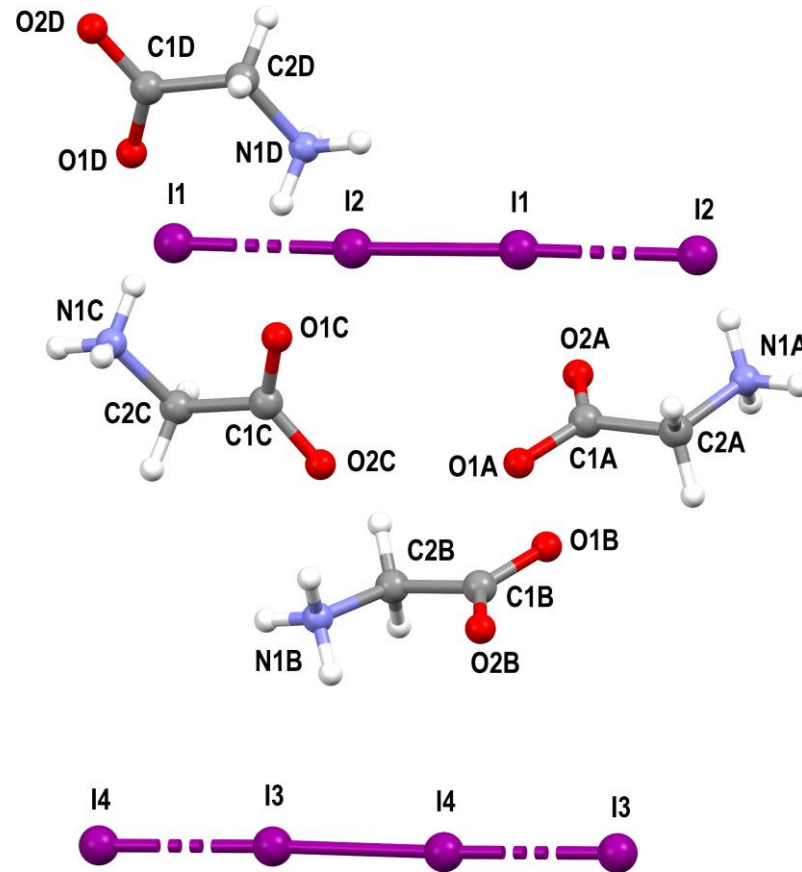
##3, (L-OrnH₂)(I₃)(I)(I₂)-ի կառուցվածքը: տ.խ. *P*1, Z=2, Z' =2

I1A-I2A-I3A; I1A-I2A [2.8180(9) Å], I2A-I3A [3.0651(8) Å]
I4A...I5A-I6A; I4A...I5A [3.4048(9) Å], I5A-I6A [2.7578(9) Å]
I1B-I2B-I3B; I1B-I2B [2.9387(9) Å], I2B-I3B [2.9092(8) Å]
I4B...I5B-I6B; I4B...I5B [3.4444(9) Å], I5B-I6B [2.7657(9) Å]

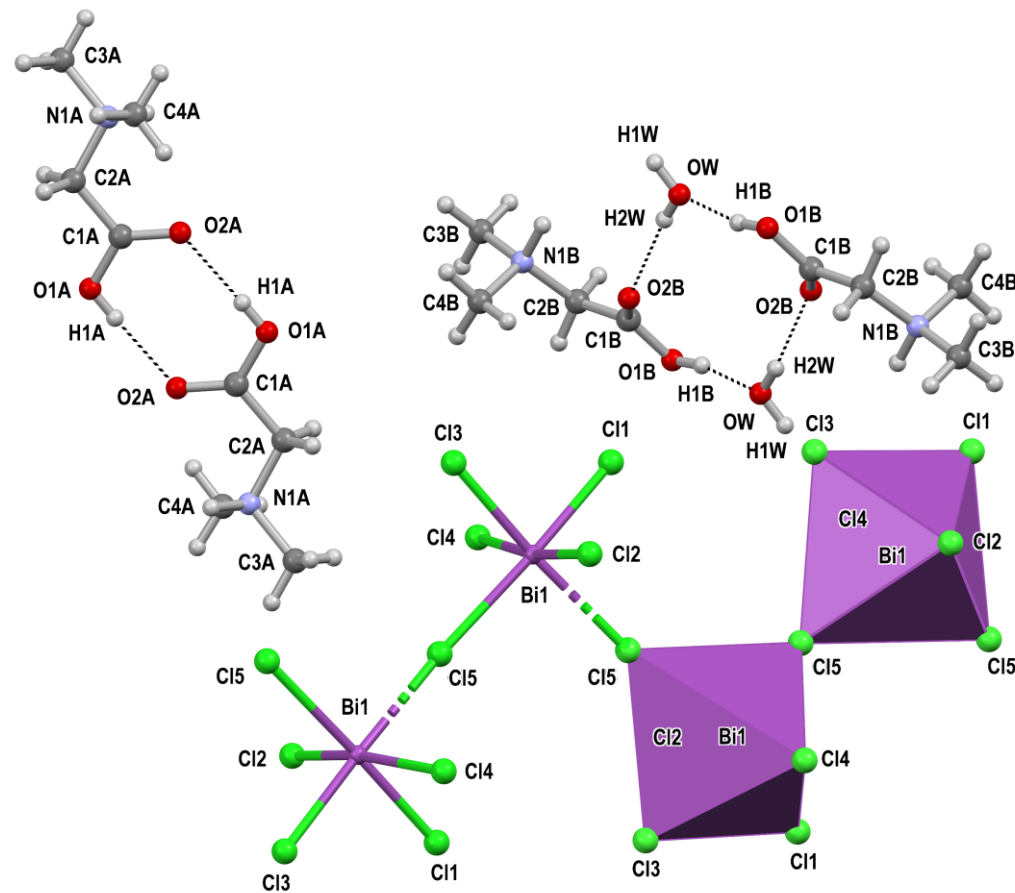


##5, 2Gly.(I₂)-ի կառուցվածքը, տար. խումբ $P\bar{1}$, $Z=4$, $Z'=2$

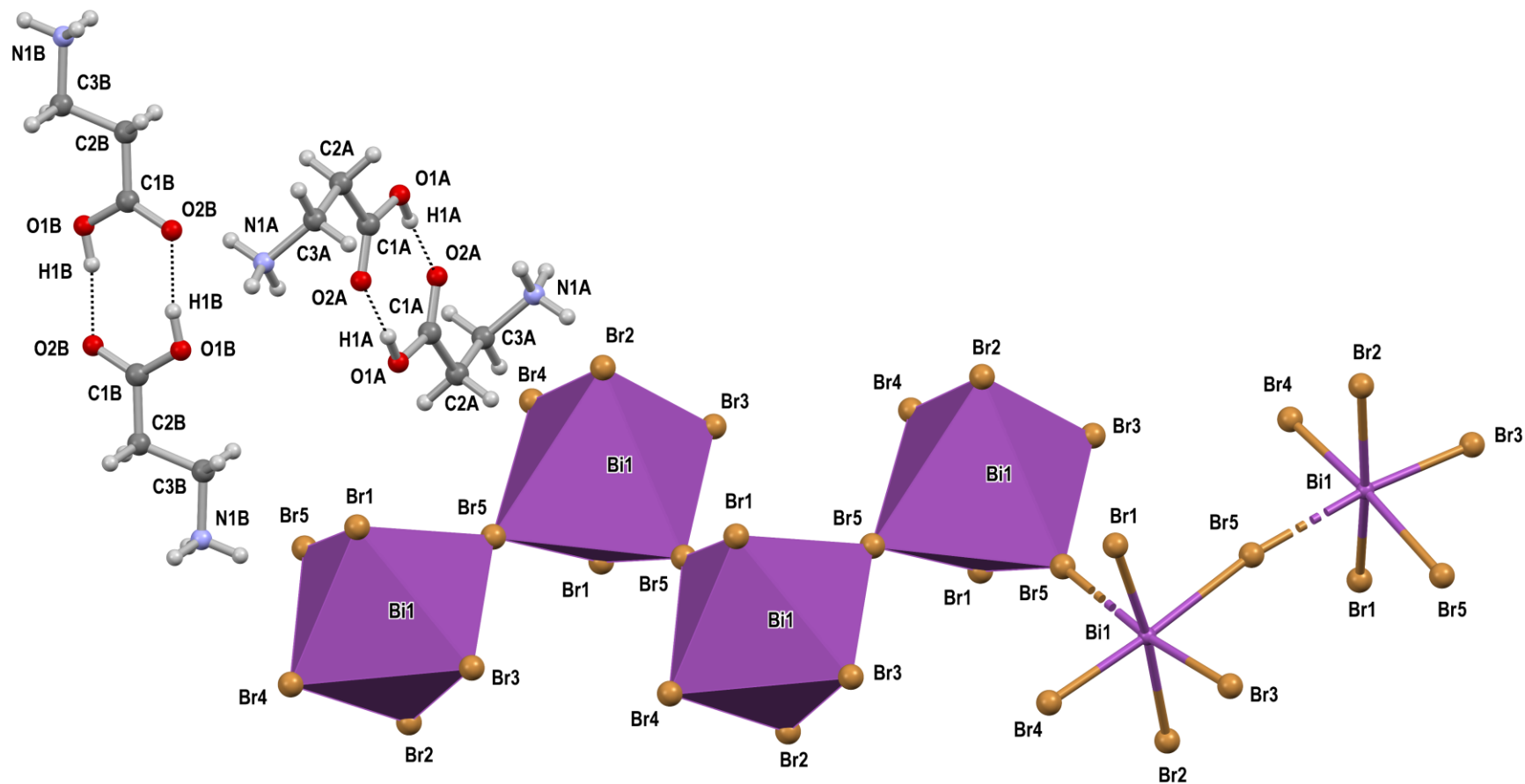
I1-I2 (2.626(3) Å , I1⋯I2 (2.798(3) Å; I3-I4 (2.685(3) Å , I3⋯I4 (2.739(3) Å



##6, (DMGH)₂(BiCl₅).H₂O-ի կառուցվածքը: տ.խ. $P2_1/c$, $Z=4$, $Z'=1$

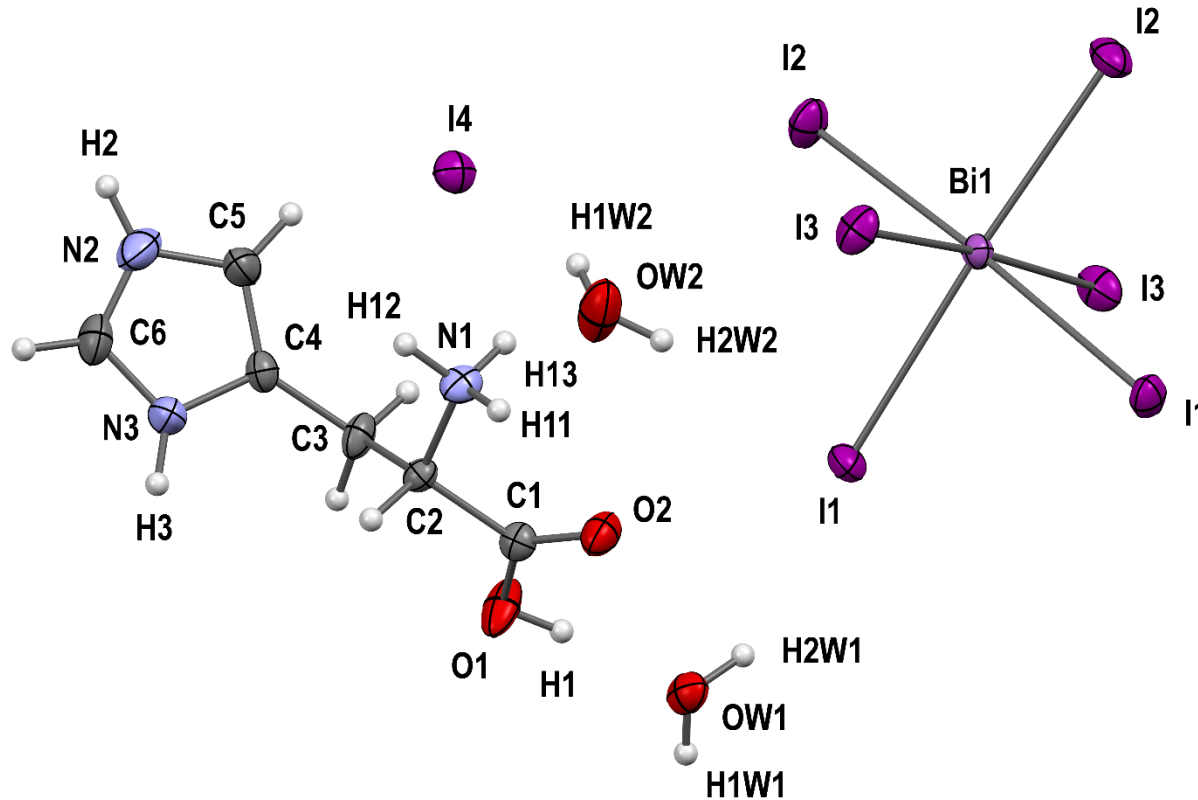


##7, (β -AlaH $\cdots\beta$ -AlaH)(BiBr₅)-ի կառուցվածքը: տ.իւ. $P2_1/n$, $Z=4$, $Z'=1$

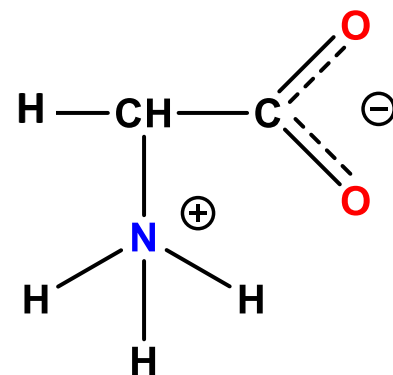
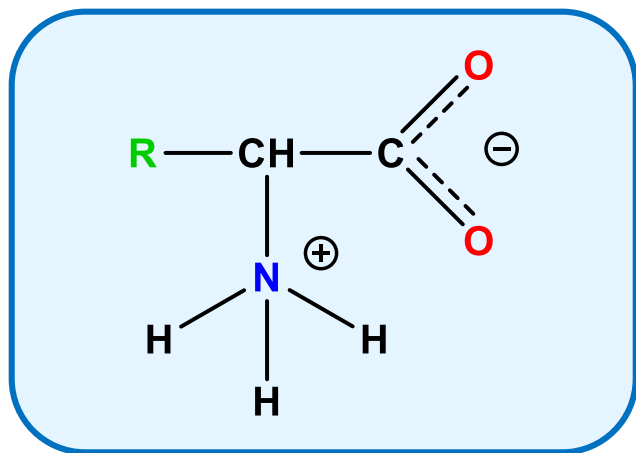


Շախմատում սենք ստացել էրսք ունեւյալ տարւարոս աղերը
 $(L\text{-OrnH}_2)_2(\text{BiI}_6)(\text{Cl})\cdot\text{H}_2\text{O}$ $(L\text{-LysH}_2)_2(\text{BiI}_6)(\text{I})\cdot\text{H}_2\text{O}$: Այժմ մեզ հաջողվեց
 ստանալ նաև համանման աղ $L\text{-հիստիդինի}$ համար, ##8,
 $(L\text{-HisH}_2)_2(\text{BiI}_6)(\text{I})\cdot 4\text{H}_2\text{O}$:

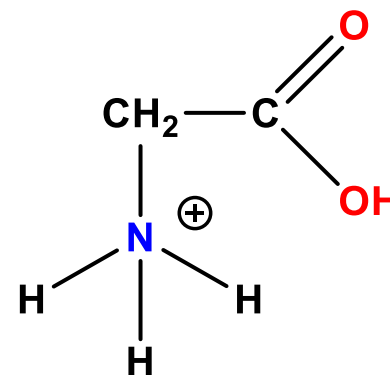
BiI_6 և I անիոնները գտնվում են մասնակի դիրքերում, իսկ $L\text{-հիստիդինի}$
 կատիոնը և ջրի մոլեկուլները գտնվում են ընդհանուր դիրքում:



##8, $(L\text{-HisH}_2)_2(\text{BiI}_6)(\text{I})\cdot 4\text{H}_2\text{O}$ -ի կառուցվածքը:



Գլիցին (Gly)



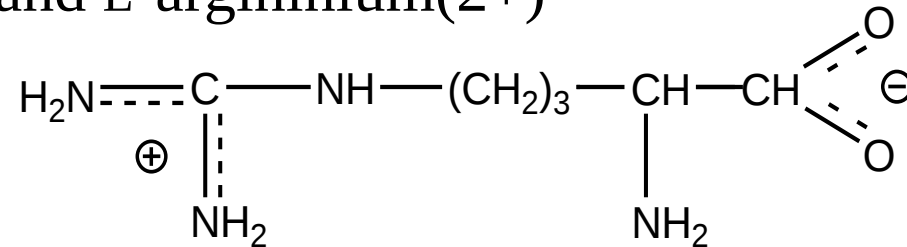
Գլիցինիոն (GlyH)

Amino acids capable to form singly and doubly charged cations

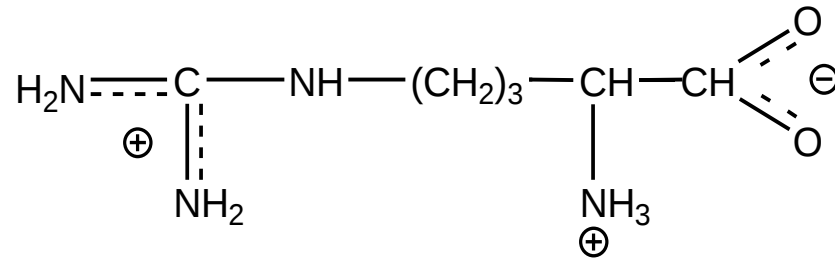
L-ornithine, L-Lysine, L-histidine, L-arginine

e.g. L-argininium(+) and L-argininium(2+)

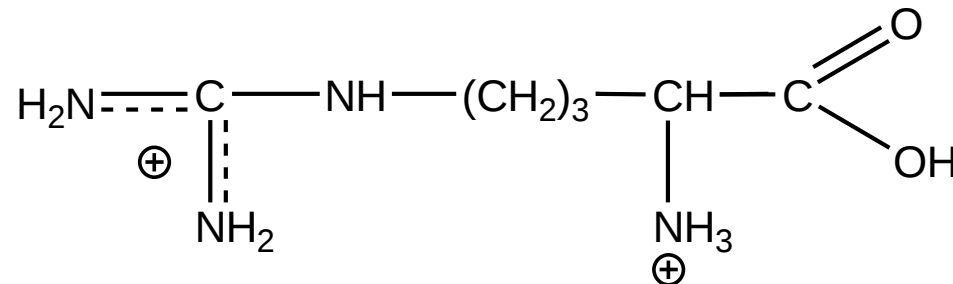
L-Arg



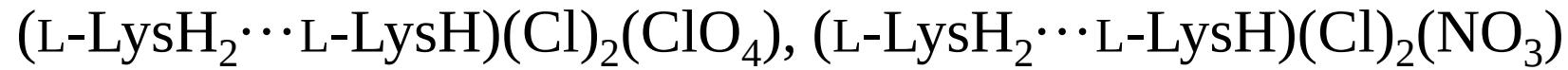
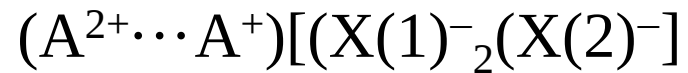
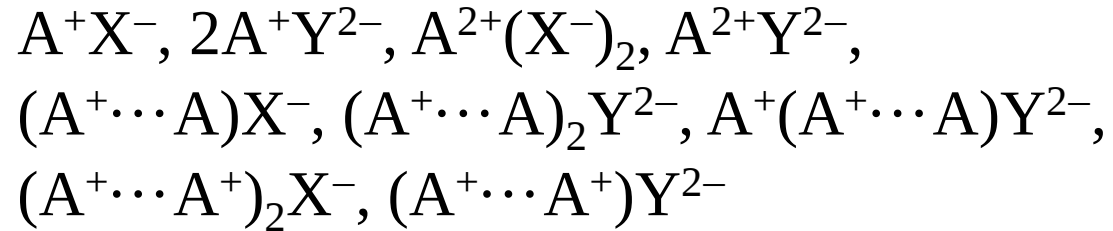
L-ArgH



L-ArgH₂



Various types of salts of amino acids with the same amino acid since XIX century



(the group of Prof. Rajaram, 2001)

Later, we obtained new such salts of L-Lys
as well as for L-Orn, L-His and L-Arg

M. Fleck, A.M. Petrosyan, Salts of amino acids: crystallization, structure and properties. Springer, Dordrecht, 2014.

Մեզ մոտ միթք առաջացավ, արդյոք հնարավոր է ստանալ ադեր, որոնք կպարունակենին տարբեր ամինոթթուներ

A.M. Petrosyan, G. Giester, G.S. Tonoyan, V.V. Ghazaryan, M. Fleck,

A new class of amino acids salts. Abstracts of 3rd German Polish
Conference on Crystal Growth, March 17-21, 2019, Poznań, Poland, p.
57. (oral)

- A.M. Petrosyan, V.V. Ghazaryan, G.S. Tonoyan, E.M. Aghajanova, G. Giester, M. Fleck, Salts containing different amino acids and iodide anion as regulators of thyroxine synthesis. Armenian Patent # 656Y (2020). Official Bulletin of RA Intellectual Property Agency #01/1, p.6 (08.01.2020).
- $(\text{L-ArgH})_2(\text{GlyH}\cdots\text{Gly})(\text{I})_3\cdot\text{H}_2\text{O}$, $(\text{L-ArgH})_2(\beta\text{-AlaH}\cdots\beta\text{-Ala})(\text{I})_3$

- A.M. Petrosyan, G. Giester, G.S. Tonoyan, V.V. Ghazaryan, M. Fleck, Salts containing different amino acids: Three types salts of L-arginine containing glycine, dimethylglycine or β -alanine. J. Mol. Struct. 1228 (2021), 129717.
- G.S. Tonoyan, G. Giester, A.M. Petrosyan, Salts containing different amino acids: Salts with β -alaninium L-proline dimeric cation. J. Mol. Struct. 1252 (2022) 132171.
- A.M. Petrosyan, G. Giester, G.S. Tonoyan, Salts containing different amino acids. Four types of salts with the hexafluorosilicate anion. Struct. Chem. 34(2) (2023) 491-504.
- A.M. Petrosyan, G. Giester, G.S. Tonoyan, Salts containing different amino acids: four types of salts with the sulfate anion. Struct. Chem. 34(6) (2023) 2185-2200.
- G.S. Tonoyan, G. Giester, A.M. Petrosyan, New class of salts containing different amino acids - an overview. J. Phys.: Conf. Ser. 2924 (2024) 012007.

ՀՀ ԳԱԱ Ա.Բ. ՆԱԼԲԱՆԴՅԱՆԻ ԱՆՎԱՆ ՔԻՄԻԱԿԱՆ ՖԻԶԻԿԱՅԻ ԻՆՍՏԻՏՈՒՏ

ՏՈՆՈՅԱՆ ԳԱՅԱՆԵ ՄԱՍՈՒՆԻ

ԵՐԿՈՒ ՏԱՐԲԵՐ ԱՄԻՆՈԹԹՈՒՆԵՐ ՊԱՐՈՒՆԱԿՈՂ ԱՂԵՐԻ ԲԱՅԱՀԱՅՏՈՒՄՆ ՈՒ
ՀԵՏԱԶՈՏՈՒՄԸ

Բ.00.04 - «Ֆիզիկական քիմիա» մասնագիտությամբ քիմիական գիտությունների
թեկնածուի գիտական աստիճանի հայցման ատենախոսության

ՍԵՂՄԱԳԻՐ

ԵՐԵՎԱՆ - 2025

ИНСТИТУТ ХИМИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ ИМ. А.Б. НАЛБАНДЯНА НАН РА

ТОНОЯН ГАЯНЕ САСУНОВНА

ОБНАРУЖЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СОЛЕЙ, СОДЕРЖАЩИХ ДВЕ РАЗНЫЕ
АМИНОКИСЛОТЫ

АВТОРЕФЕРАТ

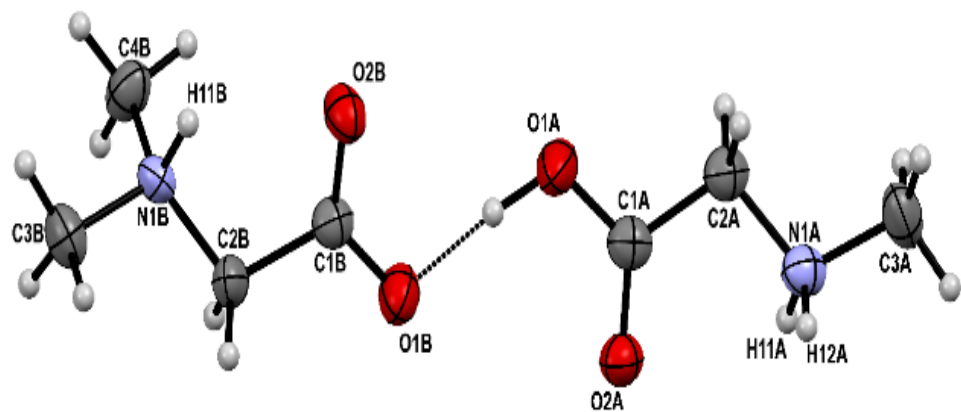
диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук по специальности
02.00.04 - «Физическая химия»

ЕРЕВАН – 2025

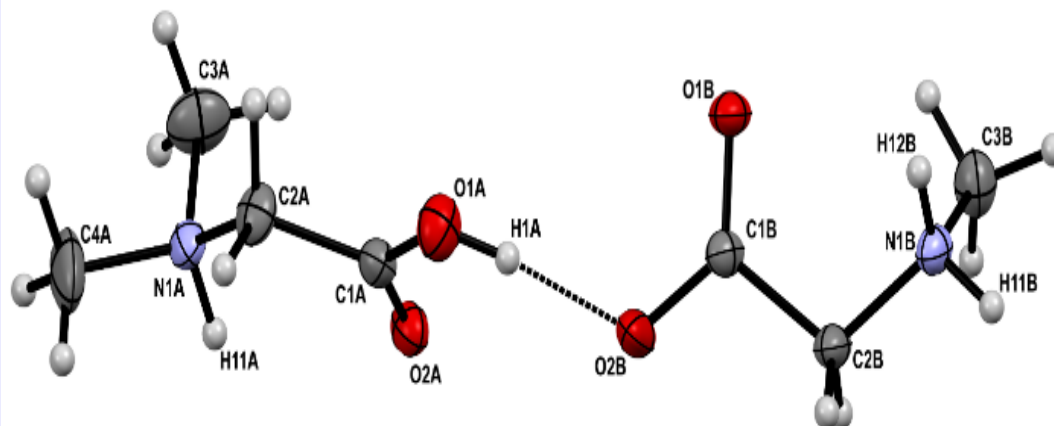
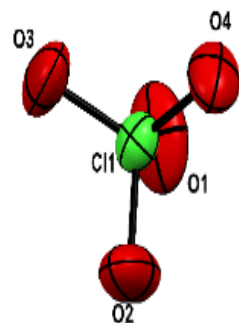
- Gayane S. Tonoyan, Gerald Giester, Aram M. Petrosyan, Salts containing different amino acids: **L-argininium (+) sarcosine halogenides**. Struct. Chem. 35 (3), 943–952 (2024).
- Gayane Tonoyan, Marek Szafranski, Gerald Giester, Aram Petrosyan, A method of obtaining the dimethylglycinium sarcosine perchlorate crystal with a dimeric cation of the type $[(A(1)^+ \cdots A(2))]$ containing different amino acids and a crystal with pyroelectric properties obtained by this method. Armenian Patent #936 Y (2025). Official bulletin of Intellectual Property Office #01/2, page 7.

- G.S. Tonoyan, G. Giester, M. Szafranski, A.M. Petrosyan, Salts of amino acids with polar symmetry exhibiting a dimeric cation of the $[A(1)^+ \cdots A(2)]$ type. New type of polymorphism. J. Cryst. Growth 626 (2024) 127472.

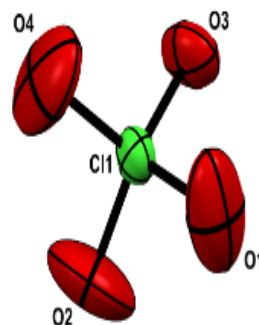
Molecular structures of (SarH $\cdots$ DMG)(ClO $_4$) (*Pc* space group) and (DMGH $\cdots$ Sar)(ClO $_4$) (*Pna*2 $_1$ space group). New type of polymorphism.



(SarH $\cdots$ DMG)ClO $_4$



(DMGH $\cdots$ Sar)ClO $_4$



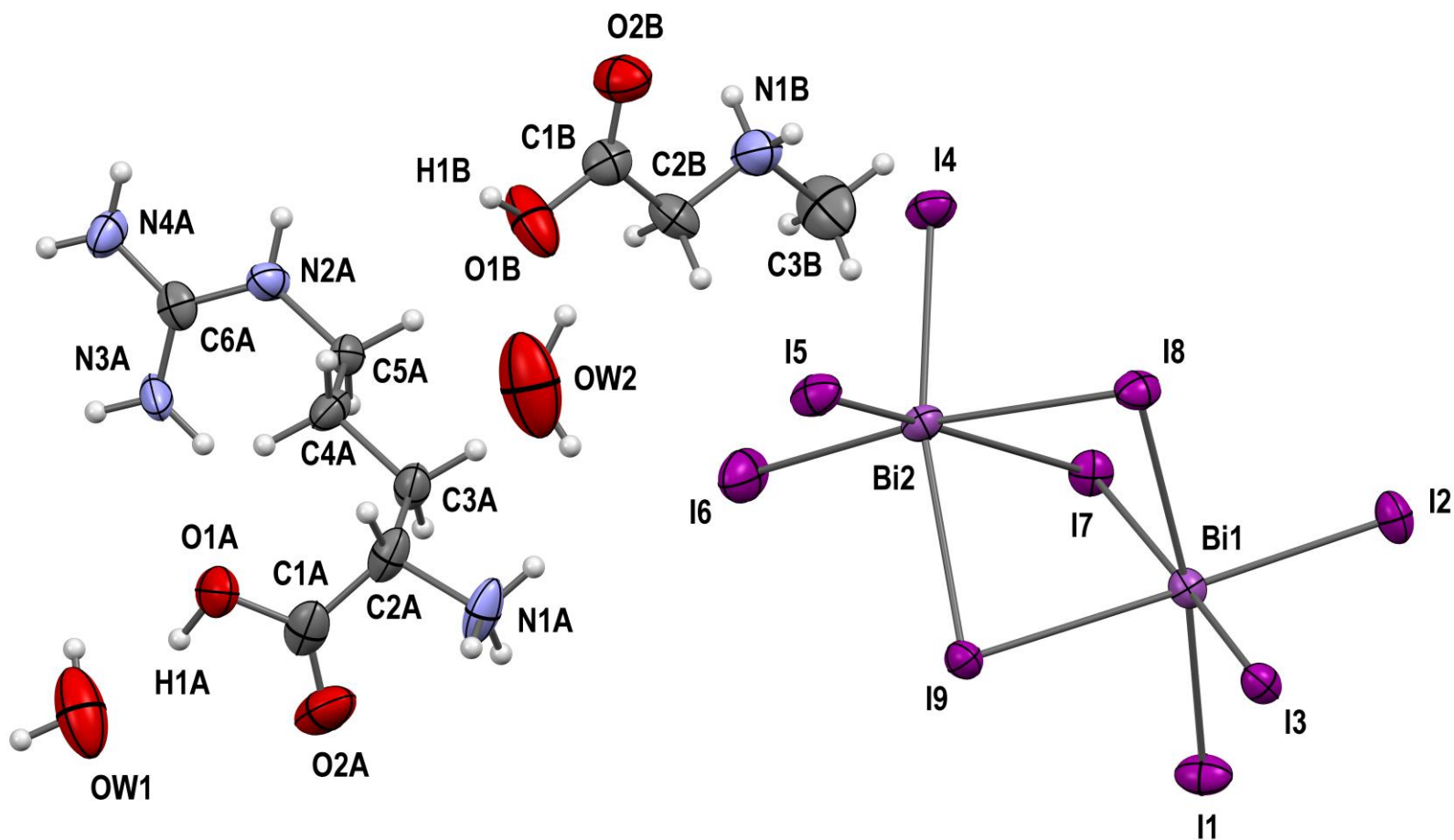
- We called this type polymorphism as hydrogen position dependent polymorphism, (HPD-polymorphism).

- It was interesting to know, is it possible to obtain halogenobismuthate salts containing different amino acids.

Աղյուսակ 1. Ստացված բյուրեղները, սիմետրիայի տարածական խումբը, տարրական բջջի (Z) և անկախ մասի (Z') ֆորմուլային միավորների թվերը: #-ը ընդհանուր թիվն է, ##-ը 4-րդ տարվա ընդացքում:

#	##	Բյուրեղ	Տարած. խումբ	Z	Z'
108	1	(BetH)(PbBr ₃).H ₂ O	P2 ₁ /c	4	1
109	2	(BetH...BetH)(SnBr ₆)	P2 ₁ /n	2	0.5
110	3	(L-OrnH ₂)(I ₃)(I)(I ₂)	P1	2	2
111	4	(GuH) ₁₅ (I ₃) ₁₀ (I) ₅	C2/c	4	0.5
112	5	2Gly.(I ₂)	P $\bar{1}$	4	2
113	6	(DMGH) ₂ (BiCl ₅).H ₂ O	P2 ₁ /c	4	1
114	7	(L-AlaH...L-AlaH)(BiBr ₅)	P2 ₁ /n	4	1
115	8	(L-HisH ₂) ₂ (BiI ₆)(I).4H ₂ O	C2	2	0.5
116	9	(L-ArgH ₂)(SarH)(Bi ₂ I ₉).2H ₂ O	P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁	4	1
117	10	(L-ArgH ₂)(SarH)(BiI ₆).H ₂ O	P2 ₁	2	1
118	11	(L-ArgH ₂)(SarH)(BiBr ₆).H ₂ O	P2 ₁	2	1

Molecular structure of (L-ArgH₂)(SarH)(Bi₂I₉).2H₂O (I)
space group $P2_12_12_1$, $Z=4$, $Z'=1$



Hydrogen bonds formed by carboxyl groups in (I)

O1A-H1A...OW1

O1A-H1A (0.94(3) Å)

H1A...OW1 (1.84(3) Å)

O1A...OW1 (2.760(12) Å)

∠ O1AH1AOW1 (166(10)°)

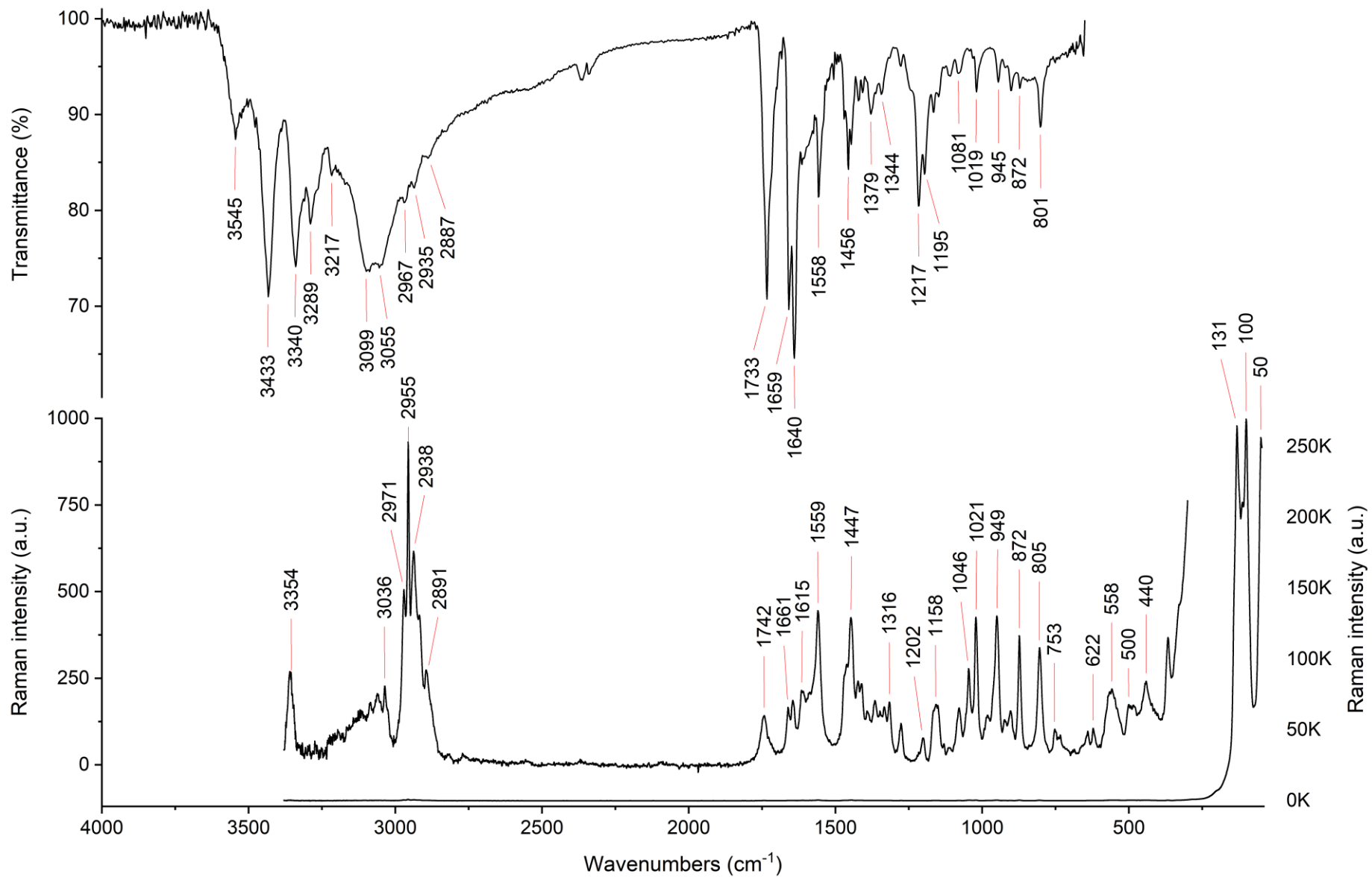
O1B-H1B...OW1

O1B-H1B (0.91(4) Å)

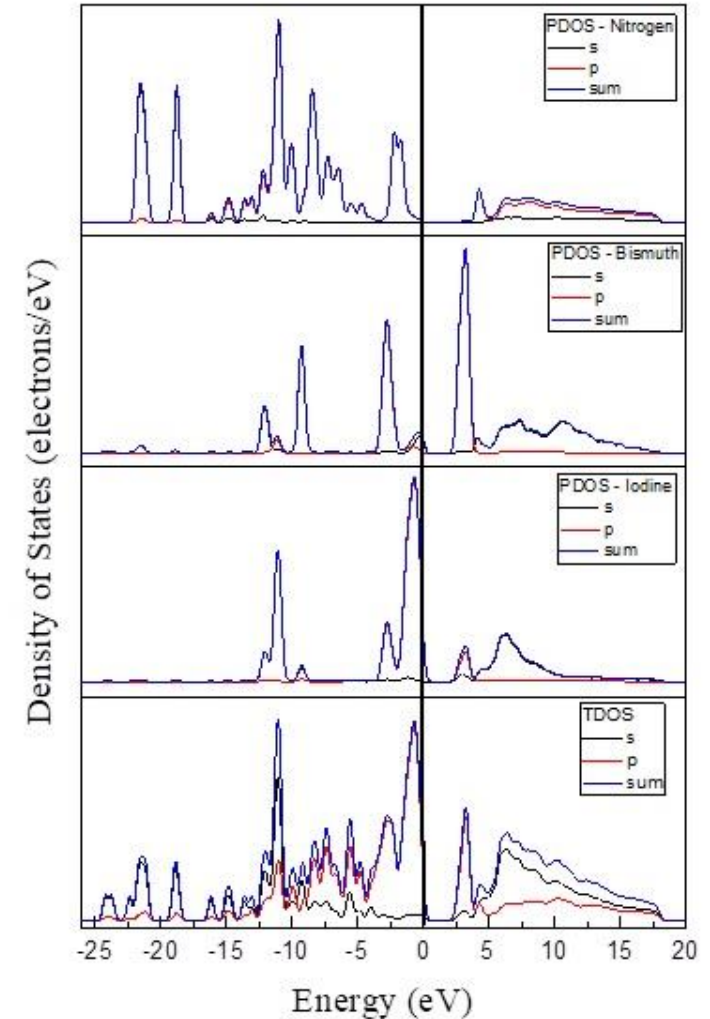
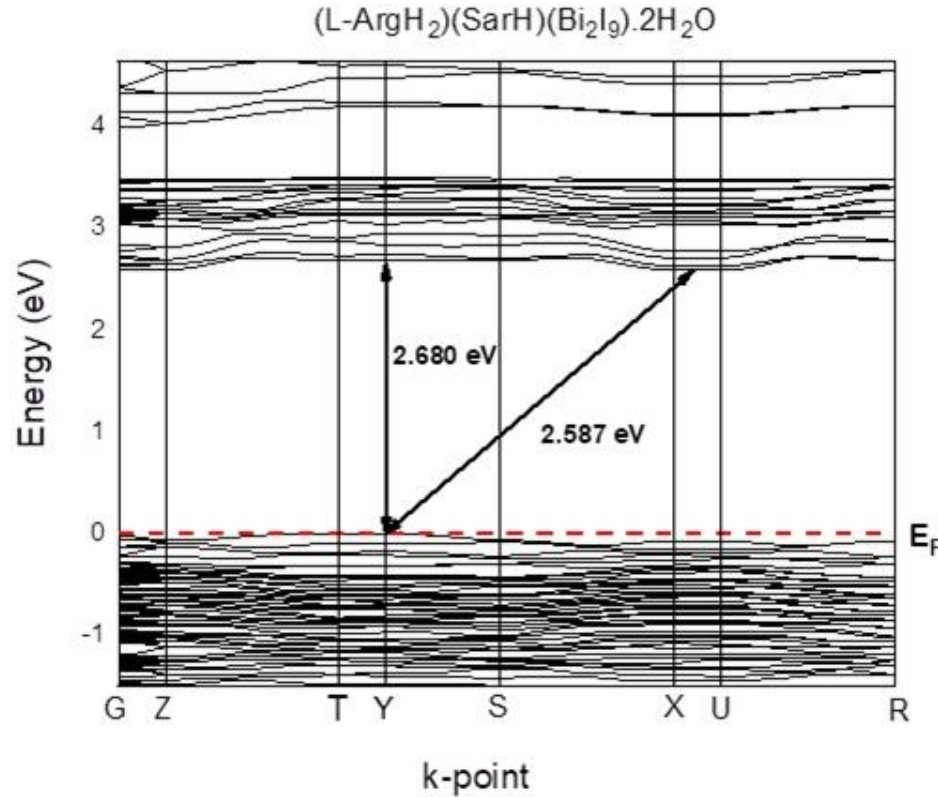
H1B1...OW1 (1.81(4) Å)

O1B...OW1 (2.680(13) Å)

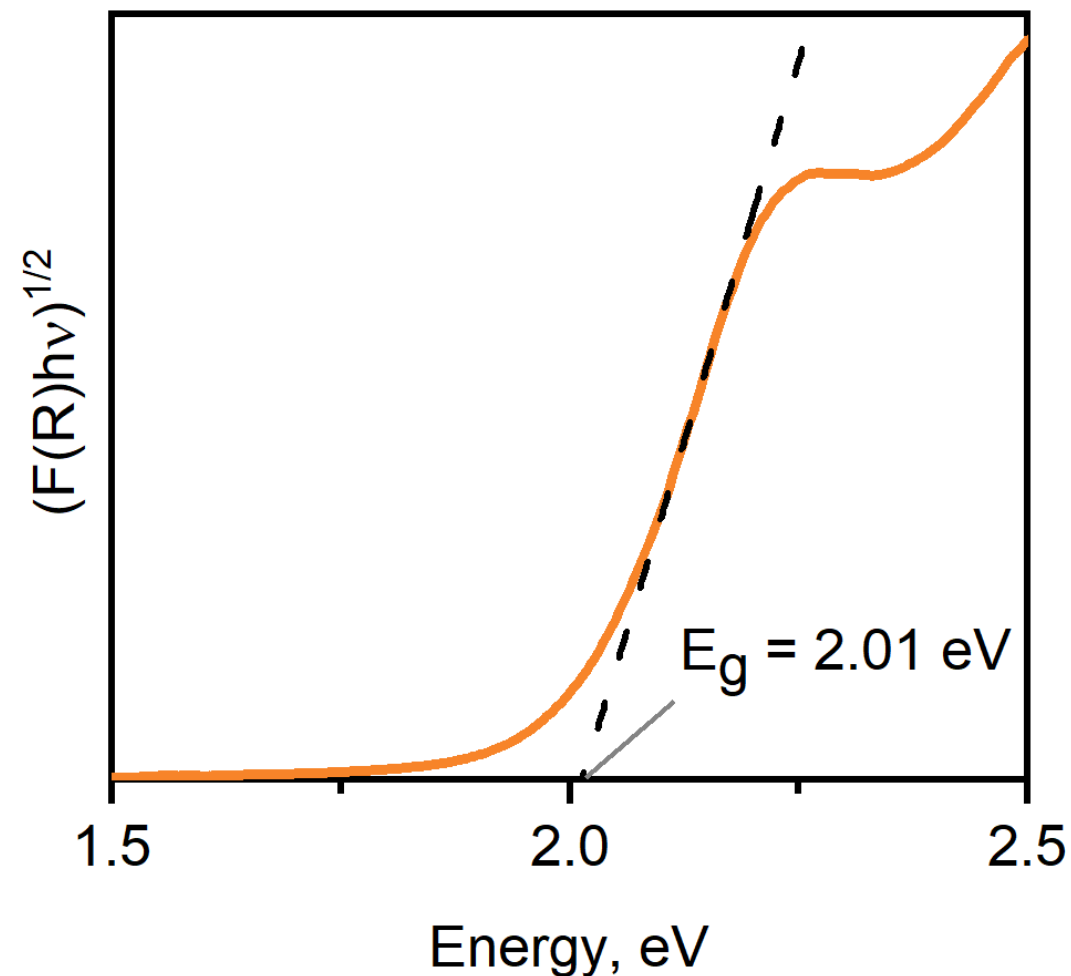
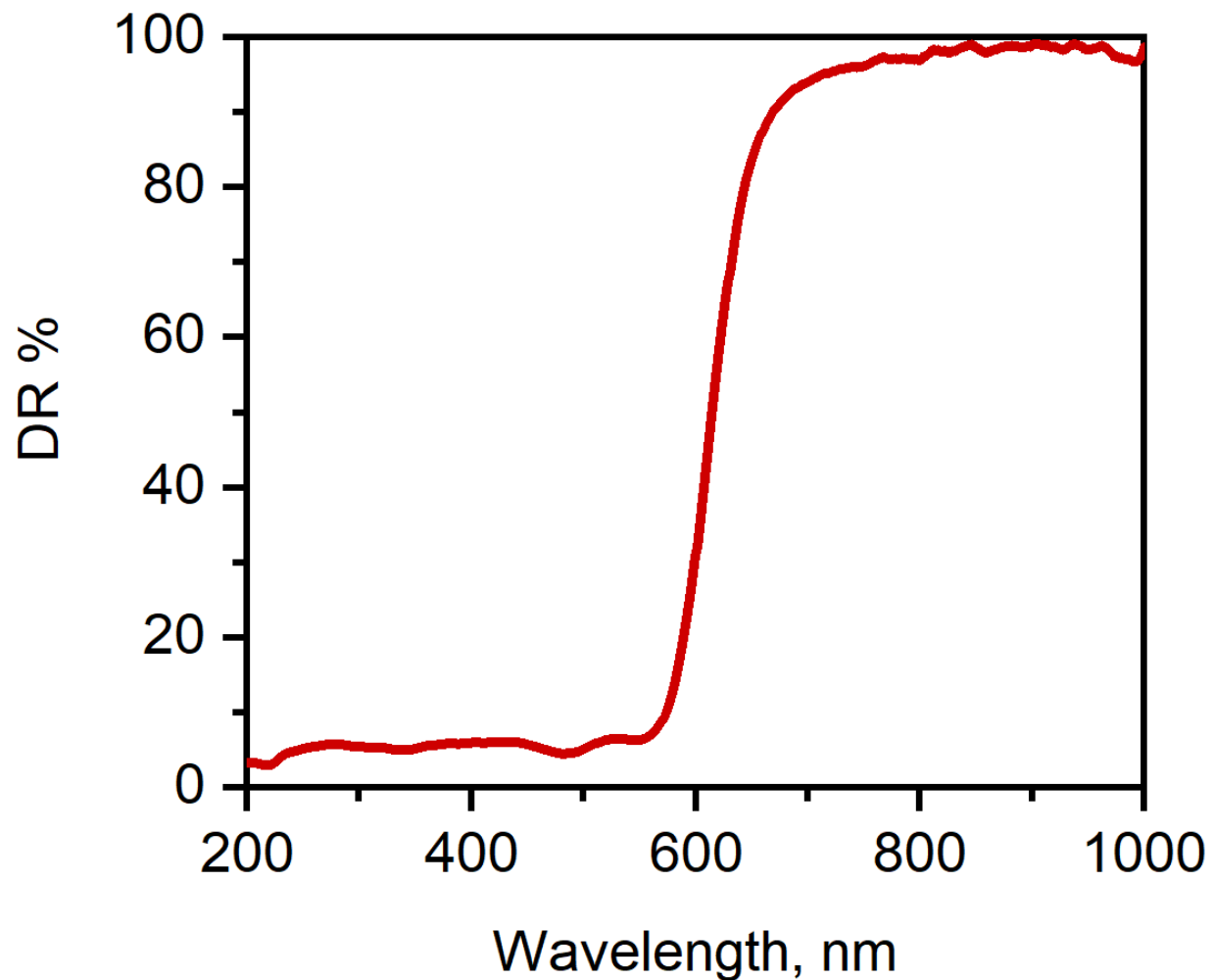
∠ O1BH1BOW1 (159(11)°)



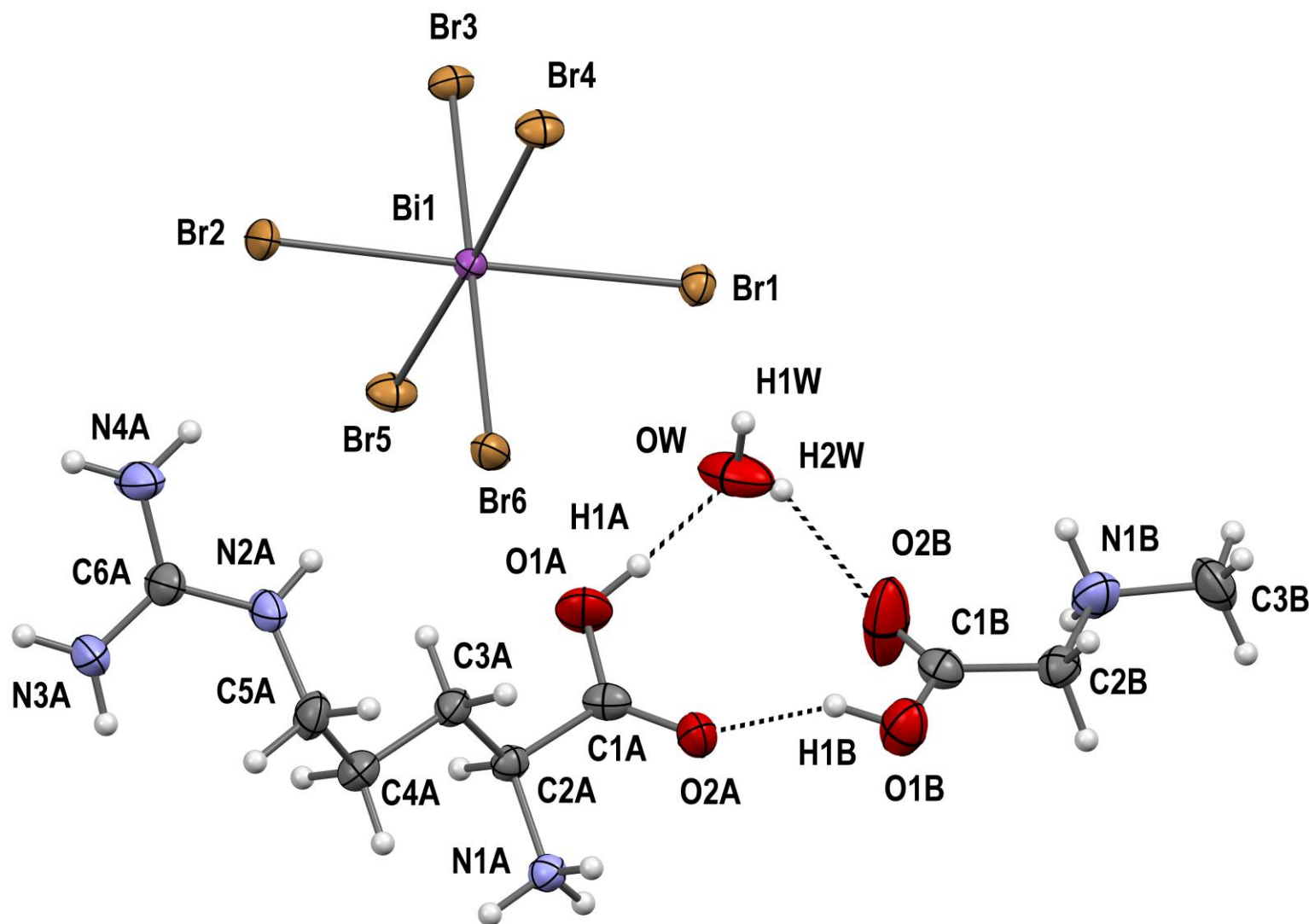
Calculated band structure plot of the $(\text{L-ArgH}_2)(\text{SarH})(\text{Bi}_2\text{I}_9) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ crystal. The E_F is referred to as the valence band maximum. Total and partial density of states for N, Bi and I atoms in the $(\text{L-ArgH}_2)(\text{SarH})(\text{Bi}_2\text{I}_9) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ crystal.



Diffuse reflectance spectra and Tauc plot for indirect transition of (I).



Molecular structure of (L-ArgH₂)(SarH)(BiBr₆).H₂O (II)
space group $P2_1$, $Z=2$, $Z'=1$



Hydrogen bonds formed by carboxyl groups in (II)

O1A-H1A...OW

O1A-H1A (0.88(8) Å)

H1A...OW (1.70(8) Å)

O1A...OW (2.566(7) Å)

∠ O1AH1AOW1 (165(9)°)

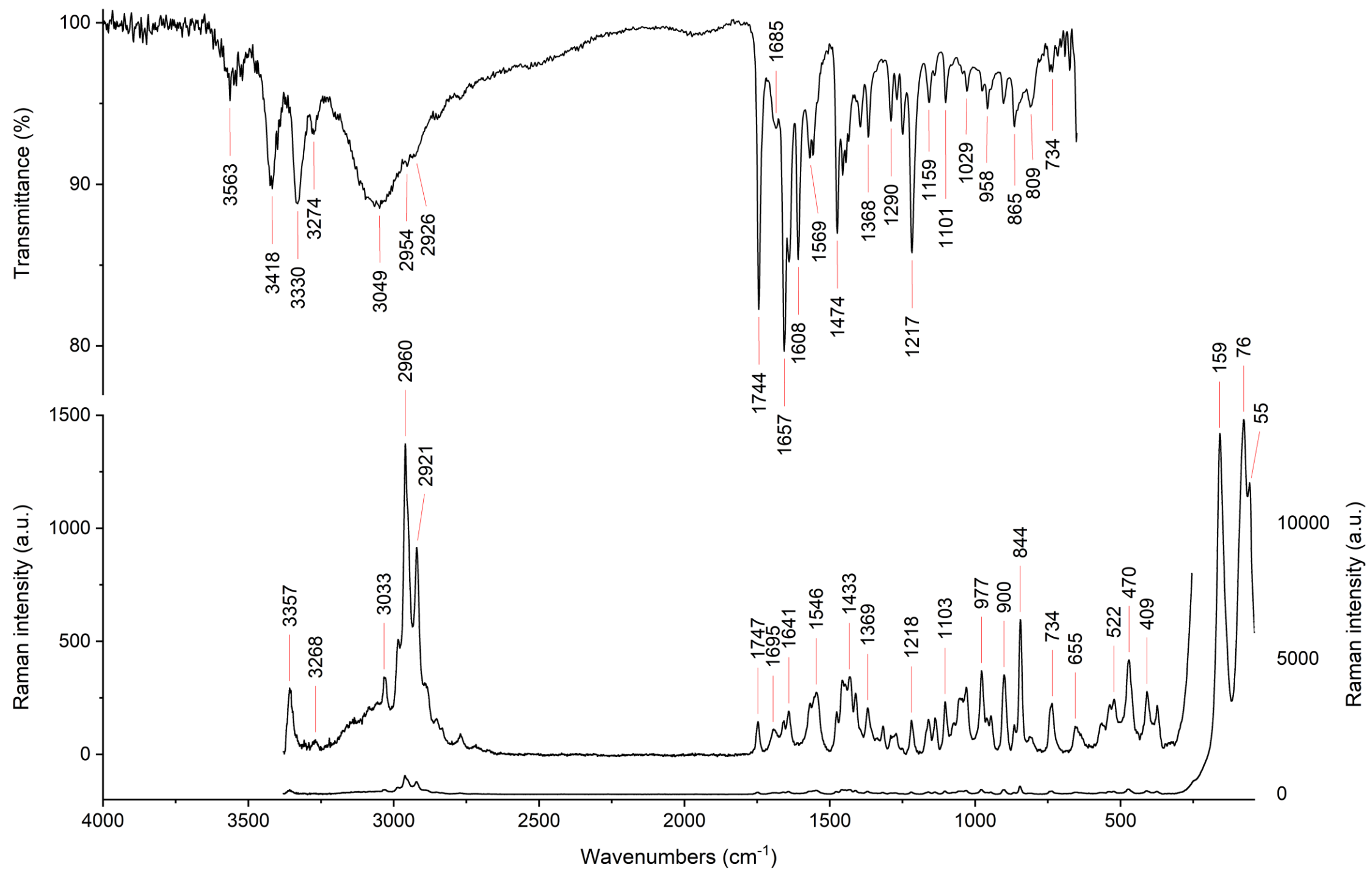
O1B-H1B...O2A

O1B-H1B (0.903(14) Å)

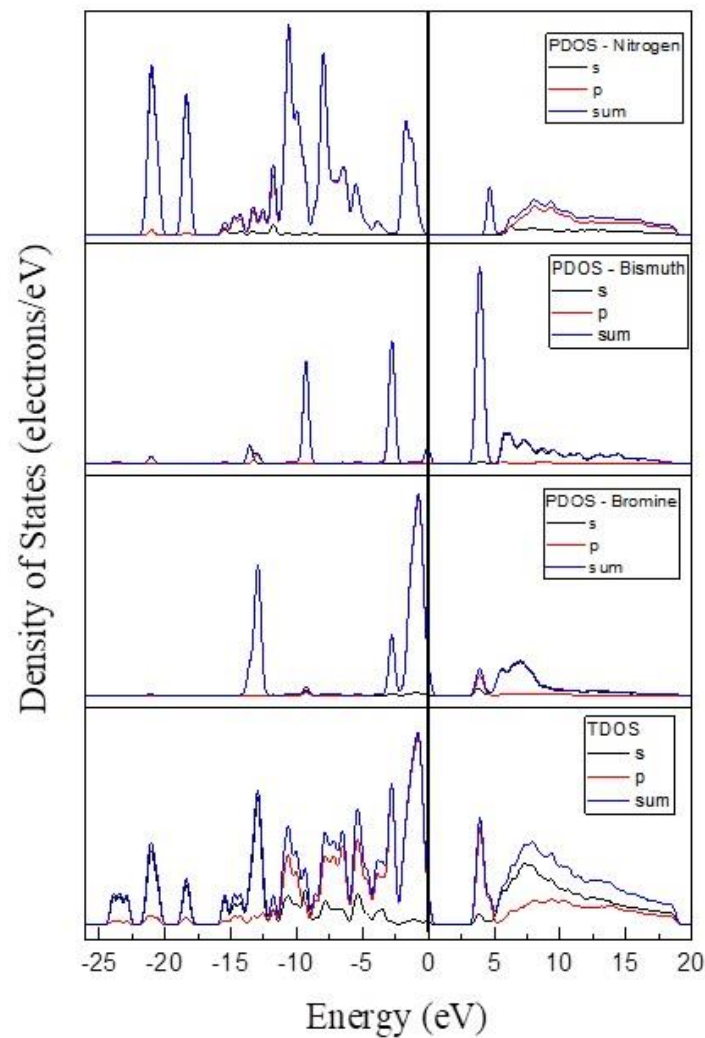
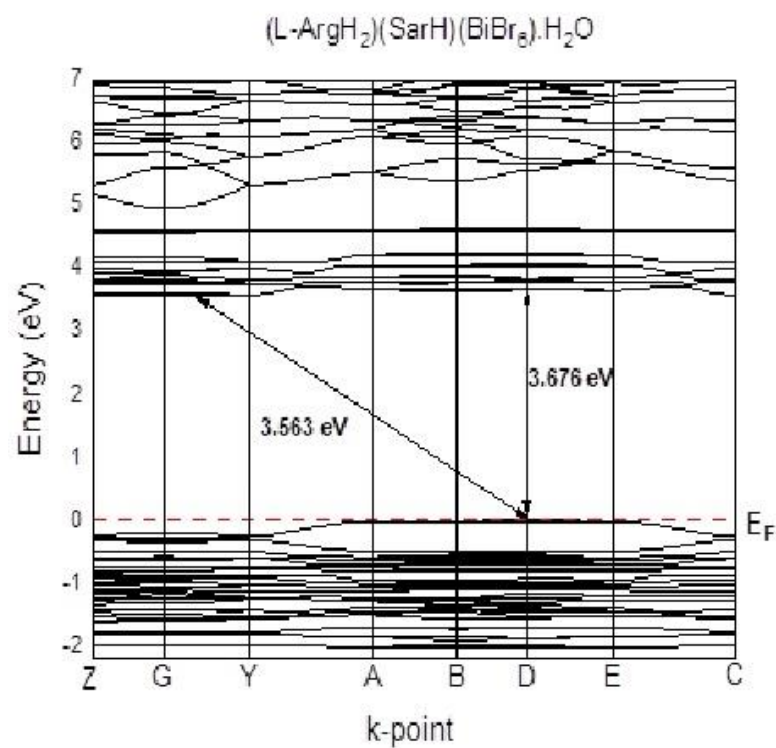
H1B...O2A (1.84(5) Å)

O1B...O2A (2.628(6) Å)

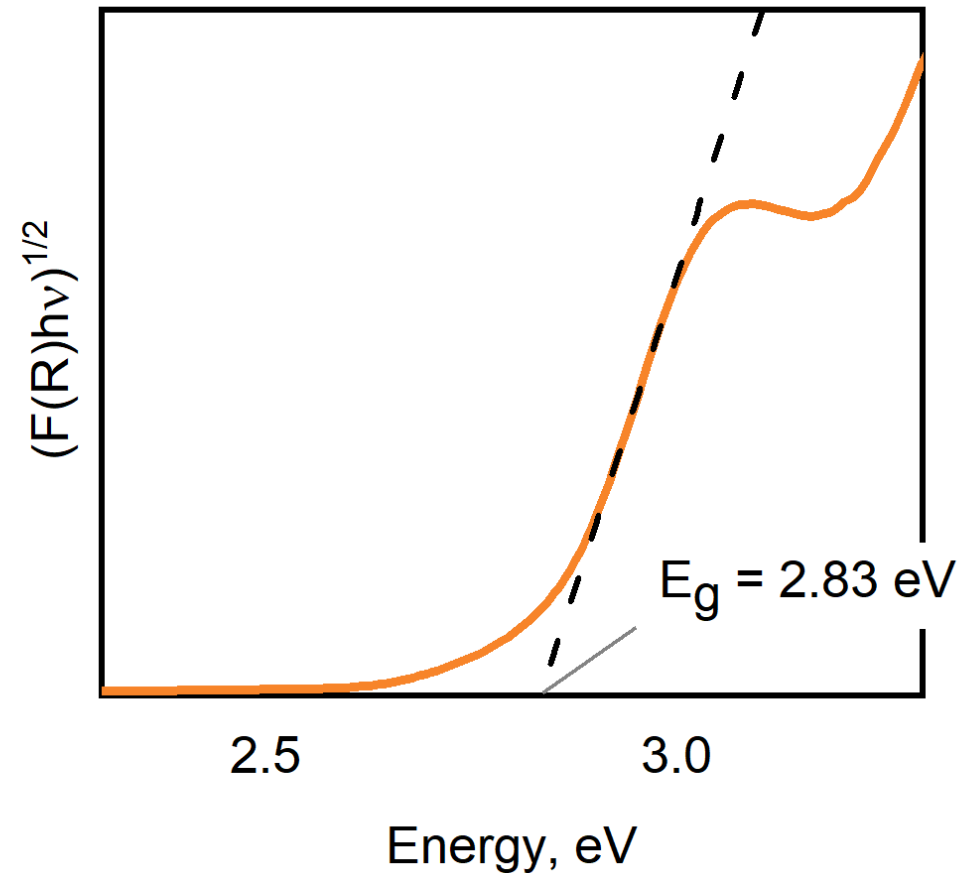
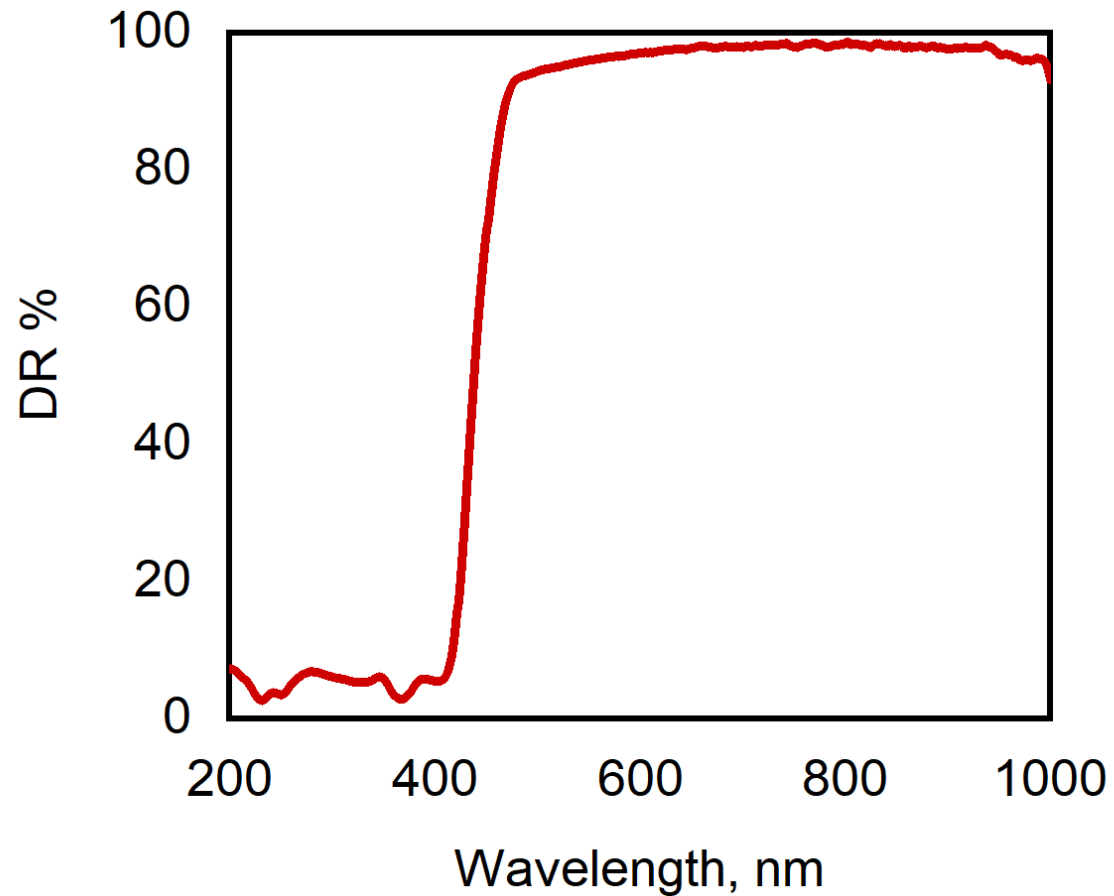
∠ O1BH1BO2A (145(7)°)



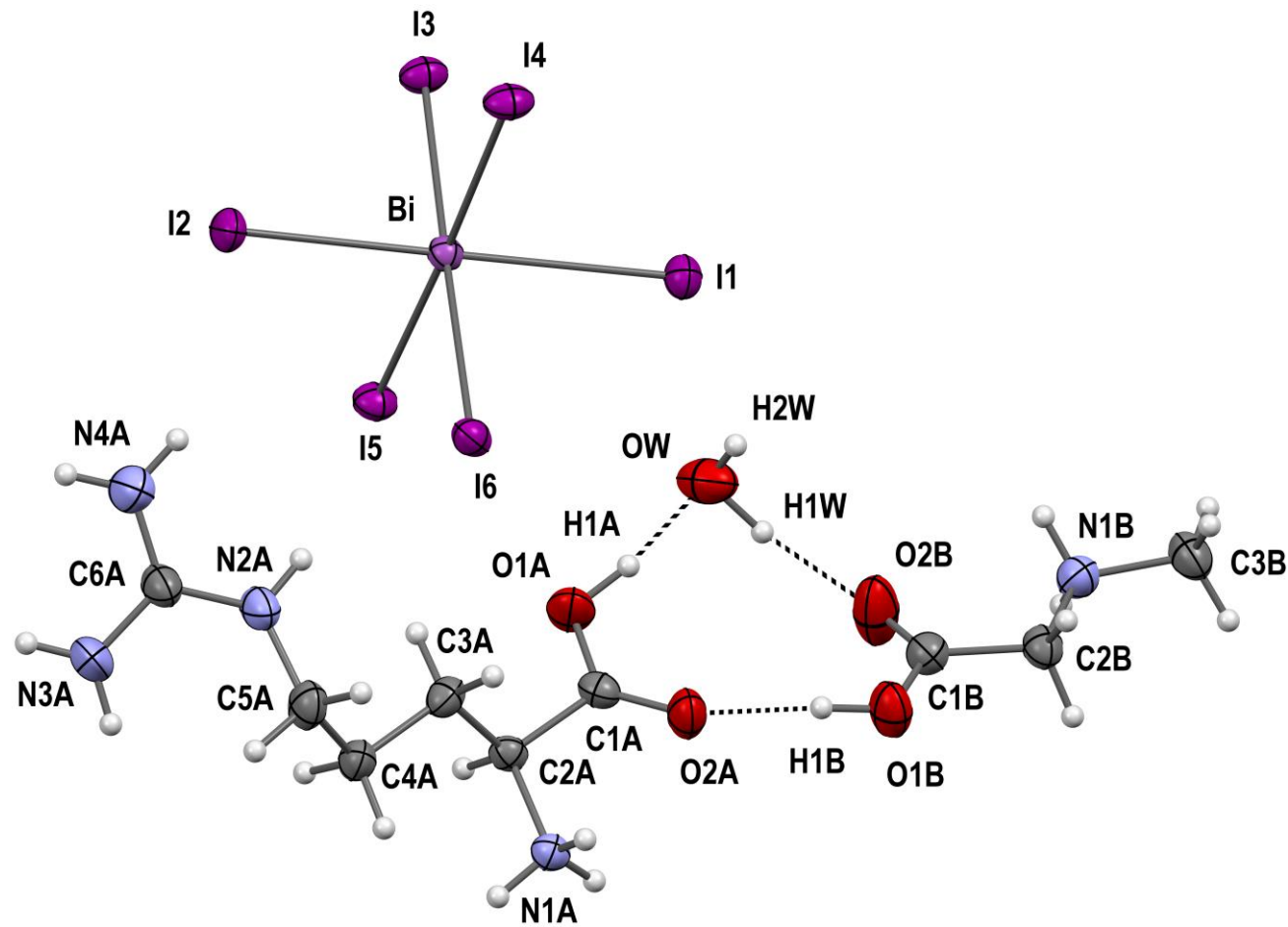
Calculated band structure plot of the $(\text{L-ArgH}_2)(\text{SarH})(\text{BiBr}_6)\cdot\text{H}_2\text{O}$ crystal.
Total and partial density of states for N, Bi and Br atoms in the $(\text{L-ArgH}_2)(\text{SarH})(\text{BiBr}_6)\cdot\text{H}_2\text{O}$ crystal



Diffuse reflectance spectra and Tauc plot for indirect transition of (II).

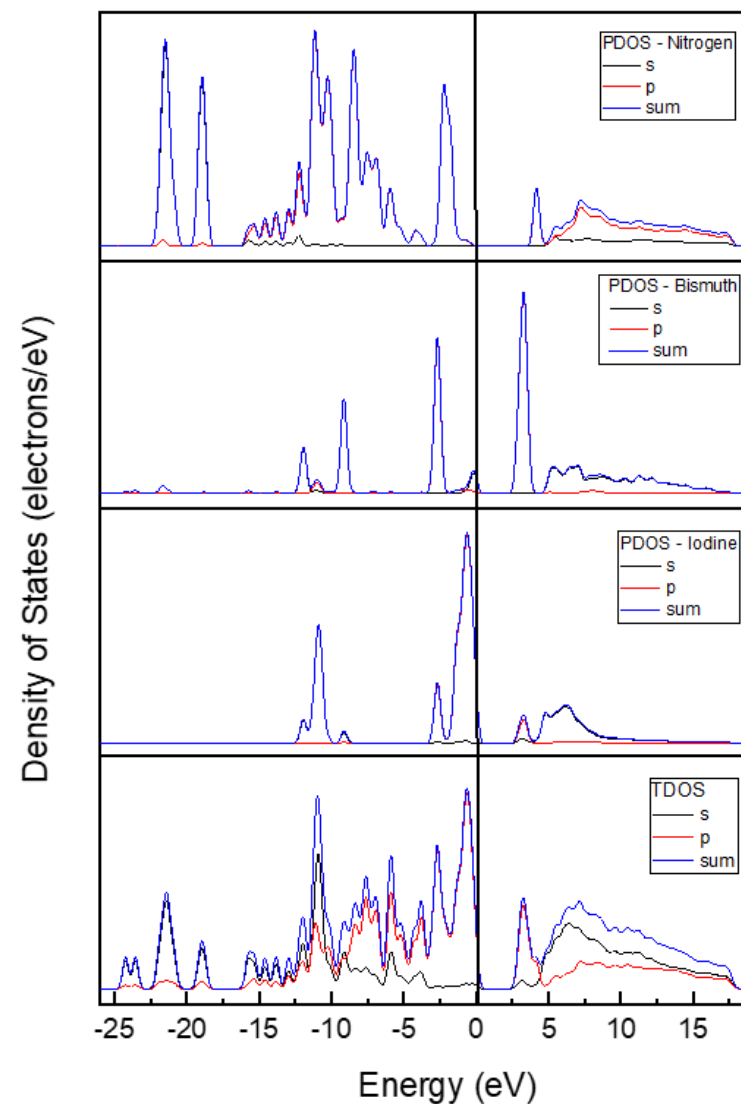
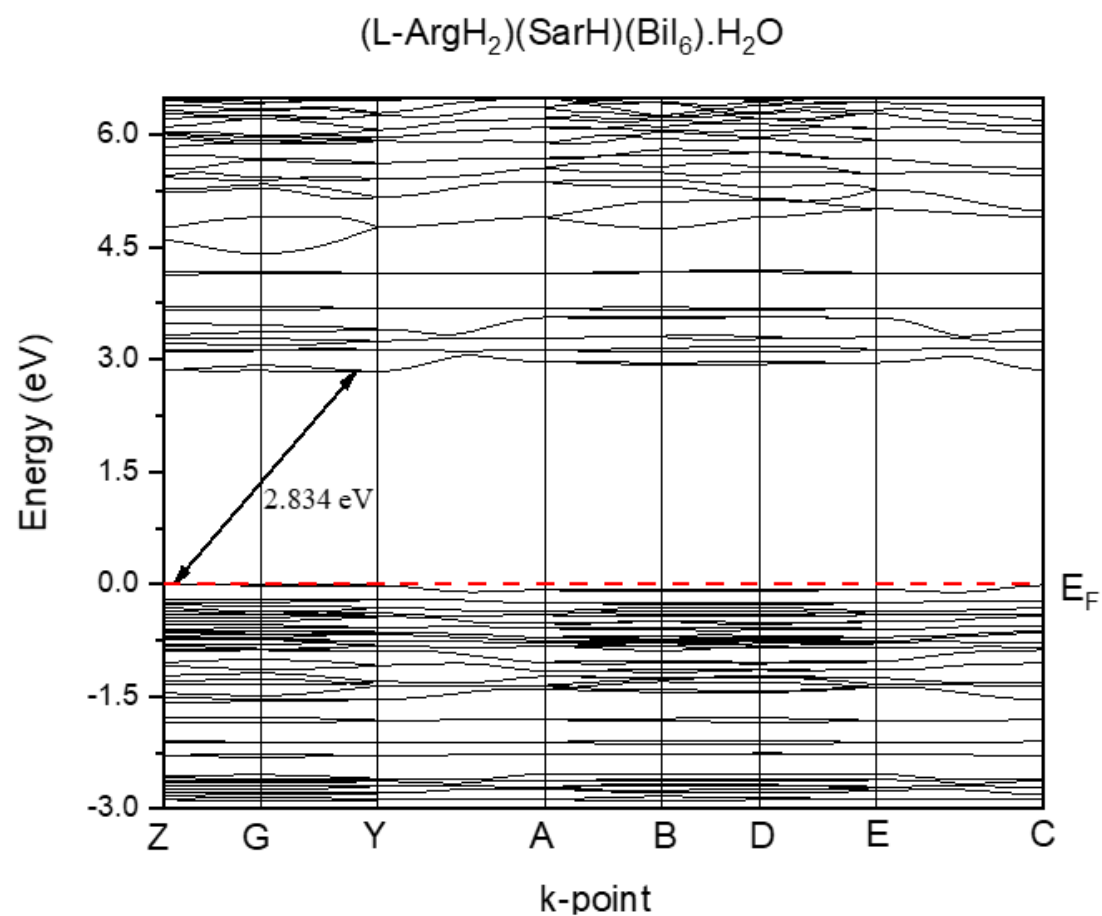


(L-ArgH₂)(SarH)(BiI₆).H₂O-ը (III) նույնականությունը է, (L-ArgH₂)(SarH)(BiBr₆).H₂O-ին



Calculated band structure plot of the (L-ArgH₂)(SarH)(BiBr₆).H₂O crystal.

Total and partial density of states for N, Bi and Br atoms in the (L-ArgH₂)(SarH)(BiI₆).H₂O crystal



Հոդվածներ

1. G.S. Tonoyan, G. Giester, V.V. Ghazaryan, A.H. Badalyan, R.Yu. Chilingaryan, A.A. Margaryan, A.H. Mkrtchyan, A.M. Petrosyan, Glycinium tribromidoplumbate(II). J. Phys. Conf. Ser. 2924 (2024) 012008. (7 pages).
2. G.S. Tonoyan, G. Giester, V.V. Ghazaryan, A.H. Badalyan, R.Yu. Chilingaryan, A.A. Margaryan, A.H. Mkrtchyan, A.M. Petrosyan, Hexa- β -alaninium tetradeca(bromido)tetraplumbate(II). J. Phys. Conf. Ser. 2924 (2024) 012011. (9 pages)
3. Vahram V. Ghazaryan, Gerald Giester, Ashkhen L. Zatikyan, Gayane S. Tonoyan, Aram M. Petrosyan, Hexahalogenobismuthates of Glycine. J. Phys. Conf. Ser. 2924 (2024) 012012 (8 pages, total with Suppl. 12 pages).

Շարունակություն

4. A.M. Petrosyan, G. Giester, G.S. Tonoyan, V.V. Ghazaryan, A.L. Zatikyan, R.Yu. Chilingaryan, A.A. Margaryan, A.H. Mkrtchyan, Iodides and polyiodides of L-arginine. J. Mol. Struct. 1321 (2025), 139688 (11 pages).
5. Aram M. Petrosyan, Gerald Giester, Milena S. Petrosyan, Vahram V. Ghazaryan, Ashkhen L. Zatikyan, Preparation and characterization of L-cystinium(2+) bis-iodide monohydrate and L-cystinium(2+) bis-triiodide. Struct. Chem. (2025). Published on-line 11 April 2025, doi:10.1007/s11224-025-02495-6
6. Aram M. Petrosyan, Gerald Giester, Ashkhen L. Zatikyan, Vahram V. Ghazaryan, Bromo- and iodobismuthates of L-proline with a $(A^+ \cdots A^+)$ type dimeric and a new type of tetrameric cations. Struct. Chem., published online 29.7.2025. doi: 10.1007/s11224-025-02570-y

Զեկուցումներ

1. A.M. Petrosyan, G. Giester, G.S. Tonoyan, M. Fleck, V.V. Ghazaryan Salts of amino acids with dimeric, trimeric and tetrameric cations: A review. Lecture at IV International Scientific School for Radiation Physics and Related Applications named after Academician Alpik Mkrtchyan (ASRP 2025), June 16-21, 2025, Yerevan-Gyumri, Armenia. Book of Abstracts, p. 21. (lecture)
https://school.iapp.am/publications/book_of_abstract/
2. V.V. Ghazaryan, G. Giester, G.S. Tonoyan, A.M. Petrosyan, Polyiodide of dimethylglycine (DMG- $\frac{1}{2}\text{H}\cdots\frac{1}{2}\text{H}$ -DMG)(I₃)(I₂). IV International Scientific School for Radiation Physics and Related Applications named after Academician Alpik Mkrtchyan (ASRP 2025), June 16-21, 2025, Yerevan-Gyumri, Armenia. Book of Abstracts, p. 38. (oral)
https://school.iapp.am/publications/book_of_abstract/
3. G.S. Tonoyan, G. Giester, A.M. Petrosyan, Halogenostannates of glycine, sarcosine, dimethylglycine, betaine and β -alanine. IV International Scientific School for Radiation Physics and Related Applications named after Academician Alpik Mkrtchyan (ASRP 2025), June 16-21, 2025, Yerevan-Gyumri, Armenia. Book of Abstracts, p. 39. (oral)
https://school.iapp.am/publications/book_of_abstract/
4. A.M. Petrosyan, G. Giester, M.S. Petrosyan, V.V. Ghazaryan, A.L. Zatikyan, Discovery of a symmetric (L-Orn(H)-H-L-OrnH) (3⁺)-cation in the structure of (L-Orn(H)-H-L-OrnH)(I₃)₃·4H₂O. IV International Scientific School for Radiation Physics and Related Applications named after Academician Alpik Mkrtchyan (ASRP 2025), June 16-21, 2025, Yerevan-Gyumri, Armenia. Book of Abstracts, p. 69. (poster) https://school.iapp.am/publications/book_of_abstract/

Շարունակություն

5. A.M. Petrosyan, G. Giester, G.K. Gevorkyan, G.S. Tonoyan, V.V. Ghazaryan, A.L. Zatikyan, The first halogenobismuthate salt containing two different amino acids. Intern. Conf. “NewTrendsChem” Sept 21-25, 2025, Yerevan, Armenia. Book of Abstracts, p. 96. (oral)
6. A.M. Petrosyan, G. Giester, V.V. Ghazaryan, M.S. Petrosyan, A.L. Zatikyan, Polyiodides of L-ornithine. Intern. Conf. “NewTrendsChem”, Sept 21-25, 2025, Yerevan, Armenia. Book of Abstracts, p. 242. (poster)
7. G.S. Tonoyan, G. Giester, V.V. Ghazaryan, A.M. Petrosyan, Halogenometallates of L-Arginine, Intern. Conf. “NewTrendsChem” Sept, 21-25, 2025, Yerevan, Armenia. Book of Abstracts, p.139. (oral)
8. V.V. Ghazaryan, G. Giester, G.S. Tonoyan, A.L. Zatikyan, A.M. Petrosyan, Mixed Salts of Amino Acids with Different Anions Incorporating Hexaiodobismuthate Anion. Intern. Conf. “NewTrendsChem”, Sept 21-25, 2025, Yerevan, Armenia. Book of Abstracts, p. 78. (oral)

The work was supported by the Science Committee of RA, in the frame of the research project # 21AG-1D015.

Շնորհակալություն ուշադրության համար