



УФИМСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ  
НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ

# **ДОСТИЖЕНИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ: ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ**

Сборник тезисов  
IX Всероссийской молодежной конференции  
(г. Уфа, 23 - 24 мая 2024 г.)

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РФ  
УФИМСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ НАУКИ И ТЕХНОЛОГИЙ**

**ДОСТИЖЕНИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ:  
ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ**

*Сборник тезисов  
IX Всероссийской молодежной конференции  
(г. Уфа, 23 – 24 мая 2024 г.)*

Научное электронное издание сетевого доступа

**Уфа  
РИЦ УУНиТ  
2024**

УДК 546.1  
ББК 24.1  
Д70

*Печатается по решению кафедры высокомолекулярных соединений  
и общей химической технологии и кафедры органической  
и биоорганической химии УУНиТ  
Протокол № 9 от 14.05.2024 г.*

***Редакционная коллегия:***

д-р хим. наук, профессор **Р.М. Ахметханов** (*отв. редактор*);  
д-р хим. наук, профессор **Э.Р. Латыпова**;  
канд. хим. наук, доцент **А.Х. Фаттахов**;  
канд. хим. наук, доцент **И.В. Сафарова**;  
канд. хим. наук, доцент **А.С. Шуршина**;  
ассистент **Т.Т. Садыков**;  
ассистент **А.С. Сатгарова**

Достижения молодежи ученых: химические науки: тезисы докладов  
Д70 IX Всероссийской молодежной конференции (г. Уфа, 23 – 24 мая  
2024 г.) / отв. ред. Р.М. Ахметханов. [Электронный ресурс] / Уфимск.  
ун-т науки и технологий. – Уфа: РИЦ УУНиТ, 2024. – 340 с. – URL:  
<https://uust.ru/media/documents/digital-publications/2024/031.pdf> – Загл. с  
титула экрана.

ISBN 978-5-7477-5884-1

В сборнике представлены материалы IX Всероссийской молодежной конференции «Достижения молодых ученых: химические науки», которая проводится с целью развития научного сотрудничества, обсуждения и обмена результатами исследований между молодыми учеными, повышения уровня подготовки профильных специалистов, систематизации и поиска решения актуальных проблем и тенденций развития исследований в области неорганической, органической, аналитической, физической химии и химии высокомолекулярных соединений.

Предназначено для студентов и аспирантов химических направлений вузов, а также для молодых ученых.

Тексты воспроизводятся с представленных авторами оригиналов.

УДК 546.1  
ББК 24.1

ISBN 978-5-7477-5884-1

© УУНиТ, 2024

**СЕКЦИЯ**  
**«НЕОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»**



УДК 549.748.21;622.341.2(574)

## О ПЕРСПЕКТИВАХ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МАРГАНЦЕВЫХ РУД ЦЕНТРАЛЬНОГО КАЗАХСТАНА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ОКСИДНЫХ ФАЗ МАРГАНЦА

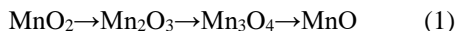
Байкенов Е.А., Жандильденова А.К., Сафаров Р.З.

*ЕНУ им. Л.Н. Гумилева, Астана, Казахстан*

Научная проблема данного исследования заключается в поиске способов получения целевых минеральных фаз, таких как биксбиит ( $Mn^{2+}Mn^{3+}O_3$ ) и гаусманнит  $Mn_3O_4$  из марганцевых руд. В многочисленных публикациях описаны способы синтеза различных фаз оксида марганца, таких как гаусманнит. Наиболее распространенными способами являются осаждение, золь-гель синтез и гидротермальный синтез. Например, в работе [1] показан синтез пластинчатого гаусманнита ( $Mn_3O_4$ ) с использованием трех различных протоколов: соосаждения, золь-гель синтеза и гидротермального синтеза с использованием соосаждения.

Также сообщается о некоторых исследованиях методов высокотемпературного восстановления марганцевых руд и поведения газового восстановления. В работе [2] для синтеза наночастиц гаусманнита из марганцевых руд месторождения Западная Суматра (Индонезия) использовался метод высокоэнергетического измельчения. Синтез проводился при температуре  $700\text{ }^\circ\text{C}$  и времени размола 8 ч, размер полученных наночастиц составил 90,50 нм. О восстановлении марганцевых руд сообщалось в интересной работе о процессе спекания среднесортной пиролюзитовой марганцевой руды из шахты Karangnunggal (Западная Ява, Индонезия) при  $1200\text{ }^\circ\text{C}$  в газообразном метане [3]. Было установлено, что пиролюзит ( $MnO_2$ ) восстанавливается до гаусманнита ( $Mn_3O_4$ ), манганозита ( $MnO$ ) и карбида марганца ( $Mn_7C_3$ ).

Превращение  $MnO_2$  в богатую  $MnO$  фазу при  $950\text{ }^\circ\text{C}$  описано в работе [4], где также сообщается, что при повышении температуры восстановления отношение кислорода к марганцу уменьшается. В этих реакциях кислород, включенный в структуру оксидов, выступает в качестве восстановителя, подвергаясь окислению от  $O^{-2}$  до  $O^0$  при отщеплении от  $Mn$ . Восстановление  $MnO_2$  до  $MnO$  происходит в следующей последовательности:



Таким образом, спекание марганцевых руд в различных условиях позволяет получать различные оксидные фазы марганца. Однако анализ научных материалов в научных базах данных показывает, что исследований, посвященных получению оксидных фаз из марганцевых руд методами термомеханической обработки, недостаточно. Следует отметить, что не только применительно к марганцевым рудам Центрального Казахстана, но и

на мировом уровне описание процессов получения таких фаз из руды встречается редко. Этот факт подчеркивает не только актуальность, но и недостаточность исследований в области переработки марганцевых руд с целью получения оксидных продуктов.

Нами был изучен фазовый состав сложнооксидных метаморфических марганцевых руд Центрального Казахстана (браунит-псиломелановая оксидная руда, браунит-гематитовая руда) до и после спекания в интервале температур 600-1100°C в воздушной атмосфере. Корреляция между температурой спекания и элементным и фазовым составом руд исследована с помощью энергодисперсионного рентгенофлуоресцентного анализа (EDX), рентгенофазового дифрактометрического анализа (XRD) и рентгенофлуоресцентного анализа (XRF).

В результате были получены следующие результаты:

1. Среднее содержание элемента Mn составило 83,3 % для браунит-гематитовой руды и 70,9 % для браунит-псиломелановой оксидной руды.

2. Для браунит-гематитовой руды гаусманнит становится основной фазой при максимальных температурах в исследуемом интервале. При температуре 1100 °C доля гаусманнита достигала 95,2%.

3. Для браунит-псиломелановой оксидной руды при температуре 1100 °C основной фазой являлся биксбиит, доля которого составляла 79,3%.

Таким образом, изученные марганцевые руды являются перспективным сырьем для различных процессов технологической переработки. Изученные браунит-гематитовые и браунит-псиломелановые оксидные руды открывают перспективы для получения продуктов на основе термически устойчивых фаз гаусманнита и биксбита. Поиск оптимальных условий спекания может позволить получить оптимальный фазовый состав продукта.

Финансирование: Данное исследование выполнено в рамках проекта, финансируемого Комитетом науки Министерства образования и науки Республики Казахстан (Грант № AP23488858).

#### Литература

1. Rani B.J., Ravina M., Ravi G., Ravichandran S., Ganesh V., Yuvakkumar R. Synthesis and Characterization of Hausmannite (mn 3 O 4 ) Nanostructures // Surfaces and Interfaces. – 2018. – Vol. 11. – P. 28–36.
2. Ratnawulan, Prasetyo F., Fauzi A., Ramli. Synthesis and characterization Hausmannite (Mn3o4) nanoparticle of manganese ores prepared by high-energy milling // International Journal of Advanced Science and Technology. – 2020. – Vol. 29, № 3. – P. 8332–8339.
3. Aripin H., Priatna E., Busaeri N., Hiron N., Sabchevski S. Reduction behavior of medium grade manganese ore from Karangnunggal during a sintering process in methane gas // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. – 2019. – Vol. 550, № 1. – P. 012036.

4. Moradkhani D., Malekzadeh M., Ahmadi E. Nanostructured MnO<sub>2</sub> synthesized via methane gas reduction of manganese ore and hydrothermal precipitation methods // Transactions of Nonferrous Metals Society of China. – 2013. – Vol. 23, № 1. – P. 134–139.  
© Байкенов Е.А., Жандильденова А.К., Сафаров Р.З., 2024

УДК 661.856

## ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ И ФАЗОВОГО СОСТАВА НАНОЧАСТИЦ КАРБОНАТА МЕДИ, СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ МЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗОЙ

Блинов А.В., Ясная М.А., Гвозденко А.А., Серов А.М., Татов А.В.  
*Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, Россия*

В последние годы идёт процесс интенсивного изучения структуры и свойств наноразмерных объектов и материалов на их основе. Особое место занимают наночастицы медьсодержащих соединений. Основным способом получения наночастицы является химическое восстановление [1]. Наночастицы меди обладают высокой поверхностной энергией, устойчивой сорбцией биомолекул и магнитными свойствами. Антибактериальные свойства меди проявляются в уничтожении вирусов и бактерий, [2, 3]. Карбонат меди является светло-зеленым порошком. Его применяют в различных отраслях, например, для приготовления минеральных добавок в корма животных и в борьбе против грибковых заболеваний растений, создают красители, получают медь и ее соединения. В качестве стабилизатора используют метилцеллюлозу, которая является эмульгатором и стабилизатором в химической, пищевой, медицинской и прочих сферах промышленности [4, 5].

В связи с вышесказанным, было проведено исследование микроструктуры и фазового состава наночастиц карбоната меди, стабилизированных метилцеллюлозой.

Синтез образцов проводили методом химического осаждения в водной среде. Полученные образцы исследовались методом порошковой дифрактометрии (рентгенофазовый анализ) на рентгеновском дифрактометре Empyrean серии 2. Исследование микроструктуры проводили на сканирующем электронном микроскопе MIRA-LMN. Результаты исследования фазового состава представлены на рис.1.

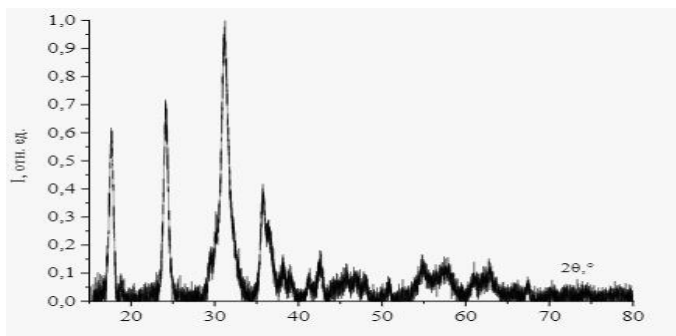


Рис. 1. Дифрактограмма образца наноразмерного карбоната меди, стабилизированного метилцеллюлозой

Анализ полученной дифрактограммы (рис. 1) показал, что фазовый состав образца наноразмерного карбоната меди составляет основной карбонат меди с химической формулой  $\text{Cu}_2(\text{OH})_2\text{CO}_3$ .

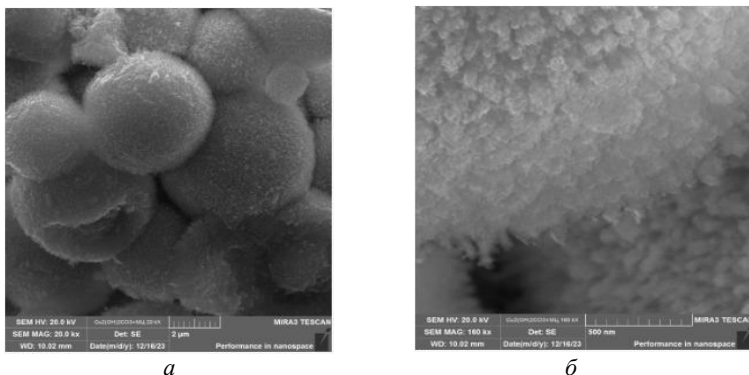


Рис. 2. СЭМ-микрофотографии образца наноразмерного карбоната меди, стабилизированного метилцеллюлозой. *а* – увеличение в 20 000 раз; *б* – увеличение в 160 000 раз.

Анализ полученных данных показал, что образец состоит из сферических агрегатов диаметром от 2 до 10 мкм, образованных из наночастиц от 45 до 90 нм.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (проект FSRN-2023-0037).

#### Литература

1. Носовская Е. А., Кудрявцева Е. В., Буринская А. А. Экологичные способы получения наночастиц меди в растворах.
2. Ромашко С. Н., Юрин В. М. Влияние наночастиц меди на физиологические характеристики каллусной культуры *Catharanthus roseus* (L.) G. Don.

3. Veerapandian M., Sadhasivam S., Choi J., Yun K. Glucosamine functionalized copper nanoparticles: Preparation, characterization and enhancement of anti-bacterial activity by ultraviolet irradiation // Chemical Engineering Journal. 2012. V. 209. P. 558-567.
4. Алешин В. Стабилизаторы-эмульгаторы для мороженого. Что происходит на рынке. Продукты Люксайс™/В. Алешин//Мир мороженого и быстрозамороженных продуктов. – 2012. – №2. – С. 24-25.
5. Бондарь В. А., Смирнова Г. Н., Суворова В. Г., Курицын В. М., Шамолин А. И., Ротенберг И. М., Прокофьева М. В. Способ получения метилцеллюлозы.  
© Блинов А.В., Ясная М.А., Гвозденко А.А., Серов А.М., Татов А.В., 2024

УДК 546.865-31

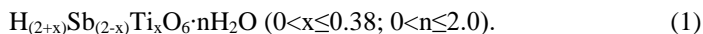
## СИНТЕЗ И СТРУКТУРА ТИТАНСУРЬМЯНОЙ КИСЛОТЫ

Волокитина Е.О., Гусакова Ю.Н., Бурмистров В.А.

*Челябинский Государственный Университет, Челябинск, Россия*

В настоящее время представляют интерес материалы для электрохимических источников тока, обладающие высокой протонной проводимостью [1]. Одним из таких соединений является полисурьмяная кислота (ПСК) [2]. Улучшить свойства ПСК делается возможным путем ее допирования изо- и гетеровалентными ионами [3]. В связи с этим актуальными являются исследования структуры и физико-химических свойств титансурьмяной кислоты (ТСК).

Синтез ТСК проводили путём гидролиза предварительно окисленной азотной кислотой трёххлористой сурьмы в присутствии различного количества  $TiCl_4$  в пропорциях  $Sb:Ti$ , равных 1:3, 1:5, 1:10 и 1:15. Далее образцы отмывали от соляной кислоты до отсутствия анионов хлора и прокалили при температуре  $100^\circ C$ . Образцы ТСК представляли собой порошки белого цвета. Соотношение  $Sb:Ti$  в образцах определили при помощи рентгенофлуоресцентного анализа (табл.), что позволило предложить состав, который можно описать химической формулой:



Исследование структуры ТСК провели с использованием рентгеновского дифрактометра Bruker D8 ADVANCE ( $CuK_{\alpha 1}$ -излучение) в диапазоне углов дифракции  $10 < 2\theta < 70$  град. По данным рентгеновского анализа все образцы имеют набор дифракционных максимумов, характерный для кубической сингонии, а анализ законов погасания рефлексов ( $h, k, l$ ) свидетельствует о том, что синтезированные образцы имеют структуру типа пирохлора, пространственная группа симметрии  $Fd3m$ . Проведённый анализ методом Ритвельда позволил уточнить заполнения кристаллографических позиций структуры типа пирохлора, согласно которому ионы  $Sb^{+5}$  и  $Ti^{+4}$  располагаются в позициях 16c и

образуют октаэдры с анионами кислорода и гидроксильными группами, занимающими позиции 48f. Ионы  $\text{H}_3\text{O}^+$  и молекулы  $\text{H}_2\text{O}$  статистически заполняют 8b и 16d позиции. По-видимому, при допировании ПСК ионы  $\text{Ti}^{+4}$  замещают  $\text{Sb}^{+5}$  в тех же позициях – 16с, образуя твёрдые растворы. Введение титана в ПСК приводит к уменьшению параметра элементарной ячейки (табл.), что обусловлено меньшим ионным радиусом ионов титана по сравнению с радиусом ионов сурьмы.

Таблица

Составы полученных образцов ТСК, количество ионов  $\text{Sb}^{+5}$  и  $\text{Ti}^{+4}$  по данным рентгенофлуоресцентного анализа и параметр  $a$  кристаллической решётки

x	Брутто-формула образца	Количество, ат%		a, Å
		Sb	Ti	
0.09	$\text{H}_{2.09}\text{Sb}_{1.91}\text{Ti}_{0.09}\text{O}_6 \cdot n\text{H}_2\text{O}$	95.24	4.76	10.362±0.0005
0.15	$\text{H}_{2.15}\text{Sb}_{1.85}\text{Ti}_{0.15}\text{O}_6 \cdot n\text{H}_2\text{O}$	92.19	7.81	10.362±0.0005
0.23	$\text{H}_{2.23}\text{Sb}_{1.77}\text{Ti}_{0.23}\text{O}_6 \cdot n\text{H}_2\text{O}$	89.38	10.62	10.364±0.0005
0.38	$\text{H}_{2.38}\text{Sb}_{1.62}\text{Ti}_{0.38}\text{O}_6 \cdot n\text{H}_2\text{O}$	83.96	16.04	10.362±0.0005

#### Литература

1. Bedin V.Y., Kazachiner O.V., Asabina E. A., ... Yaroslavtsev A. B. Phase formation and ionic conductivity of  $\text{Na}_{1+2x}\text{Zn}_x\text{Zr}_{2-x}(\text{PO}_4)_3$  phosphates // *Inorganic Materials*. – 2022. – 58(1). – P. 64–70.
2. Коваленко Л.Ю., Бурмистров В.А., Захарьевич Д.А., Калганов Д.А., О механизме протонной проводимости полисурьмяной кислоты // *Челябинский физико-математический журнал*. – 2021. – Т.6, № 1. – С. 93-108.
3. Коваленко Л.Ю., Бурмистров В.А. Диэлектрическая релаксация и протонная проводимость полисурьмяной кислоты, допированной ионами ванадия // *Конденсированные среды и межфазные границы*. – 2019. – Т. 21, № 2. – С. 204-214.  
© Волокитина Е.О., Гусакова Ю.Н., Бурмистров В.А., 2024

УДК 544.122.2

### КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ХЕЛАТНЫХ БИСФЕНИЛАЛАНИНСОДЕРЖАЩИХ N,O-КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Галимов М.Н., Берестова Т.В.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Методом квантовохимического моделирования (метод M06 с базисным набором 6-311+G(d)) проведён анализ бис-фенилаланиннатных комплексов переходных металлов общей формулы  $[\text{M}(\text{S-Phe})(\text{S-Phe})]$ , где  $\text{M} = \text{Cu}(\text{II}), \text{Ni}(\text{II}), \text{Zn}(\text{II})$ .

Установлены характерные особенности структуры комплексов в зависимости от природы металла, а также закономерности в конформационном составе образующихся комплексных соединений. Показано, что структурная конформационная изомерия обусловлена влиянием заместителя лигандов при хиральном центре и связана с их расположением в пространстве и относительно друг друга.

Известно, что при образовании бислигандных аминокислотных комплексов переходных металлов, ионы металла связываются с лигандами путём N,O-хелатирования [1-2], образуя два пятичленных цикла [3-6].

Было установлено, что ионы металлов, проявляющих координационные числа 4 (Cu(II)) или 6 (Ni(II)) в ходе комплексообразования с N,O-лигандами образуют плоско-квадратную или октаэдрическую структуру соответственно (рис. 1-2). При этом, плоскость, образованная хелатными кольцами, имеет существенные искажения от идеального квадрата (плоскости) в случае комплексов Cu(II), и менее значительные искажения от идеального октаэдра для комплексов Ni(II). Подобное искажение характерно как для *цис*-, так и для *транс*-изомеров бис-фенилаланинатных комплексов обоих переходных металлов, и проявляется в виде конформаций «ванна» или «кресло» (рис. 1а, 1б и 1в, 1г).

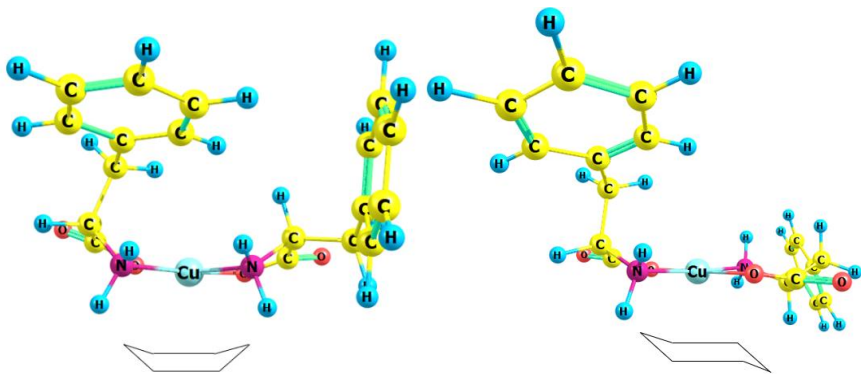


Рис.1а  
 $\text{CuC}_{18}\text{N}_2\text{H}_{20}\text{O}_4$   
*цис*-S-Phe(A)-S-Phe(E)  
 «ванна»

Рис.1б  
 $\text{CuC}_{18}\text{N}_2\text{H}_{20}\text{O}_4$   
*транс*-S-Phe(A)-S-Phe(E)  
 «кресло»

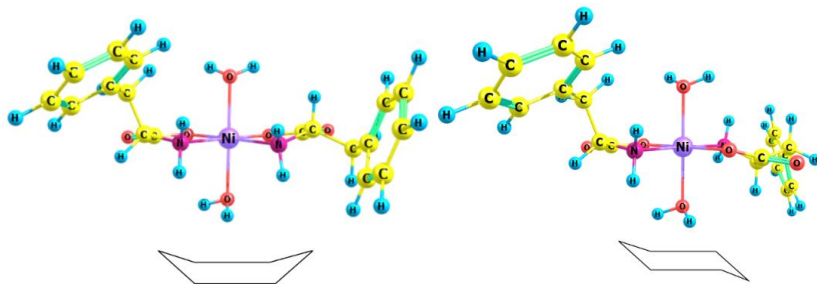


Рис.1в  
 $\text{NiC}_{18}\text{N}_2\text{H}_{20}\text{O}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$   
*цис-S-Phe(A)-S-Phe(E)*  
 «ванна»

Рис.1г  
 $\text{NiC}_{18}\text{N}_2\text{H}_{20}\text{O}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$   
*транс-S-Phe(A)-S-Phe(E)*  
 «кресло»

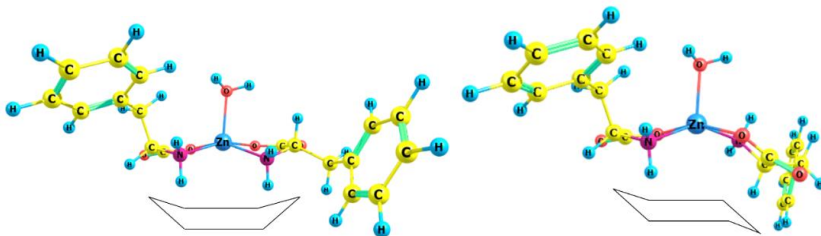


Рис.1д  
 $\text{ZnC}_{18}\text{N}_2\text{H}_{20}\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$   
*цис-S-Phe(A)-(S)-Val(E)*  
 «ванна»

Рис.1е  
 $\text{ZnC}_{18}\text{N}_2\text{H}_{20}\text{O}_4 \cdot \text{H}_2\text{O}$   
*транс-S-Phe(A)-S-Val(E)*  
 «кресло»

В случае, когда координационное число металла равно 5 (Zn(II)), координационным полиэдром комплексного соединения является тетрагональная пирамида, поэтому проследить образование конформаций «ванна» и «кресло» очень сложно, но они присутствуют из-за сохранения тетраэдрической геометрии хирального атома углерода в анионе фенилаланина (рис.1д и 1е).

Таким образом, из рисунков видно, что искажение структуры, образующегося комплекса общей формулой  $[\text{M}(\text{S-Phe})(\text{S-Phe})]$ , от идеального геометрического (координационного) полиэдра определяется координационным числом иона металла и абсолютной конфигурацией хирального центра лиганда. В связи с этим, хелатные *S-S*-фенилаланинатные комплексы Ni(II) имеют незначительное искажение структуры от идеального октаэдра, что связано с присутствием молекул воды, как



дополнительного лиганда, в аксиальных положениях, и оказывающих дополнительный электронный и стерический фактор; комплексы Cu(II) значительно искажаются в *цис*-конфигурации, в то время как в *транс*-конфигурации стремятся к геометрии плоского квадрата; а комплексы Zn(II) из-за нечетного координационного числа, и, следовательно, неравнозначного влияния лигандов, сильно искажаются и представляют собой тетрагональную пирамиду, которая для *транс*-изомеров сильнее деформирована, чем для *цис*.

Для комплексов общей формулой  $[M(S\text{-Phe})(R\text{-Phe})]$ , где  $M = \text{Cu(II)}, \text{Ni(II)}, \text{Zn(II)}$ , конформации «ванна» или «кресло» образующихся молекул будут противоположными комплексам с *S*-фенилаланином ( $[M(S\text{-Phe})(S\text{-Phe})]$ ) из-за инверсии хирального центра аминокислоты.

#### Литература

1. Zilberg, R.A., Berestova, T.V., Gizatov, R.R., Teres Y.B., Galimov, M.N., Bulysheva, E.O. Chiral Selectors in Voltammetric Sensors Based on Mixed Phenylalanine/Alanine Cu(II) and Zn(II) Complexes // *Inorganics*, 2022, 10(8), 117
2. Berestova T.V., Gizatov R.R., Galimov M.N., Mustafin A.G., Influence of the absolute configuration of the ligand's chiral center on the structure of planar-square phenyl-containing bis-(N,O)copper(II) chelates // *J. Molecular Structure*, vol. 1236, Pp. 303-324.
3. S. H. Laurie, in *Comprehensive Coordination Chemistry*, ed. G. Wilkinson, R. D. Gillard and J. A. McCleverty, Pergamon Press, Oxford, 1987, vol. 2, Pp. 739–776.
4. S.H.Laurie, G. Berthon, Marcel Dekker. *Handbook of Metal–Ligand Interactions in Biological Fluids: Bioinorganic Chemistry* // A. 1995. Vol. 1. Pp. 603–619.
5. T. Kiss, K. Burger, E. Horwood, Chichester. *Biocoordination Chemistry: Coordination Equilibria in Biologically Active Systems* // A. 1990. Vol. Pp. 56–134.
6. Remko M. et al. Effect of metal Ions (Ni 2+, Cu 2+ and Zn 2+) and water coordination on the structure of L-phenylalanine, L-tyrosine, L-tryptophan and their zwitterionic forms // *Journal of Molecular Modeling*. – 2011. – Т. 17. – С. 3117-3128.

© Галимов М.Н., Берестова Т.В., 2024

УДК 546.562

## ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОРАЗМЕРНОГО ОКСИДА МЕДИ С ХИТОЗАНОМ

Голик А.Б., Блинов А.В., Пирогов М.А., Тараванов М.А., Леонтьев П.С.  
*Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, Россия*

Наночастицы оксидов металлов привлекают внимание из-за антимикробных и бактерицидных свойств [1, 2]. Наночастицы *CuO* представляют большой интерес из-за их потенциального применения в самых разных областях, включая пищевую промышленность, электронные и оптоэлектронные устройства [3, 4]. Также известно, что размер и форма наночастиц существенно влияют на свойства, такие как оптическое

поглощение и каталитическую активность [4]. В частности, в данной работе в качестве стабилизатора использован хитозан.

Квантово-химическое моделирование взаимодействия наночастиц оксида меди с хитозаном проводилось с помощью программного обеспечения *QChem* с использованием молекулярного редактора *IQmol* при следующих параметрах построения – расчет: *Energy*, метод: *B3LYP*, базис: *6-31G\**, *convergence* – 5, силовое поле – *Ghemical*.

В результате были получены модели взаимодействия молекулы оксида меди с хитозаном (рис. 1).

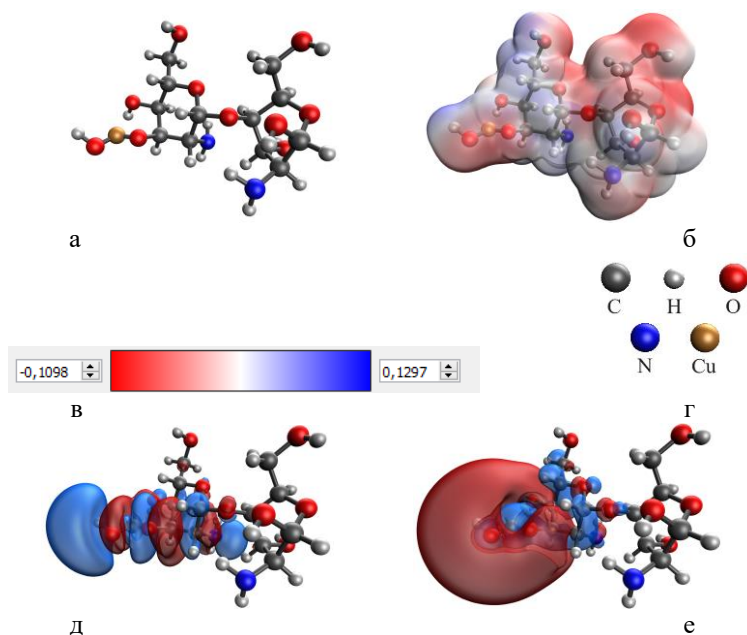


Рис. 1. Результаты моделирования взаимодействия между молекулой хитозана и *CuO* через гидроксогруппу, присоединённую к  $C_3$  остатка глюкозамина: модель молекулярного комплекса (а), распределение электронной плотности (б), градиент распределения электронной плотности (в), расшифровка атомов (г), высшая населённая молекулярная орбиталь *HOMO* (д), низшая свободная молекулярная орбиталь *LUMO* (е)

Таблица 1. Результаты компьютерного квантово-химического моделирования

Полимер	Взаимодействие с полимером	Полная энергия, ккал/моль	<i>HOMO</i> , эВ	<i>LUMO</i> , эВ	$\eta$ , эВ
Хитозан	–	-1258,081	-0,219	0,028	0,124
	Через <i>ОН</i> группу, присоединённую к $C_6$ остатка глюкозамина	-2971,917	-0,061	0,021	0,041
	Через <i>ОН</i> группу, присоединённую к $C_3$ остатка глюкозамина	-2971,891	-0,094	-0,005	0,045
	Через <i>ОН</i> группу, присоединённую к $C_2$ остатка глюкозамина	-2972,906	-0,072	-0,022	0,025

При анализе данных обнаружено, что энергия молекулярной системы *CuO*-хитозан (-2971,891 ккал/моль) значительно ниже, чем энергия отдельной молекулы хитозана (-1258,081 ккал/моль). Данный факт свидетельствует о энергетически выгодном образовании химической связи между молекулой стабилизатора и оксидом меди. Планируется исследование свойств наноразмерного оксида меди, а также проведение оптимизации метода синтеза.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-76-10046, <https://rscf.ru/en/project/23-76-10046/>.*

#### Литература

1. Grigore M. E. et al. Methods of synthesis, properties and biomedical applications of CuO nanoparticles //Pharmaceuticals. 2016. V. 9. N. 4. P. 75.
2. Das D. et al. Synthesis and evaluation of antioxidant and antibacterial behavior of CuO nanoparticles //Colloids and Surfaces B: Biointerfaces. 2013. T. 101. P. 430-433.
3. Gvozdenko A. A. et al. Synthesis of CuO nanoparticles stabilized with gelatin for potential use in food packaging applications //Scientific reports. 2022. V. 12. N. 1. P. 12843.
4. El-Trass A. et al. CuO nanoparticles: synthesis, characterization, optical properties and interaction with amino acids //Applied Surface Science. 2012. V. 258. N. 7. P. 2997-3001.
5. Phiwdang K. et al. Synthesis of CuO nanoparticles by precipitation method using different precursors //Energy procedia. 2013. V. 34. P. 740-745.

© Голик А.Б., Блинов А.В., Пирогов М.А., Тараванов М.А., Леонтьев П.С., 2024

УДК 533.581;621.593;661.183.12

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ЦЕОЛИТОВ ВаХ – АДсорбЕНТОВ ДЛЯ  
ПРОЦЕССОВ РАЗДЕЛЕНИЯ ИЗОМЕРОВ КСИЛОЛА

Котова<sup>1</sup>А.О., Павлова<sup>1,2</sup>И.Н., Алехина<sup>3</sup>И.Е.

<sup>1</sup>*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа,  
Россия*

<sup>2</sup>*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

<sup>3</sup>*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Изомеры ксилола это орто-, мета- и параксилол. Наиболее востребованным, является параксилол, так как служит сырьем для производства терефталевой кислоты, которая используется для производства полиэфирных волокон, смол и пленок. На параксилол приходится около 86% от общего объема потребления ксилолов [1].

Существует несколько способов разделения изомеров ксилола: кристаллизация, экстракция и адсорбционное разделение, которое более эффективно и экономично, чем первые два. Степень извлечения параксилола при одноступенчатом адсорбционном процессе составляет 98,4%. Для адсорбции параксилола предлагаются цеолиты X в Ва-формах. Поэтому актуальными являются работы, направленные на получение на основе цеолитов X перспективных адсорбентов для процессов разделения ксилолов [2,3].

Изучение физико-химических свойств образца адсорбента марки ADS-37 фирмы «UOP» показало, что импортный адсорбент представляет собой гранулированный со связующим материалом цеолит типа X в Ва-форме, в качестве связующего материала использована природная глина, содержание которой составляет не более 15% мас.

Далее были синтезированы аналоги импортного адсорбента ADS-37, образцы гранулированного цеолита X в Ва- форме и определены их физико-химические свойства. По данным РФА степень кристалличности гранулированного цеолита X в Ва-форме близка к 100%. Также установлено, что у образца ВаХ наблюдается иерархическая пористая структура, состоящая из микро-, мезо- и макропор (таблица 1). Их значения равны 0,21, 0,05 и 0,22 см<sup>3</sup>/г, соответственно.

Таблица 1. Характеристики пористой структуры адсорбента марки ADS-37 и разработанного адсорбента ВаХ

Образец	$S_{\text{ВЕТ}}^{\text{а}}$ , (м <sup>2</sup> /г)	$V_{\text{микро}}^{\text{б}}$ , (см <sup>3</sup> /г)	$V_{\text{мезо}}^{\text{в}}$ , (см <sup>3</sup> /г)	$V_{\Sigma}^{\text{г}}$ , (см <sup>3</sup> /г)
ADS-37	490	0,22	0,06	0,50
ВаХ	455	0,21	0,05	0,48

Примечание – а – площадь поверхности методом ВЕТ; б – объем микропор; в – объем мезопор методом; г – общий объем пор по водопоглощению.

Равновесные адсорбционной емкости адсорбента ВаХ измеренные при 30 °С, в течение 24 ч., по воде, толуолу и параксилолу показали, что их значения равны 240, 220 и 228 мг/г, соответственно.

Таким образом, синтезированный цеолит ВаХ обладает свойствами близкими к импортному адсорбенту ADS-37 фирмы «UOP» и может быть использован в промышленных процессах разделения ксилолов.

#### Литература

1. Shi Q., Gonçalves J.C., Ferreira A.F.P., Rodrigues A.E. / A review of advances in production and separation of xylene isomers // Chemical Engineering & Processing: Process Intensification. – 2021. – Т. 169. – №108603.
2. Silva M.S.P., Moreira M.A., Ferreira A.F.P., Santos J.C., Silva V., Gomes P.S., Minceva M., Mota J.P.B., Rodrigues A.E. / Adsorbent Evaluation Based on Experimental Breakthrough Curves: Separation of p-Xylene from C8 Isomers// Chem. Eng. Technol. 2012, 35, No. 10, P.1777–1785.
3. Khabzina Y., Laroche C., Perez-Pellitero J., Farrusseng D. / Xylene separation on a diverse library of exchanged faujasite zeolites // Microporous and Mesoporous Materials 247 (2017) P. 52-59.

© Котова А.О., Павлова И.Н., Алехина И.Е., 2024

УДК 542.06

## ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТОДА СИНТЕЗА НАНОЧАСТИЦ СЕЛЕНА В СРЕДЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Рехман З.А., Блинова А.А., Блинов А.В., Пирогов М.А., Назаретова Е.Д.

*Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, Россия*

Селен является важным микроэлементом для организма человека, обладающим биологической активностью, связанной с иммунной системой, антиоксидантными, антивирусными и противораковыми свойствами [1]. Наноразмерный селен, по сравнению с традиционными селенсодержащими добавками, обладает такими преимуществами, как высокая скорость

поглощения, высокая биологическая активность и низкая токсичность [2]. Наночастицы селена имеют широкие перспективы применения в пищевой и медицинской промышленности. Например, разрабатываются биологически активные добавки для молочной продукции [3], также наноразмерный селен применяют при диагностике и лечении опухолевых заболеваний [4].

Целью данной работы является оптимизация метода синтеза наночастиц селена, стабилизированного цистеином, а также исследование среднего гидродинамического радиуса и  $\zeta$ -потенциала частиц полученных образцов.

Синтез наночастиц селена осуществляли методом химического восстановления в водной среде. В качестве прекурсора была выбрана селенистая кислота, а в качестве восстановителя – аскорбиновая кислота, стабилизатором выступал *L*-цистеин. Сначала навеску прекурсора и стабилизатора растворяли в дистиллированной воде (30 мл). Отдельно готовили раствор восстановителя (15 мл) и добавляли к первому раствору. Синтез проводили при постоянной температуре и перемешивании. Взвешивание исходных реактивов производили на весах лабораторных *OHAUS PA214C* с метрологическими характеристиками: с наибольшим пределом взвешивания до 210 г и поверочной ценой деления не более 0,1 мг, класс точности (I) специальный.

Исследование размера частиц проводили методом фотонной корреляционной спектроскопии на приборе PhotocorComplex (ООО «Антек-97», Российская Федерация). Для исследований образцы наночастиц селена разбавляли в 4 раза дистиллированной водой. Исследование  $\zeta$ -потенциала проводили методом акустической и электроакустической спектроскопии на установке DT-1202 (Dispersion Technology Inc., США).

Для проведения оптимизации проводили многофакторный эксперимент, для которого строили матрицу планирования методом греко-латинских квадратов (табл. 1).

Матрица планирования эксперимента

Матрица эксперимента (г)			
№ опыта	a ( $H_2SeO_3$ ), г	b(L-Цистеин), г	c (Аскорбиновая кислота), г
1	0,0071	0,0088	0,0874
2	0,0071	0,0705	0,6990
3	0,0071	0,5640	5,5920
4	0,0570	0,0088	0,6990
5	0,0570	0,0705	5,5920
6	0,0570	0,5640	0,0874
7	0,4560	0,0088	5,5920
8	0,4560	0,0705	0,0874
9	0,4560	0,5640	0,6990

В результате были получены образцы красно-оранжевого цвета, фотография которых представлена на рисунке 1.



Рис. 1. Образцы наночастиц селена, стабилизированных цистеином

В результате фотонной корреляционной спектроскопии и акустической электронной спектроскопии было обнаружено, что оптимальным является образец № 4, так как он обладает наименьшим гидродинамическим радиусом и наибольшим по модулю электрокинетическим потенциалом. Средний гидродинамический радиус частиц составил  $105,5 \pm 12$  нм, а  $\zeta$ -потенциал равен  $-5,16$  мВ.

Далее планируется исследование агрегативной устойчивости наночастиц селена, стабилизированных цистеином, с помощью влияния активной кислотности среды и ионной силы раствора. Поскольку цистеин

является биологически активным и участвует во многих жизненно важных процессах в организме, полученные образцы можно применять в пищевой промышленности как биологически активную добавку.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-16-00120, <https://rscf.ru/en/project/23-16-00120/>.*

#### Литература

1. Yu B., Zhang Y., Zheng W. et al. Positive surface charge enhances selective cellular uptake and anticancer efficacy of selenium nanoparticles. *Inorganic chemistry*. 2012; 51(16): 8956–8963.
2. Zhang J. S., Gao X. Y., Zhang L. D. et al. Biological effects of a nano red elemental selenium. *Biofactors*. 2001; 15(1): 27–38.
3. Храпцов, А. Г., Серов, А. В., Блинов, А. В., Блинова, А. А., Гвозденко, А. А., Бахолдина, Т. Н., & Лодыгин, А. Д. Обогащение молочных продуктов.
4. Шурыгина И. А., Шурыгин М. Г. Наноконпозиты селена-перспективы применения в онкологии // Вестник новых медицинских технологий. – 2020. – Т. 27. – №. 1. – С. 81-86.

© Рехман З.А., Блинова А.А., Блинов А.В., Назаретова Е.Д., 2024

УДК 546.02

#### СИНТЕЗ НАНОПОРОШКОВ СОСТАВА $Y_{3-x}Nd_xAl_5O_{12}$

Шидловская П.К., Белая Е.А.

*Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия*

Изоморфная емкость кристаллов алюмоиттриевого граната ( $Y_3Al_5O_{12}$ , YAG/ИАГ) высока, и его решетка отлично подходит для внедрения в нее ионов редкоземельных элементов (РЗЭ). Такое внедрение РЗЭ в структуру придает материалу новые свойства, которые находят широкое практическое применение в производстве твердотельных лазеров и искусственных источников освещения.

Широкое применение материала вызывает потребность в его получении, поэтому целью работы является синтез монофазных образцов замещенного алюмоиттриевого граната.

Образцы как незамещенного YAG, так и замещенного ионами неодима с общей формулой  $Nd^{3+}: Y_{3-x}RE_xAl_5O_{12}$  (где  $RE = Nd^{3+}$ ,  $x=0,05 - 0,3$  с шагом 0,05), получали методом золь-гель синтеза. Для этого использовали нитраты соответствующих солей (иттрия, алюминия и неодима), взятые в стехиометрическом соотношении, которые смешивались и растворялись при постоянном перемешивании в дистиллированной воде. Далее к раствору приливали раствор лимонной кислоты и перемешивали при температуре 120 °С до образования бледно-желтого однородного геля. Полученный гель отжигали в муфельной печи при 1000 °С в течение 3 часов.



Методом рентгенофазового анализа подтверждена структура всех полученных образцов, которая соответствует однофазовой структуре алюмоиттриевого граната.

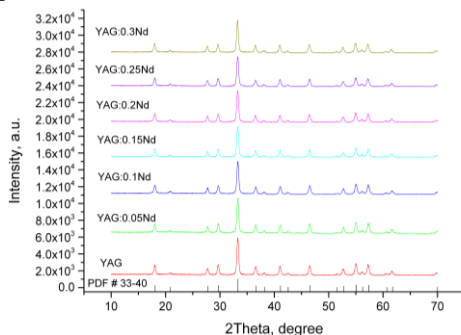


Рис. 1. Диффрактограммы образцов алюмоиттриевого граната, замещенного ионами Nd<sup>3+</sup>

#### Литература

1. Куликов Н.А., Беляков А.В. Получение методом Печини нанопорошков иттрий-алюминиевого граната // РХТУ – 2008. – Т. 22, № 7 (87). – С. 19-21.

© Шидловская П.К., Белая Е.А., 2024

**СЕКЦИЯ**  
**«ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»**

УДК 547.565.2.

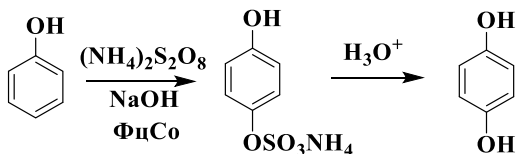
## ОКИСЛЕНИЕ ФЕНОЛА ПЕРСУЛЬФАТОМ АММОНИЯ В УСЛОВИЯХ РЕАКЦИИ ЭЛЬБСА

Акназарова<sup>1</sup> Н.В., Хазимуллина<sup>2</sup> Ю.З., Гимадиева<sup>2</sup> А.Р.

<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Гидроксированные ароматические соединения являются ценными промежуточными продуктами в получении важнейших соединений. Так, например, гидрохинон широко используется в качестве фотореагентов, антиоксидантов, ингибиторов полимеризации, промежуточных продуктов при получении красителей и пигментов, антиоксидантов и ароматизаторов в пищевой промышленности, сельскохозяйственных химикатов, лекарственных препаратов [1]. Однако, известные способы получения гидрохинона характеризуются неполной конверсией исходного фенола и соответствующим низким выходом целевого продукта [2]. Модификацией реакции персульфатного окисления с использованием фталоцианиновых катализаторов удалось добиться высоких выходов промежуточного продукта 4-фенилсульфата и целевого дигидроксибензола до 92 и 85%, соответственно [3]:



Активность фталоцианинов в реакции персульфатного окисления фенола возрастала в ряду: Zn→Mn→Ni→Fe(III)→Fe(II)→Co.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 19-73-20073.

### Литература

1. В. П. Анаников, Л. Л. Хемчян, Ю. В. Иванова и др. // Успехи химии, 2014, 83, 885
2. P. E. Dai, R. H. Petty, C. W. Ingram, R. Szostak, Applied Catalysis A: General, 1996, 143, 101; DOI: 10.1016/0926-860X(96)00073-7.
3. Патент РФ №2784427, опубл. 24.11.2022 / Гимадиева А.Р., Хазимуллина Ю.З., Абдрахманов И.Б., Мустафин А.Г.

© Акназарова Н.В., Гимадиева А.Р., Хазимуллина Ю.З., 2024

УДК 541.14:547.551.2

ПОИСК НОВЫХ ИНГИБИТОРОВ ЯНУС-КИНАЗ JAK1/JAK2/JAK3/ТУК2,  
СОДЕРЖАЩИХ В СВОЕМ СОСТАВЕ ФРАГМЕНТ АДАМАНТАНА

Алмазова А.В., Белякова О.А., Мастерова Ю.Ю., Кострюков С.Г.

*Национальный исследовательский Мордовский государственный  
университет им. Н.П. Огарёва, Саранск, Россия*

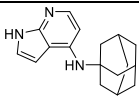
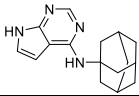
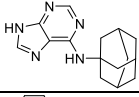
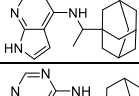
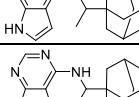
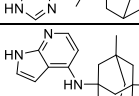
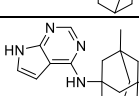
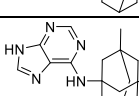

Янус-киназы – это группа цитоплазматических тирозинкиназ, участвующих в передаче сигналов от цитокинов через сигнальный путь JAK/STAT. Они принимают участие во многих иммунологических процессах организма, в том числе и в гемопоэзе. Нарушение регуляции сигнального пути JAK/STAT может привести к возникновению аутоиммунных заболеваний и новообразований миелопролиферативного характера [1]. В семейство янус-киназ входят 4 киназы: Jak1, Jak2, Jak3, Тук2 (известная как тирозинкиназа Т). Киназы Jak1, Jak2 и Тук2 экспрессируются повсеместно, в то время как Jak3 ограничивается по большей части гемопоэтическими клетками [2]. Низкомолекулярные ингибиторы янус-киназ, так называемые якинибы, являются эффективными и относительно безопасными средствами для лечения многих заболеваний.

Пефицитиниб (4-[[1S,3R)-5-гидрокси-2-адамантил]амино]-1Н-пирроло-[2,3-*b*]пиридин-5-карбоксамид) – АТФ-конкурентный ингибитор I типа, который был одобрен для лечения ревматоидного артрита в 2019 году в Японии [3]. Он ингибирует ферментативную активность всех четырех янус-киназ при значениях IC<sub>50</sub> для Jak1, Jak2, Jak3 и Тук2 3,9 нМ, 5,0 нМ, 0,70 нМ и 4,8 нМ соответственно.

В своем исследовании мы обратились к оценки ингибирующей активности новых соединений **1-9**, которые можно синтезировать из известных АФС (ремантадин, мемантин, адамантин) и 4-хлор-1Н-пирроло[2,3-*b*]пиридина, 4-хлор-7Н-пирроло[2,3-*d*]пиримидина или 6-хлор-9Н-пурина.

Для построения двумерных структур соединений **1-9** использовали редактор химической графики ChemDraw, а их докинг осуществляли с помощью программного пакета Schrödinger, программа Maestro версия 12.9 [4]. Для расчётов были использованы трехмерные структуры комплексов янус-киназ с пефицитинибом: 6ААН (Jak1), 6ААJ (Jak2), 6ААМ (Jak3) и 6ААК (Тук2) в PDB.

В таблице представлены величины свободной энергии связывания (Docking score) пефицитиниба и соединений **1-9** с янус-киназами Jak1/Jak2/Jak3/Тук2.

Соединение	Свободная энергия связывания (Docking score), ккал/моль			
	Jak1	Jak2	Jak3	Tyk2
Пефицитиниб	-10,527	-9,830	-9.944	-9.819
	<b>-8.660</b>	<b>-8.539</b>	<b>-8.115</b>	<b>-8.395</b>
	-8.419	-8.766	-5.813	-8.324
	-8.088	-8.088	-5.228	-7.755
	-8.512	-8,666	-4.694	-5.506
	-2,950	-5.026	-4.034	-3.885
	-3,708	-8.101	-4.820	-4.192
	<b>-8.857</b>	<b>-8,845</b>	<b>-8,538</b>	<b>-8.389</b>
	-8.594	-8.569	-7.965	-7.802
	-8.648	-8.023	-8.302	-7.715

Как видно, из данных таблицы производные, полученные из мемантина и адамантина обладают ингибирующей способностью в отношении янускиназ Jak1, Jak2, Jak3 и Tyk2. Их сводная энергия связывания несколько меньше, чем у пефицитиниба, но при последующем дизайне данных молекул путем введения новых функциональных групп можно добиться более лучших результатов.

#### Литература

1. Tzeng H.T., Chyuan I.T., Lai J.H. Targeting the JAK-STAT pathway in autoimmune diseases and cancers: A focus on molecular mechanisms and therapeutic potential // *Biochem. Pharmacol.* 2021. Vol. 193. ID 114760. Doi: 10.1016/j.bcp.2021.114760.

2. Yamaoka K., Saharinen P., Pesu M., Holt V.E., Silvennoinen O., O'Shea J.J. The Janus kinases (Jaks) // *Genome Biol.* 2004. Vol. 5. N 12. ID 253. Doi: 10.1186/gb-2004-5-12-253.

3. Ito M., Yamazaki S., Yamagami K., Kuno M., Morita Y., Okuma K., Nakamura K., Chida N., Inami M., Inoue T., Shirakami S., Higashi Y. A novel JAK inhibitor, peficitinib, demonstrates potent efficacy in a rat adjuvant-induced arthritis model // *J. Pharmacol. Sci.* 2017. Vol. 133. N 1. P. 25-33. Doi: 10.1016/j.jphs.2016.12.001.

4. Maestro Version 12.9.123, MMshare Version 5.5.123, Release 2021-3, <https://www.schrodinger.com/products/maestro/>.

© Алмазова А.В., Белякова О.А., Мастерова Ю.Ю., Кострюков С.Г., 2024

УДК 547.814.1:547.786.1

3-МЕТИЛ-4-((4-ОКСО-4Н-ХРОМЕН-3-ИЛ)МЕТИЛЕН)ИЗОКСАЗОЛ-5(4Н)-ОН: СИНТЕЗ И РЕАКЦИЯ ТИОНИРОВАНИЯ

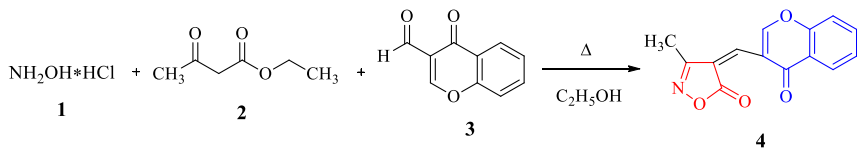
Арязмова Е.М., Мажукина О.А., Егорова А.Ю.

*ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского», Институт химии, Саратов, Россия*

Наиболее развивающимся направлением исследования в настоящее время являются гибридные системы, содержащие изоксазол-5(4Н)-оновый фрагмент [1], что связано с их высокой реакционной способностью и широким спектром биологического действия. Производные изоксазол-5(4Н)-она обладают антибактериальной, антимикробной активностью [2,3], на основе которых получают лекарственные средства. Кроме того, они обладают противоопухолевым действием [4].

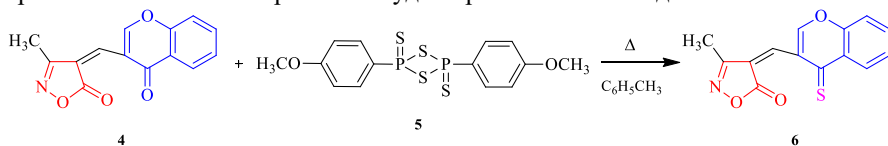
Хромен-4-оновый и хромен-4-тионовый фрагменты, в свою очередь, относятся к важному классу гетероциклических соединений и обладает рядом полезных свойств, которые также используются в синтезе лекарственных препаратов [5,6].

Настоящая работа посвящена синтезу и изучению реакции тионирования 3-метил-4-((4-оксо-4Н-хромен-3-ил)метилена)изоксазол-5(4Н)-она. Трехкомпонентная *one-pot* реакция гидрохлорида гидросиламина (1), ацетоуксусного эфира (2) и 4-оксо-4Н-хромен-3-карбальдегида (3) в этиловом спирте дает конечную гибридную систему 4 с выходом 79%.



Состав и строение 3-метил-4-((4-оксо-4*H*-хромен-3-ил)метил)изоксазол-5(4*H*)-она (**4**) установлены на основании данных элементного анализа, ИК-, ЯМР спектроскопии.

Впервые осуществлено тионирование селективным тионирующим агентом - реактивом Лавессона 3-метил-4-((4-оксо-4*H*-хромен-3-ил)метил)изоксазол-5(4*H*)-она. Реакция основана на взаимодействии эквимольных количеств гибридной системы **4** с реактивом Лавессона (**5**) в толуоле, приводящая к конечному продукту – 3-метил-4-((4-тиоксо-4*H*-хромен-3-ил)метил)изоксазол-5(4*H*)-ону (**6**). Данное превращение протекает в системе закрытых сосудов при повышенном давлении.



Строение 3-метил-4-((4-тиоксо-4*H*-хромен-3-ил)метил)изоксазол-5(4*H*)-она охарактеризовано методами ИК- и комплексной ЯМР спектроскопии. Доказательством строения служит наличие в ЯМР <sup>1</sup>H спектре ключевых сигналов протона хромен-4-онового фрагмента, винилового протона экзоциклической связи. Ключевым сигналом в <sup>13</sup>C спектре является наличие сигнала тиокарбонильной группы хромен-4-онового фрагмента.

Таким образом, нами разработан синтез 3-метил-4-((4-оксо-4*H*-хромен-3-ил)метил)изоксазол-5(4*H*)-она и условия для осуществления реакции тионирования, протекающей по хромен-4-онового фрагменту.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Фонда содействия инноваций (договор № 18695ГУ/2023 Арзамова Е.М.).*

#### Литература

1. Denmark S.E., Kallemeyn J.M. Synthesis of 3,4,5-Trisubstituted Isoxazoles via Sequential [3+2] Cycloaddition / SiliconBased Cross-Coupling Reactions / *J. Org. Chem.* – 2005. – V. 70. – P. 2839-2842.
2. Ferouani G., Nacer A., Ameur N., Bachir R., Ziani-Cherif C. Facile Heterocyclic Synthesis and Antibacterial Activity of Substituted Isoxazol-5(4*H*)-ones / *J. Chin. Chem. Soc.* – 2018. – V. 65. – P. 459-464.
3. Banpurkar A.R., Wazalwar S.S., Perdih F. Aqueous phase synthesis, crystal structure and antimicrobial activity of 4-(substituted phenylazo)-3-methyl-4*H*-isoxazol-5-one azo dyes / *Bull. Chem. Soc. Ethiop.* – 2018. – V. 32. – P. 249-257.
4. Hamama W.S., Ibrahim M.E., Zoorob H.H. Synthesis, DFT Study, and Antitumor Activity of Some New Heterocyclic Compounds Incorporating Isoxazole Moiety / *J. Chin. Chem. Soc.* – 2017. – V. 64. – P. 1203-1212.
5. Arzyamova E.M., Tarasov D.O., Yegorova A.Yu. Synthesis and Characterization of Hybrid Structures Based on Furan-2(3*H*)-ones and Chromen-4(4*H*)-ones—Potential Antibacterial Activity // *Chemistry Proceedings.* – 2023. – V. 14. – № 2.

6. Куренкова Д.Х., Арязмова Е.М., Мажукина О.А., Егорова А.Ю. Реакция тионирования в ряду (гет)арилметилен-3Н-фуран-2-онов – потенциальных антибактериальных препаратов // *Материалы VII Всероссийской молодежной конференции.* – Уфа. – 2023. – С. 47.

© Арязмова Е.М., Мажукина О.А., Егорова А.Ю., 2024

УДК 547.841+547.288.4

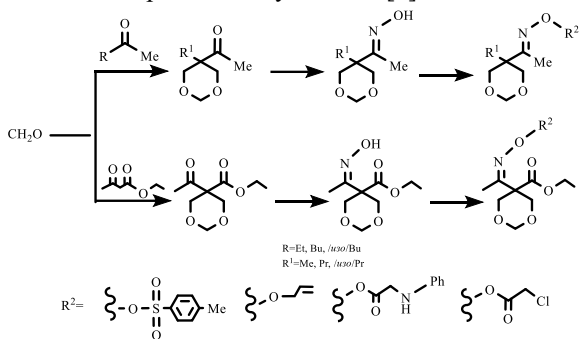
## СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ПРОИЗВОДНЫХ 5-АЦИЛ-1,3-ДИОКСАНОВ

Артамонова Я.С., Султанова Р.М.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет,  
Уфа, Россия*

Функционально замещенные 1,3-диоксаны являются практически важным классом органических соединений и находят широкое применение не только в нефтяной промышленности, но и являются перспективными биологически активными соединениями, проявляя разнообразную физиологическую активность: оказывают анксиолитическое, анестезирующее и противоопухолевое действие [2,3].

В настоящей работе представлены результаты исследований взаимодействия кетоксимов, содержащих 1,3-диоксановый фрагмент с электрофилами. Рассмотрены реакции с алкилгалогенидами, ацилирующими агентами, протекающими в различных условиях [1].



*Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России в сфере научной деятельности, номер для публикаций FEUR — 2022-0007 «Нефтехимические реагенты, масла и материалы для теплоэнергетики»*

### Литература

1. Султанова Р.М., Борисова Ю.Г., Хуснутдинова Н.С., Раскильдина Г.З., Злотский С.С. 1,3-Диоксацикланы: синтез на основе продуктов нефтехимии, химические превращения и применение. Изв. АН Сер. хим. 2023. Т. 72. № 10. С. 2297-2318.



2. Михалева, А. И. Оксимы как реагенты / А. И. Михалева, А. Б. Зайцев, Б. А. Трофимов // Успехи химии. – 2006. – Т. 75, № 9. – С. 884-912. – EDN HSSIRV.  
3. <http://www.pharmaexpert.ru/passonline/>

© Артамонова Я.С., Султанова Р.М., 2024

УДК 661.727

## СИНТЕЗ ХИНОЛИНОВЫХ ОСНОВАНИЙ В ПРИСУТСТВИИ СИЛИКАГЕЛЯ, МОДИФИЦИРОВАННОГО ОКСИДАМИ МЕТАЛЛОВ

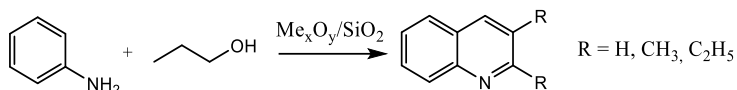
Артемьева<sup>1</sup> А.С., Алибаев<sup>2</sup> И.Д., Григорьева<sup>1,2</sup> Н.Г.

<sup>1</sup>Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россия

Хинолиновые основания широко применяются в фармацевтике, химической и электронной промышленности [1]. В традиционных методах синтеза хинолинов применяются гомогенные катализаторы, которые приводят к многостадийности процесса, поэтому актуальной задачей является разработка гетерогенного способа получения хинолинов.

В связи с этим, цель работы – разработка гетерогенного каталитического способа получения хинолинов реакцией анилина с 1-пропанолом в присутствии модифицированных металлами силикагелей:



Образцы катализаторов, модифицированные оксидами переходных металлов (ZnO/SiO<sub>2</sub>, NiO/SiO<sub>2</sub>, Co<sub>3</sub>O<sub>4</sub>/SiO<sub>2</sub>, CuO/SiO<sub>2</sub>), получали капиллярной пропиткой мезопористого силикагеля SiO<sub>2</sub> растворами нитратов.

Синтез хинолинов проводили реакцией анилина с 1-пропанолом при мольном соотношении анилин : 1-пропанол = 1:2 с объемной скоростью 0,5 ч<sup>-1</sup> (1,5 г катализатора) при температуре 450°C в проточном реакторе в течение 3 часов в присутствии азота.

В составе продуктов реакции идентифицированы 3-метил-2-этилхинолин (1a) и другие хинолины (хинолин, 2-метилхинолин, 3-метилхинолин, 2-этилхинолин, 2,3-диметилхинолин), алкиланилины, тетрагидрохинолинамины, «тяжелые» соединения с молекулярной массой выше 171 г/моль.

Установлено, что степень превращения анилина на оксидсодержащих силикагелях снижается в ряду: ZnO/SiO<sub>2</sub> (88 %) > CoO/SiO<sub>2</sub> (81 %) > NiO/SiO<sub>2</sub> (66 %) > CuO/SiO<sub>2</sub> (29 %) > SiO<sub>2</sub> (3 %). Наибольшая селективность

образования хинолинов (34 %) наблюдается на образце ZnO/SiO<sub>2</sub>. Доля 3-метил-2-этилхинолина в хинолиновой фракции составила 71 %. Кроме хинолинов, образуются промежуточные N-гетероциклы – тетрагидрохинолинамины – с суммарной селективностью 36 %.

*Работа выполнена в рамках государственного задания Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН (тема № FMRS-2022-0080).*

#### Литература

1. V.V. Krishna Mohan, N. Narender // Catal.Sci.Technol. 2012. Vol. 2. Pp. 471-487.

© Артемьева А.С., Алибаев И.Д., Григорьева Н.Г., 2024

УДК 615.322

### ПЕРОКСИДНАЯ АНТИБАКТЕРИАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ ПОДСОЛНЕЧНИКОВОГО МЕДА

Бахтиёр Р., Гаянова А.А., Еникеев А.А., Канчурина М.М., Талипов Р.Ф.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Появление устойчивых к антибиотикам бактерий, или проблема резистентности, привлекло внимание врачей еще 40-х годах прошлого столетия. Однако сегодня это проблема приобрела критическое значение для здравоохранения, и ситуация ухудшилась, когда в течение первого десятилетия 21 века были обнаружены штаммы бактерий с множественной лекарственной устойчивостью [1]. Кроме того, фармацевтическая промышленность не успевает разрабатывать новые противомикробные средства для борьбы с новыми штаммами бактерий из-за высокой стоимости создания новых лекарственных средств. Поэтому проблема устойчивости болезнетворных бактерий к антимикробным препаратам переросла в проблему мирового масштаба. В борьбе с этой серьезной проблемой здравоохранения мед является многообещающей альтернативой, поскольку нет информации о резистентности микроорганизмов к меду. Также низкая себестоимость меда и местная доступность, отсутствие токсичности или побочных эффектов дают ценные преимущества использованию меда в качестве альтернативы противомикробным препаратам.

Мед по антибактериальному действию делится на меда с пероксидной и непероксидной активностью. За непероксидную активность меда отвечают такие соединения в составе меда, как метилглиоксаль, флавоноиды, полифенольные кислоты и другие соединения [2]. Пероксидная антибактериальная активность меда обусловлена пероксидом водорода (ПВ), который образуется в растворе меда после его разбавления в результате пероксидазного окисления глюкозы до глюконовой кислоты [3-4].

Объектом исследования пероксидной антибактериальной активности меда являлись 13 образцов подсолнечникового меда 2021-2023 года сбора. Используя ферментативный метод сопряженный со спектрофотометрией определили содержание ПВ в растворе каждого образца меда (см. таблицу 1).

Таблица 1

№	шифр образца	Район РБ, зона	Концентрация H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> , мг/кг·ч
1	5-2021	Кармаскалинский район <i>Южная лесостепная</i>	<b>102,0</b>
2	37-2022	Бирский <i>Северная лесостепная зона</i>	<b>84,9</b>
3	38-2022	Бураевский <i>Северная лесостепная зона</i>	<b>48,4</b>
4	40-2022	Кармаскалинский р-н <i>Южная лесостепная</i>	<b>53,1</b>
5	1 ПМ-2023	Архангельский <i>Северная лесостепная</i>	<b>34,3</b>
6	2 ПМ-2023	Давлекановский <i>Предуральская степная</i>	<b>59,7</b>
7	3 ПМ-2023	Кушнаренковский <i>Южная лесостепная</i>	<b>37,3</b>
8	4 ПМ-2023	Чишминский <i>Предуральская степная</i>	<b>34,4</b>
9	5 ПМ-2023	Аургазинский <i>Южная лесостепная</i>	<b>71,5</b>
10	6 ПМ-2023	Мелеузовский <i>Предуральская степная</i>	<b>41,3</b>
11	7 ПМ-2023	Аургазинский <i>Южная лесостепная</i>	<b>52,7</b>
12	8 ПМ-2023	Мелеузовский <i>Предуральская степная</i>	<b>74,5</b>
13	9 ПМ-1-2023	Кармаскалинский район <i>Южная лесостепная</i>	<b>57,3</b>
Средняя концентрация H <sub>2</sub> O <sub>2</sub> , мг/кг·ч,			<b>57,8</b>

Среди 13 образцов меда концентрация ПВ колеблется от 34,3 до 102,0 мг/кг·ч, средняя концентрация ПВ равна 57,8 мг/кг·ч. Достаточно большой диапазон изменения концентрации ПВ среди всех образцов меда, по всей вероятности, обусловлено протеканием различных ферментативных и неферментативных реакций его разложения с участием различных

ферментов и вторичных метаболитов ( $\text{Fe}^{3+}$ -зависимая каталаза, пероксидаза, супероксидсмутаза, гидроаскорбиновая кислота и т.д.).

#### Литература

1. Arias C.A., Murray B.E. Antibiotic-resistant bugs in the 21st century – a clinical super-challenge // *New England Journal of Medicine*. - 2009. – V. 360, No. 5. - P. 439–443.
2. Mandal M. D., Mandal S. Honey: Its medicinal property and antibacterial activity // *Asian Pac. J. Trop. Biomed*. 2011. Vol. 1, No. 2. P. 154–160.
3. Brudzynski K., Abubaker K., St-Martin L., Castle A. Re-examining the role of hydrogen peroxide in bacteriostatic and bactericidal activities of honey // *Front. Microbiol*. 2011. Vol. 2. Art. 213.
4. Rückriemen J. Carbonyl compounds in Manuka honey: Antibacterial activity, reactions and metabolic transit, Dissertation, Dr. rer. nat., Dresden, 2018. 258 p.

© Бахтияр П., Гаянова А.А., Еникеев А.А., Канчурина М.М., Талипов Р.Ф., 2024

УДК 547.915.665.33

#### ЛИПИДЫ И ЛИПОФИЛЬНЫЕ КОМПОНЕНТЫ ВЕГЕТАТИВНЫХ ОРГАНОВ *PULMONARIA OBSCURA* (сем. *BORAGINACEAE*)

Бахтияров Д.Р., Ерастов А.С., Юнусова С.Г.

*Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

Растительные липиды, содержащие в своем составе  $\omega$ -3 и  $\omega$ -6 эссенциальные, полиненасыщенные жирные кислоты (ПНЖК) ряда С-18: линолевая (ЛК),  $\gamma$ -линоленовая (ГЛК),  $\alpha$ -линоленовая (АЛК) и стеаридоновая (СК), обладают широким спектром фармакологического действия; их отсутствие в повседневном питании приводит к развитию широкого спектра заболеваний [1]. Источники таких липидов представляют интерес во всем мире. Было показано, что перспективным источником, имеющим доступную сырьевую базу в РФ, являются липиды семян *Pulmonaria obscura* [2].

С целью комплексного использования растительного сырья исследовали состав липидов и липофильных компонентов листьев (1) и розеток (2) растения *Pulmonaria obscura*.

С помощью экстракции из растительного сырья с применением различных растворителей выделили нейтральные липиды (НЛ) (их содержания для 1 и 2 было одинаково и составило 1.65%) и полярные липиды (ПЛ) (2.17% и 1.89%). Используя методы ПТСХ и ТСХ, липиды разделили на составляющие компоненты. НЛ разделили на высокомолекулярные углеводороды (УГ), сложные эфиры тритерпеновых спиртов (СЭТС), сумму ацилглицеролов: триацил-, диацил- и моноацилглицеролы; ПЛ разделили на глико- (ГЛ, 66.6 % от ПЛ) и фосфолипиды (ФЛ, 33.3%), содержание которых для 1 и 2 было одинаково. Используя методы физико-химического анализа (ГХ-ПИД, ГХ-МС, УФ), а

также химические превращения, идентифицировали состав и содержание липидов, жирных кислот (ЖК) и липофильных компонентов. Наибольшее суммарное количество ПНЖК присутствовало в ацилглицеролах (74.7% и 74.9% для 1 и 2 соответственно), в них идентифицировали ЛК, ГЛК, АЛК и СК, около половины от суммарного количества кислот приходилось на долю  $\omega$ -6 ЛК + ГЛК (48.24% и 42.86% соответственно), соотношение  $\omega$ -6/ $\omega$ -3 было 1.4/1 и 1.7/1 для 1 и 2 соответственно. В составе липофильных компонентов, свободных и связанных, идентифицировали высокомолекулярные алифатические спирты, стеролы и тритерпеновые спирты. Определили содержание пигментов хлорофиллов и каротиноидов.

#### Литература

1. J. L. Gui Guerrero, Eur. J. Lipid Sci. Technol., 109,1226 (2007)
2. S. G. Yunusova , M. S. Yunusov, N . I . F e d o r o v, Chem. Nat. Compd., 54, 634 (2018).

© Бахтияров Д.Р., Ерастов А.С., Юнусова С.Г., 2024

УДК: 547.775

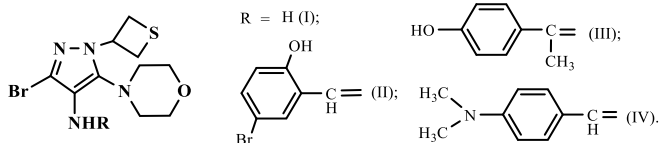
### ПРОГНОЗ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ 4-АМИНОПРОИЗВОДНЫХ ТИЕТАНСОДЕРЖАЩИХ ПИРАЗОЛОВ

Бикбаева Н.А., Шепилова С.О., Клен Е.Э.

*Башкирский государственный медицинский университет, Уфа, Россия*

В настоящее время известно, что производные 4-аминопиразолов обладают широким спектром фармакологической активности: противоопухолевой, противовоспалительной, нейропротективной [1]. На кафедре фармацевтической химии проводятся исследования 4-аминопроизводных тиетансодержащих пиразолов как потенциально биологически активных соединений [2]. Одним из ключевых этапов в исследовании новых соединений является прогноз биологической активности и оценка критерия подобия лекарству, который осуществляется с помощью компьютерных программ PASS и SwissADME [3, 4].

Для предварительной оценки биологической активности и критерия подобия лекарству были выбраны 4-аминопроизводные тиетансодержащих пиразолов **I-IV** (схема 1).



Рассчитанные значения физико-химических параметров соединений **I-IV** представлены в виде радара биодоступности (Рис. 1), который используется для отображения быстрой оценки сходства с лекарственным средством.

В результате расчета учитываются шесть физико-химических свойств: липофильность ( $XlogGP_3$ ) 1,05 – 3,37, молекулярная масса ( $MW$ ) 319,22 – 502,22 г/моль, площадь полярной поверхности: ( $TPSA$ ) 71,2 – 88,2  $A^2$ , растворимость ( $\log S$ ) -5,13 – -2,57, гибкость ( $Csp^3$ ) 0,41 – 0,70 и число вращающих связей ( $RB$ ) 2 – 5. Установлено, что соединения **I, III** и **IV** соответствуют правилу Липинского, кроме соединения **II**, которое не соответствует по одному критерию (молекулярная масса), что не является критичным. Все исследуемые соединения **I-IV** соответствуют правилу Вебера (Рис. 1) [4].

По предварительному прогнозу биологической активности в программе PASS выявлено, что соединения **I-IV** могут быть потенциально использованы для лечения болезни Альцгеймера (0,4), нейродегенеративных (0,5), а также могут обладать противосудорожным (0,3) и противовирусным (0,4) свойствами со значением вероятности от 0,3 до 0,5.

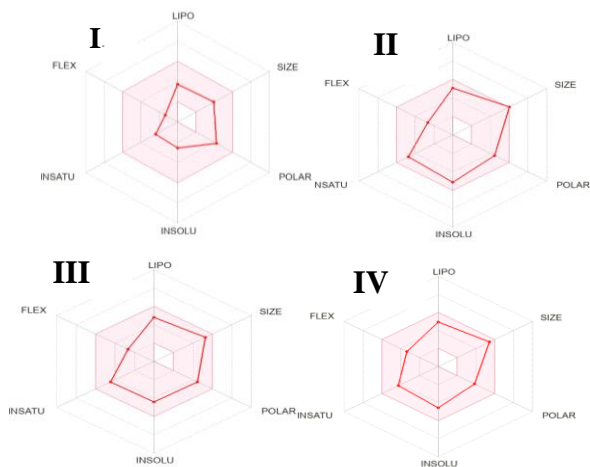


Рис. 1. Радар биодоступности 4-аминопроизводных тиеансодержащих пиазолов **I-IV**.

Таким образом, для соединений **I-IV** прогнозируется вероятность того, что молекулы будут иметь хорошую биодоступность и широкий спектр биологической активности, что делает соединения перспективными для последующего изучения биологической активности.

#### Литература

1. Patent WO2020150545-A1. Pyrazole derivatives as modulators of the wnt/b-catenin signaling pathway / S. K. Kc, C. C. Mak, B. W. Eastman [et al.]. – 2020.
2. Клен, Е. Э. Реакции тиранов с NH-гетероциклами: III. С-бром/нитро-1-(тиетан-3-ил)пиразолы – удобные синтоны для получения замещенных 1-(тиетан-3-ил)пиразолов / Е. Э. Клен, Н. Н. Макарова, Ф. А. Халиуллин [и др.] // Журнал органической химии. – 2022. – Т. 58, № 9. – С. 926-935.
3. Prediction of the biological activity spectra of organic compounds using the PASS online web resource / D. A. Filimonov, A. A. Lagunin, T. A. Glorizova [et al.] // Chemistry of heterocyclic compounds. – 2014. – Vol. 50. – P. 444-457.
4. Daina, A. SwissADME: a free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules / A. Daina, O. Michielin, V. Zoete // Scientific Reports. – 2017. – Vol. 7, № 1. – P. 42717.

© Бикбаева Н.А., Шепилова С.О., Клен Е.Э., 2024

УДК 547.4:547.7:547-318:547.335.2

## N-АМИНОАРИЛПИРРОЛ-2-ОН В РЕАКЦИЯХ АЗОСОЧЕТАНИЯ С КВЕРЦЕТИНОМ

Вавилова В.В., Амальчиева О.А., Егорова А.Ю.

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия*

Флавоноиды представляют собой вторичные метаболиты, синтезируемые растениями. В настоящее время интерес к флавоноидам обусловлен постоянно обновляемыми данными об их биологической активности, а так же широким распространением в растительном мире [1]. Кверцетин, который принадлежит классу флавоноидов, обладает различными биологическими активностями и может служить основой для разработки новых молекул с фармакологическими действиями, так же кверцетин выполняет несколько важных свойств: служит сигнальной молекулой для бактерий, является антиоксидантом.

Цель нашего исследования направлена на получение соединения, путем реакции азосочетания N-аминоарилпиррол-2-она с кверцетином, объединяющего фрагменты гетероциклического соединения и кверцетина, который приносит в полученную молекулу вышеперечисленные свойства. Это даёт возможность использования синтезированного вещества в качестве красителя в биологических образцах, так же может обладать биологической активностью, следовательно, иметь двойную функцию.

В данной работе в качестве исходного вещества был выбран 5-арил-3Н-фуран-2-он, который был получен циклизацией 4-арил-4-оксобутановой кислоты в избытке пропионового ангидрида с уксусной кислотой в соотношении реагентов 1:3:8. (Схема 1)

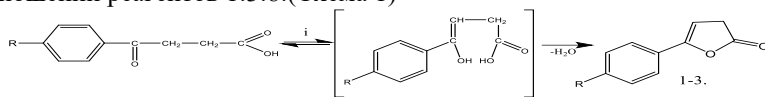


Схема 1. i: пропионовый ангидрид, уксусная кислота, t°C, 1:3:8; R: 1. -CH<sub>3</sub>, 2. -OCH<sub>3</sub>, 3. -Br

5-арил-3Н-фуран-2-он является удобным соединением для синтеза функционализированных гетероциклических систем. [3] Была проведена реакция 5-арил-3Н-фуран-2-она с м-фенилендиамином в растворе этанола в соотношении реагентов 1:3. Образование 1-(3-аминофенил)-5-арил-3Н-пиррол-2-она происходит через стадию раскрытия фуранового цикла, с последующей циклизацией и дегидратацией. (Схема 2)

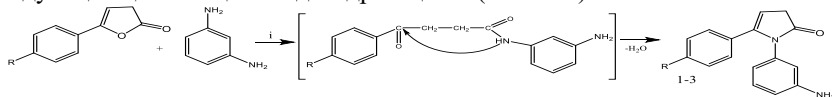


Схема 2. i: этиловый спирт, t°C, 1:3; R: 1. -CH<sub>3</sub>, 2. -OCH<sub>3</sub>, 3. -Br

Свободная аминогруппа 1-(3-аминофенил)-5-арил-3Н-пиррол-2-она даёт возможность проведения реакции диазотирования. Фенолы(фенолятионы) легко вступают в реакцию с ароматическими солями диазония, с образованием азокрасителей [2]. Таким образом, кверцетин, в составе которого 5 гидроксильных групп, может легко вступить в реакцию азосочетания. Все реакции проводятся в мягких условиях при охлаждении. (Схема 3)

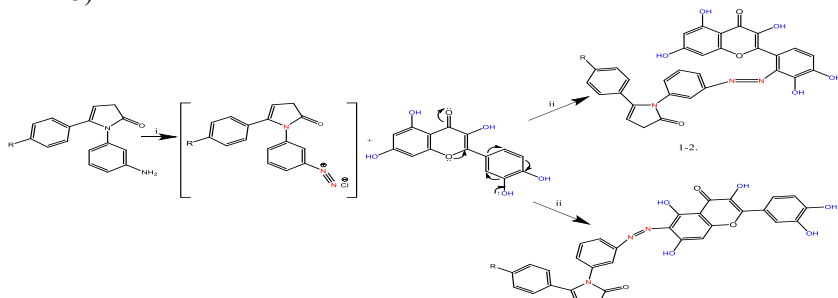


Схема 3. i: NaNO<sub>2</sub>, HCl, t°C=0-5°C; ii: KOH, t°C=0-5°C; R: 1. -CH<sub>3</sub>, 2. -OCH<sub>3</sub>

Был проведен анализ антиоксидантной активности полученных соединений. В качестве свободного радикала выбран – DPPH, витамин С и кверцетин – контрольные образцы. По данным таблицы видно, что полученное соединение(1.R) обладает хорошей антиоксидантной



активностью, полученное соединение(2.R) обладает слабовыраженным антиоксидантным эффектом, по сравнению с (1.R).(Таблица 1)

Таблица 1

Антиоксидантная активность полученных соединений.

С, мг/мл	Антиоксидантная активность,% (DPPH)			
	1.R: -CH <sub>3</sub>	2.R: -OCH <sub>3</sub>	Кверцетин	Витамин С
200	89,28±0,02	59,77±0,06	90,200±0,002	91,58±0,02
100	88,4±0,02	35,41±0,08	90,050±0,003	83,26±0,19
50	73,89±0,12	26,78±0,10	90,29±0,02	55,76±0,25
25	60,3±0,21	4,81±0,12	86,37±0,03	25,35±0,22

Литература

1. Чиряпкин А. С., Золотых Д. С., Поздняков Д. И. Обзор биологической активности флавоноидов: кверцетина и кемпферола // *Juvenis scientia*. – 2023. – Т. 9. – №. 2. – С. 5-20.
2. Кудринская В. А., Дмитриенко С. Г., Золотов Ю. А. Спектрофотометрическое определение флавоноидов по реакции азосочетания с тетрафторборатом 4-нитрофенилдиазония // *Вестник Московского университета. Серия 2. Химия*. – 2010. – Т. 51. – №. 4. – С. 296-301.
3. Гринёв В. С., Амальчиева О. А., Егорова А. Ю. Синтез 1-замещенных 5-алкил (арил)-1, 3-дигидро-2H-пиррол-2-онов. Реакции азосочетания с солями диазония // *Журнал органической химии*. – 2016. – Т. 52. – №. 5. – С. 670-675.

© Вавилова В.В., Амальчиева О.А., Егорова А.Ю., 2024

УДК 547.1'13

ИЗУЧЕНИЕ ПРОДУКТОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТРИ-ПАРА-ТОЛИЛСТИБИНА С ТРИХЛОРУКСУСНОЙ КИСЛОТОЙ

Вахитов<sup>1</sup> В.Р., Шаталин<sup>2</sup> Л.А., Гуцин<sup>1</sup> А.В.

<sup>1</sup>*Национальный исследовательский Нижегородский государственный университет имени Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

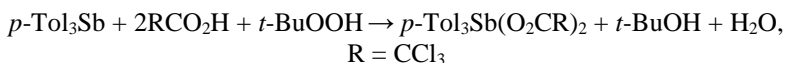
<sup>2</sup>*Муниципальное автономное образовательное учреждение «Лицей № 28 им. акад. Б.А. Королева», Нижний Новгород, Россия*

МОС сурьмы находят применение в разнообразных сферах научной деятельности. С медицинской точки зрения они интересны своей противопаразитарной активностью. Для ряда дикарбоксилатов Sb(V), образованных непределными кислотами, исследована возможность сополимеризации с мономерами для получения металлсодержащих высокомолекулярных соединений [1].

В литературе имеются сведения о синтезе бис(трихлорацетата) три-пара-толилсурьмы взаимодействием: *p*-Tol<sub>3</sub>SbBr<sub>2</sub> с соответствующей кислотой в присутствии Et<sub>3</sub>N (T<sub>пл</sub> = 180 °C) [2], *p*-Tol<sub>3</sub>Sb с трихлоруксусной кислотой и пероксидом водорода в качестве окислителя (T<sub>пл</sub> = 139 °C) [3],

*p*-Tol<sub>3</sub>Sb с той же кислотой, которая сама выступала окислителем за счет атома галогена в α-положении (T<sub>пл</sub> = 200 °C) [4]. Данные о температурах плавления этого соединения довольно противоречивы, поэтому было принято решение подтвердить или опровергнуть литературные значения.

В настоящей работе взаимодействием три-*пара*-толилстибина с трихлоруксусной кислотой в присутствии *трет*-бутилгидропероксида (1:2:1) в диэтиловом эфире при комнатной температуре был синтезирован бис(трихлорацетат) три-*пара*-толилсурьмы по уравнению:



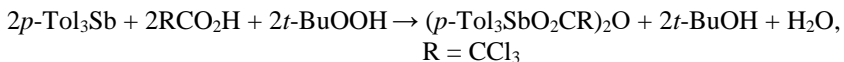
Также структура полученного соединения была впервые подтверждена методом ЯМР:

Спектр <sup>1</sup>H ЯМР (400 MHz, CDCl<sub>3</sub>), δ<sub>H</sub> (м.д.): 2.43s (9H), 7.39d (*J* = 8.1 Hz, 6H), 7.91d (*J* = 8.2 Hz, 6H).

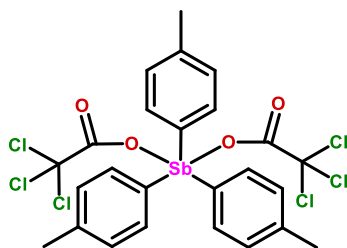
Спектр <sup>13</sup>C ЯМР (101 MHz, CDCl<sub>3</sub>), δ<sub>C</sub> (м.д.): 21.80 (Me), 92.65 (CCl<sub>3</sub>), 129.49 (C-Sb), 130.97 (*m*-Ph), 133.80 (*o*-Ph), 143.27 (*p*-Ph), 162.60 (C=O).

Температуру плавления измеряли двумя способами. Свежеперекристаллизованный продукт был помещен в запаянные в отсутствие воздуха (1) и незапаянные (2) капилляры и выдержан в течение трое суток, после чего измерялась температура плавления на одном и том же приборе. T<sub>пл</sub>(1) = 179 °C, T<sub>пл</sub>(2) = 167 °C. Таким образом, температура плавления значительно снижается при выдерживании данного вещества на воздухе, это может свидетельствовать о его гигроскопичности и может объяснить различие т.пл. у различных авторов.

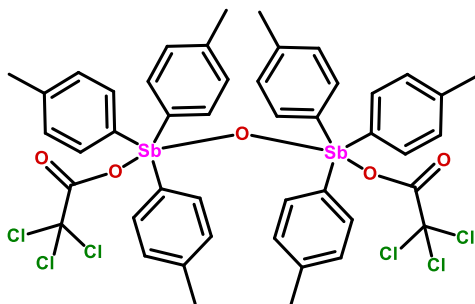
Также была исследована аналогичная реакция три-*пара*-толилстибина с трихлоруксусной кислотой в присутствии *трет*-бутилгидропероксида (1:1:1), в результате которой ожидалось образование оксо(бискарбоксилатного) производного Sb(V) по схеме:



Такой метод ранее применялся в группе проф. Шарутина для получения подобных производных Sb(V) с другими карбоновыми кислотами. В результате проведения реакции и перекристаллизации твердого продукта оказалось, что в нем кроме ожидаемого (*p*-Tol<sub>3</sub>SbO<sub>2</sub>CCl<sub>3</sub>)<sub>2</sub>O присутствует также *p*-Tol<sub>3</sub>Sb(O<sub>2</sub>CCl<sub>3</sub>)<sub>2</sub> в соразмеримых количествах, и их не удастся отделить перекристаллизацией.



$p\text{-Tol}_3\text{Sb}(\text{O}_2\text{CCCl}_3)_2$



$(p\text{-Tol}_3\text{SbO}_2\text{CCCl}_3)_2\text{O}$

Рис. 1. Структурные формулы полученных соединений

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки РФ, БЧ госзадания, проект FSWR-2023-0025.

#### Литература

1. *Russ. J. Gen. Chem.* 2023, 93, 292
2. *Indian J. Chem.* 1979, 18, 73
3. *Russ. J. Coord. Chem.* 2003, 29, 780
4. *Russ. J. Gen. Chem.* 2012, 82, 95

© Вахитов В.Р., Шаталин Л.А., Гуцин А.В., 2024

УДК 547.464.7

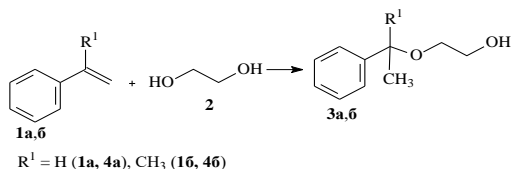
#### ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КАТИОНИТА VENJION DVC 8 UPS В СИНТЕЗЕ МОНОЭФИРОВ ЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ

Войнов В.А., Шарифов М.Х., Борисова Ю.Г.

Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа,  
Россия

Соединения на основе стирола и его производных, в молекулах которых присутствует гидроксильная группа, находят применение в качестве оксигенатных присадок, позволяют повысить октановое число и понизить температуру помутнения топлива [1, 2].

Ранее [3] было показано, что в присутствии цеолита H-beta аллиловый спирт присоединяется к стиrolу с образованием соответствующих производных с селективностью образования целевых эфиров. Продолжая эти исследования, в настоящей работе на основе олефинов (стирол **1a** и  $\alpha$ -метилстирол **1б**) мы получили монозамещенные эфиры **3a,б**.



Найдено, что к олефинам **1a,b** при 120 °С за 5ч этиленгликоль **6** практически не присоединяется (конверсия **1a,b** ≤ 5%). Для получения целевых моноэфиров **3a,b** реакция проводилась в автоклаве (30 атм.) 10ч при 150 °С в присутствии сильнокислотного катионита BENJION DVC 8 UPS (10 % масс.). В этих условиях селективность образования **3a,b** составила 60-70% при полной конверсии олефинов **1a,b** = 100 %. Отметим, что побочными продуктами реакции являются димеры олефинов **1a,b**.

#### Литература

1. Zhang X., Corma A. Efficient addition of alcohols, amines and phenol to unactivated alkenes by AuIII or PdII stabilized by CuCl<sub>2</sub>. Dalton Trans. – 2008. – Vol. 3. – P. 397–403.
2. Raskildina G. Z. Grigor'eva N. G., Kutepov B.I., Zlotsky S.S., Zaikov G.E. Synthesis of *O*-including compounds by catalytic conversation of olefins Process Advancement in Chemistry and Chemical Engineering Research. – 2016. – P. 163-174
3. Раскильдина Г.З., Григорьева Н.Г., Кутепов Б.И., Казакова А.Н., Михайлова Н.Н., Злотский С.С., Красуцкий П.А. Гетерогенно-каталитическое присоединение спиртов к терминальным олефинам // Башкирский химический журнал. – 2012. – Т.19. – № 3. – С. 101.

© Войнов В.А., Шарифов М.Х., Борисова Ю.Г., 2024

УДК 577.29

### ВЛИЯНИЕ САХАРОЗЫ НА ФЕРМЕНТАТИВНЫЙ СИНТЕЗ ПОЛИНУКЛЕОТИДОВ В УСЛОВИЯХ ПОЛИМЕРАЗНОЙ ЦЕПНОЙ РЕАКЦИИ

Галеева<sup>1</sup> П.С., Гарафутдинов<sup>1,2</sup> Р.Р., Купова<sup>2</sup> О.Ю.

<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Институт биохимии и генетики, УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Полимеразная цепная реакция (ПЦР) — один из важнейших методов молекулярной биологии и генетики, обеспечивающий амплификацию нуклеиновых кислот (наработку в большом количестве копий определенных фрагментов ДНК и РНК). Метод характеризуется относительной простотой исполнения, обладает высокой чувствительностью обнаружения исходной мишени. Известно, что присутствие ряда веществ-примесей способно влиять на протекание ПЦР. Некоторые вещества, называемые ПЦР-энхансерами, повышают скорость и эффективность амплификации, другие — ПЦР-ингибиторы — действуют противоположным образом. Изучение влияния

таких веществ на ПЦР является актуальной задачей биоорганической химии. В качестве ПЦР-энхансеров широко применяют ДМСО и бетаин. Описано использование в этом качестве гликолей, эктоинов, сульфонов, углеводов [1,2]. Среди последних можно отметить трегалозу, для которой показана способность стабилизировать ДНК-полимеразу при высоких температурах. Имеются данные о влиянии других углеводов (сахарозы, глюкозы, фруктозы, галактозы, маннозы, лактозы, инулина и фикола 400) на протекание ПЦР [2,3], однако молекулярные основы такого влияния не изучены.

Нами проведено компьютерное моделирование систем, содержащих молекулы сахарозы, ДНК и воды. Рассматривались системы, состоящие из постоянного числа молекул ДНК и воды, 1 и 1500 соответственно, и варьируемым числом молекул сахарозы (0-400). Молекулярное моделирование проводилось с помощью программы BIOVIA Materials Studio 2017. Молекула ДНК со случайной последовательностью нуклеотидов была построена в программе Discovery Studio Client. Геометрическая оптимизация структур проводилась с помощью метода молекулярной механики, энергия адсорбции была рассчитана с использованием метода Монте-Карло. Оказалось, что при введении в систему одной молекулы сахарозы общая энергия адсорбции резко возрастает, однако при дальнейшем увеличении числа молекул сахарозы линейно снижается. Также из пространственного расположения молекул видно, что сахароза локализуется у молекулы ДНК и разрыхляет ее гидратную оболочку.

Влияние сахарозы на амплификацию ДНК было оценено также в ПЦР-экспериментах, для чего проводили серию ПЦР в реальном времени с реакционными смесями, содержащими различные ДНК-мишени с соответствующими им праймерами, ДНК-полимеразу Taq фирм СибЭнзим или СинГен, в образцы также вносили растворы сахарозы с концентрациями 10, 20, 40%. Обнаружено, что с увеличением концентрации сахарозы в реакционной смеси происходит снижение эффективности амплификации, о чем свидетельствует более позднее начало накопления продуктов амплификации в реакционных смесях, содержащих сахарозу, по сравнению с образцами, ее не содержащими. Таким образом, в условиях данного исследования сахароза действует как ПЦР-ингибитор.

#### Литература

1. А. Р. Сахабутдинова, Д. А. Чемерис, А. В. Чемерис, Р. Р. Гарафутдинов. Энхансеры ПЦР. I. Общие сведения // Биомика. 2023. Т. 15, № 3. 218-223.
2. Kurz, M. Compatible solute influence on nucleic acids: Many questions but few answers // Aquat. Biosyst. 4, 6 (2008).

3. Louwrier A., van der Valk A. Can sucrose affect polymerase chain reaction product formation? // *Biotechnol. Lett.* 2001. V. 23. PP. 175-178.
4. Sakhabutdinova A.R., Chemeris A.V., Garafutdinov R.R. Enhancement of PCR efficiency using mono- and disaccharides // *Anal. Biochem.* 2020. V. 606. 113858.

© Галеева П.С., Гарафутдинов Р.Р., Купова О.Ю., 2024

УДК 541.14:547.551.2

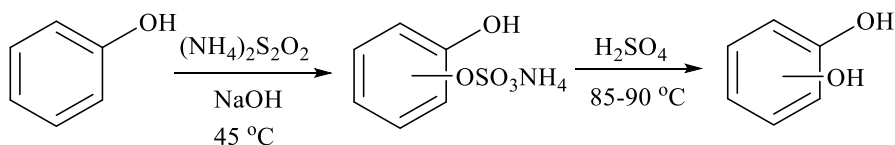
## ПЕРСУЛЬФАТНОЕ ОКИСЛЕНИЕ 3-ГИДРОКСИПИРИДИНА

Гилимханова А.А., Хазимуллина Ю.З.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Производные пиридина привлекли огромное внимание в медицинских исследованиях из-за их влияния на лечение многочисленных опасных заболеваний, таких как рак молочной железы, миелоидный лейкоз, идиопатический респираторный фиброз и др. [1]. Высокую биологическую активность проявляют производные пиридина содержащие гидроксильную группу. Одним из методов её введения являются реакции персульфатного окисления. Как известно, модификация известных лекарственных средств и природных соединений введением новых функциональных групп приводит к повышению активности и появлению новых полезных свойств указанных веществ. В связи с этим синтез новых азотсодержащих гетероциклов, обладающих фармакологическими свойствами является актуальной задачей и имеет важное значение для медицины.

Целью настоящей работы является разработка эффективного способа получения производных пиридина. Для решения этой задачи нами изучена реакция окисления пиридина персульфатом аммония:



Дальнейшее исследование данного процесса включает детальное изучение кинетики окисления анилина в присутствии персульфата аммония, 30% пероксида водорода с наблюдением pH реакции, а также вычисление кинетических и термодинамических параметров.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 19-73-2007

## Литература

1. Ataf Ali Altaf<sup>1</sup>, Adnan Shahzad, Zarif Gul, Nasir Rasool, Amin Badshah, Bhajan Lal, Ezzat Khan // A Review on the Medicinal Importance of Pyridine D. – 2015. – P.1

© Гилимханова А.А., Хазимуллина Ю.З., 2024

УДК 54-386:54.02

## ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГЛИЦИРРИЗИНОВОЙ И ГЛУТАМИНОВОЙ КИСЛОТ В ВОДНО-СПИРТОВЫХ РАСТВОРАХ

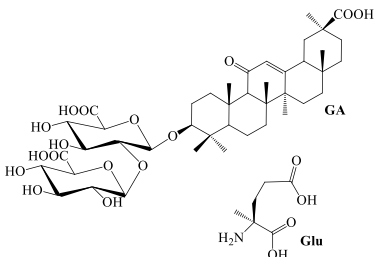
Гимазетдинова<sup>1</sup> Д.О., Файзрахманов<sup>1</sup> И.С., Иванов<sup>2</sup> С.П.

<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский Институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Известно, что  $\beta$ -глицирризиновая кислота (**GA**) может выступать в качестве «хозяина» в комплексах с органическими соединениями за счет образования димерных форм, образованных при межмолекулярных взаимодействиях карбоксильных групп.

Целью данной работы являлось изучение взаимодействия  $\beta$ -глицирризиновой кислоты с глутаминовой кислотой (**Glu**) в водно-спиртовых растворах.



Методом изомольярных серий спектрофотометрически изучен состав комплекса. Показано образование комплекса в мольном соотношении GA:Glu=1:1. Выделены продукты взаимодействия GA с Glu в мольном соотношении 1:1. Записаны их ИК спектры, предположена структура комплекса.

Таким образом, изучено взаимодействие  $\beta$ -глицирризиновой и глутаминовой кислот в водно-спиртовых растворах. Предположены состав и структура комплекса.

*Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования № 123011300044-5. УФ и ИК спектры зарегистрированы на оборудовании ЦКП «Химия» УФИХ УФИЦ РАН и РЦКП «Агидель» УФИЦ РАН.*

© Гимазетдинова Д.О., Файзрахманов И.С., Иванов С.П., 2024

УДК 547.833.3

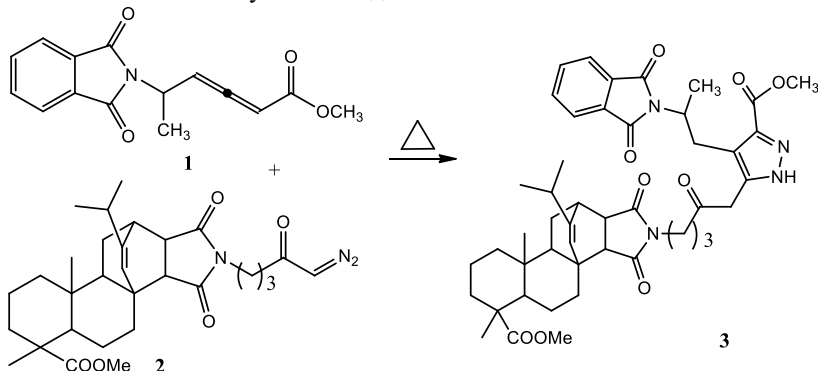
## ДИАЗОКЕТОН С МАЛЕОПИМАРИМИДНЫМ ФРАГМЕНТОМ В СИНТЕЗЕ НОВОГО 3,4,5-ТРИЗАМЕЩЕННОГО 1Н-ПИРАЗОЛА

Гиндуллина<sup>1</sup> Г.М., Горшкова<sup>2</sup> Ю.К., Сахаутдинов<sup>1</sup> И.М.

<sup>1</sup>Уфимский Институт химии РАН, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский Университет Науки и Технологий, Уфа, Россия

В растительном и животном мире терпены и их производные получили широкое распространение. Применение данного класса соединений является весьма перспективным для создания лекарственных препаратов благодаря их биоактивности. Дитерпены являются основным природным компонентом в смоле хвойных растений. Медицинское применение этих соединений основано на их антисептических и дезинфицирующих свойствах. Они оказывают обезболивающее, бактерицидное, противовоспалительное, успокаивающее действие, а также применяются в качестве антибиотиков и противогрибковых средств. Поэтому, получение сложных органических соединений благодаря введению фармакофорных групп в молекулу и изучение их биологической активности является актуальной задачей.



Для получения 3,4,5-замещенного пиразола **3** был использован алленоат **1**, полученный из  $\beta$ -аминоасляной кислоты с диазосоединением, содержащим дитерпеновый остаток **2** путём реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения. Структуры полученных соединений подтверждены данными ЯМР - спектра.

Работа выполнена при поддержке госзадания №122031400278-2 с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Химия» Уфимского института химии УФИЦ РАН.

© Гиндуллина Г.М., Горшкова Ю.К., Сахаутдинов И.М., 2024



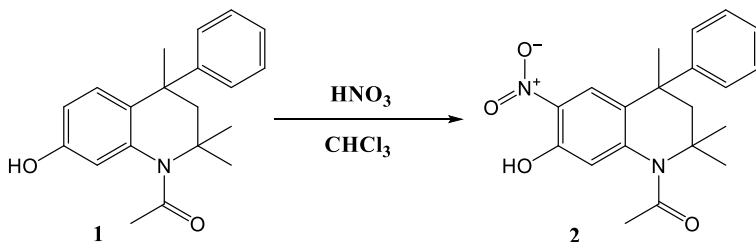
СИНТЕЗ N-АЦЕТИЛ-6-АМИНО-7-ГИДРОКСИ-2,2,4-ТРИМЕТИЛ-4-ФЕНИЛ-1,2,3,4-ТЕТРАГИДРОХИНОЛИНА

Грибанова Я.А., Потапов А.Ю., Карелина К.О.

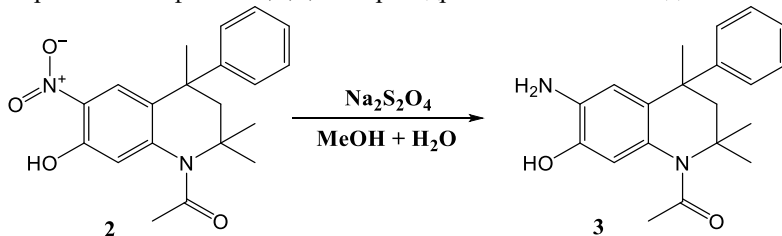
Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

Химический потенциал производных хинолина привлекает внимание большого количества исследователей. Основная причина такого повышенного интереса – это обширный спектр практически полезных свойств. Так, например, они нашли применение в фармацевтике, медицине и в других не менее важных отраслях. [1-4] Поэтому разработка новых методов синтеза производных хинолина и построение гетероциклических систем на их основе является перспективным направлением.

В рамках поиска новых функциональных производных гидрохинолина нами была изучена реакция нитрования N-ацетил-7-гидрокси-2,2,4-триметил-4-фенил-1,2,3,4-тетрагидрохинолина **1**. Было установлено, что взаимодействие тетрагидрохинолина **1** с дымящей азотной кислотой приводит к образованию N-ацетил-6-нитро-7-гидрокси-2,2,4-триметил-4-фенил-1,2,3,4-тетрагидрохинолина **2**. Реакцию проводили при комнатной температуре в трихлорметане, выход продукта составил 65%.



Далее для восстановления нитро группы в соединении **2** проводили реакцию с дитионитом натрия в водно-спиртовой среде. В результате данного взаимодействия удалось выделить N-ацетил-6-амино-7-гидрокси-2,2,4-триметил-4-фенил-1,2,3,4-тетрагидрохинолин **3** с выходом 60%.



Строение полученных соединений подтверждено методами ВЭЖХ/МС и ЯМР  $^1\text{H}$  спектроскопии.

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2023-2025 годы, проект № FZGU-2023-0009.*

#### Литература

- 1 Katritzky A.R. Recent progress in the synthesis of 1,2,3,4-tetrahydroquinolines / A.R. Katritzky, S. Rachwal, B. Rachwal // *Tetrahedron*. – 1996. – V. 52. – P. 15031-15070.
- 2 Избранные методы синтеза и модификации гетероциклов, том 6 «Хинолины: химия и биологическая активность» / Под ред. В.Г. Карцева. – М. : МБФНП (ICSPF) Press, 2007. – 744 с.
- 3 Шмырева Ж. В. 2,2,4-Триметил-гидрохинолины / Ж.В. Шмырева. – Воронеж : Изд-во Воронеж. ун-та, 2000. – 124 с.
- 4 Meunier V. Hybrid molecules with a dual mode of action: dream or reality? / V. Meunier // *Acc Chem Res*. – 2007. – V. 41. №1. – P. 69-77.

© Грибанова Я.А., Потапов А.Ю., Карелина К.О., 2024

УДК:547.873

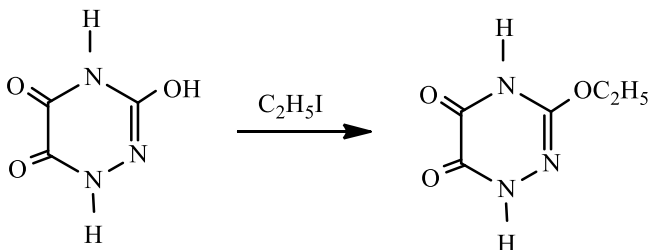
### СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ 3-ГИДРОКСИ-1,4,5,6-ТЕТРАГИДРО-1,2,4-ТРИАЗИНДИОНА-5,6

Кудаярова И.Р., Кудаярова Р.Р.

*ФГБОУ ВО БГМУ Минздрава России, Уфа, Россия*

Ряд производных 1,2,4-триазидинона-5,6 – перспективный класс гетероциклических соединений, обладающий разнообразным спектром биологического действия.

При действии на 3-гидрокси-1,4,5,6-тетрагидро-1,2,4-триазиндион-5,6 йодистого этила в щелочной среде получен 3-этокси-1,4,5,6-тетрагидро-1,2,4-триазиндион-5,6:



Полученное соединение представляет собой кристаллическое вещество белого цвета, растворимое в спирте. Строение полученного соединения

подтверждено спектральными методами: УФ-, ИК-, масс- и ЯМР <sup>13</sup>C-спектрами и данными элементного анализа.

#### Литература

1. Кудаярова Р.Р. Синтез и исследование производных 1,4,5,6-тетрагидро-1,2,4-триазиндиона-5,6: автореф. дис. канд. хим. наук: 02.00.03. – Уфа, 2004. – 24 с.

© Кудаярова И.Р., Кудаярова Р.Р., 2024

УДК:547.596:615.291

### СИНТЕЗ АМИДОВ 3-β-АЦЕТОКСИГЛИЦИРРЕТОВОЙ КИСЛОТЫ НА ОСНОВЕ АРОМАТИЧЕСКИХ АМИНОВ

Джураев<sup>1</sup>А.Ж., Эсанов<sup>2</sup>Р.С., Гафуров<sup>2</sup>М.Б., Матчанов<sup>2</sup>А.Д.

<sup>1</sup>Гулистанский государственный университет, Гулистан,  
Республика Узбекистан

<sup>2</sup>Институт биоорганической химии АН РУз. имени академика  
А.С. Садикова, Ташкент, Республика Узбекистан

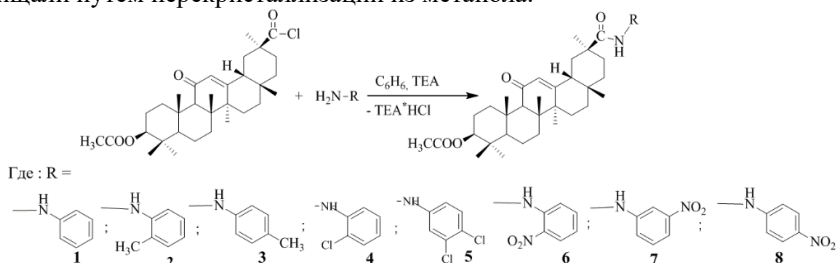
Произрастающий на территории Узбекистана на больших площадях растения Солодка голая (*Glycyrriza glabra. L*) представляет наибольший интерес, основным тритерпеновым сопонином которого является – глицирризиновая кислота(ГК) и его агликон глицирретовая кислота(ГлК), на основе которых созданы известные противовоспалительные и противовирусные препараты, которые широко применяются в лечебной практике. [1-4]. Биологическая активность ГлК и их производных может быть обусловлена их мембраноактивными свойствами: способностью избирательно модифицировать структуру и проницаемость биологических мембран [5-7].

Но механизм действие данных соединений не установлены до конца, по этому синтез производных глицирретовой кислоты, и изучение их биологической активности, для установления связи между биологической активности и химическим строением представляет большой интерес.

Ранее нами было синтезирован ряд соединений 3-ацетоксиглицирретовой кислоты на основе аминокспиртов и аминов, содержащих алкалоидные остатки и изучена их мембраноактивные свойства, где было показано что эти соединения частично или полностью внедряются в гидрофобную область липидного бислоя [8]. Продолжая своих работ нами было синтезировано ряд новых амидов 3-β-ацетоксиглицирретовой кислоты, содержащие ароматические остатки и доказано их строение методами ИК-, ЯМР-спектроскопии и масс спектрометрии.

Производные 3-ацетоксиглицирретовой кислоты синтезировали по ниже схеме. 18-β-Н-глицирретовую кислоту, 3-О-ацетил-18-β-Н-

глицирретовую кислоту и хлорангидрид 3-О-ацетил-18β-Н-глицирретовой кислоты получали по методикам [9]. При взаимодействии хлорангидрида с соответствующими аминами получили вещества 1-8. Полученные вещества очищали путем перекристаллизации из метанола.



Полученные амиды очищены путем осаждения амидов из раствора абсолютного метанола, и определены их физико-химические свойства, а химическая структуры было доказано методами ИК-, ЯМР-спектроскопии и масс спектрометрии.

#### Литература

1. Толстикова Г.А., Балтина Л.А., Гранкина В.П. и др. Солодка: биоразнообразие, химия, применение в медицине. -Новосибирск: Гео, - 2007. –С.312.
2. Xu B., Wu G., Zhang X., Yan M., Zhao R., Xue N., Fang K., Wang H., Chen M., Guo W., Wang P. and Lei H. An Overview of Structurally Modified Glycyrrhetic Acid Derivatives as Antitumor Agents/Molecules – 2017. – 22. – P.924; doi:10.3390/molecules22060924
3. 4. Зарубаев В.В., Аникин В.Б., Смирнов В.С., Противовирусная активность глицирретовой и глицирризиновой кислоту // Инфекция и иммунитет // – 2016. – Т. 6. – № 3. – С.199–206
4. Оболенцева Г.В., Литвиненко В.И., Аммосов А.С., Попова Т.П., Сампиев А.М. Фармакологические и терапевтические свойства препаратов солодки (обзор). // Хим.прир.соед. – Ташкент, 1999. – Т. 8. – С. 24-30.
5. Whitehouse M.V., Haslam J.M., Ability of Some Antirheumatic Drugs to uncouple Oxidative Phosphorylation // Nature. –1962. – 196. P. – 413
6. Зиятдинова Р.Х., Изотова Л.Ю., Тукфатуллина И.И. Исследование действия производных глицирретовой кислоты на структурные перестройки в липидных мембранах // Структура и функции биологических мембран. Тезисы научной конф. 17-18 мая. Ташкент, 2001. – С.13-14.
7. Zeuzem S. Glycyrrhizin for the treatment of allergic diseases and chronic hepatitis // Dtsch. Med. Wochenschr. – 1998. – V.123. – P. 372-379.
8. Джураев А.Ж., Далимов Д.Н., Камаев.Ф.Г. Сложные эфиры ацетата 18β-глицирретовой кислоты на основе некоторых аминлспиртов // Химия природ, соедин., Спец выпуск. – 1998. – С. 83-85.
9. Муравьев И.А, Савченко Л.Н. Получение глицирретиновой кислоты из экстрактов солодкого корня // Хим.фарм.журн. – 1979. – №5. – С.97-102.

© Джураев А.Ж., Эсанов Р.С., Гафуров М.Б., Матчанов А.Д., 2024

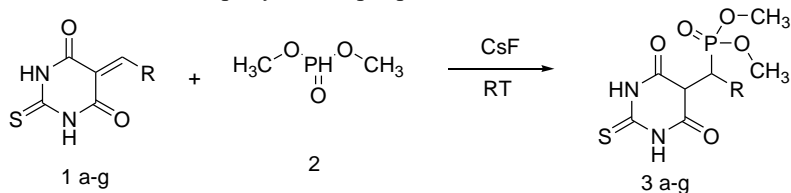
ОПТИМИЗАЦИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ 5-(R-БЕНЗИЛИДЕН)-2-  
ТИОКСОДИГИДРОПИРИМИДИН-4,6(1H,5H)-ДИОНОВ С  
ДИМЕТИЛФОСФИТОМ

Епифанцева В.Э., Егоров Д.М.

*Санкт-Петербургский государственный технологический институт  
(технический университет), Санкт-Петербург, Россия*

Среди широкого разнообразия гетероциклических соединений, пиримидин и его производные, по праву занимают одно из ведущих положений. В литературе описано большое количество гетероциклических каркасов, полученных на базе производных пиримидина, обладающих широким спектром биологической активности, включая антиоксидантную, противовоспалительную, иммуномодулирующую, антибактериальную, противовирусную и противоопухолевую активность [1]. В данной работе впервые исследована реакция диметилфосфита с производными 5-бензилиден-2-тиобарбитуровой кислоты. Разработка эффективных методов синтеза элементоорганических соединений, таких как – фосфонаты, из доступных и простых реагентов, является одним из центральных направлений в современных трендах развития органической химии.

Нами была исследована реакция замещенных 5-бензилиден-2-тиобарбитуратов с диметилфосфитом в присутствии фторида цезия в качестве катализатора, как показано на рисунке 1. Реакция проводилась при интенсивном перемешивании и при комнатной температуре в течение 30 минут. Исходные 5-бензилиден-2-тиобарбитураты представляют собой ярко окрашенные вещества, которые при протекании реакции меняли цвет с желто-оранжевого на бесцветный, что позволяло визуально осуществлять контроль протекания реакция. После обесцвечивания реакционной массы в нее добавляли изопропиловый спирт, при этом наблюдалось выпадение белого осадка. Выходы продуктов варьировались в диапазоне 80-90%.



R = C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>S (a), 3-(3-C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>O<sub>2</sub>-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>)-C<sub>4</sub>H<sub>2</sub>O (b), 4-C<sub>5</sub>H<sub>8</sub>N-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (c),  
4-C<sub>2</sub>H<sub>5</sub>O-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (d), 3,4-OCH<sub>3</sub>-C<sub>6</sub>H<sub>3</sub> (e), 4-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>O-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (f), 4-CH<sub>3</sub>S-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub> (g)

Рис. 1. Схема получения новых 5-бензилиден-2-тиоксодигидропиримидин-  
4,6(1H,5H)-дионов

Таблица 1

## Оптимизация параметров реакции

№	Катализатор	Растворитель	Температура	Время	Выход
1	K <sub>2</sub> CO <sub>3</sub>	CH <sub>3</sub> OH (абс.)	80°C	9 ч.	0 %
2	CH <sub>3</sub> ONa	CH <sub>3</sub> OH (абс.)	80°C	9 ч.	0 %
3	<i>i</i> PrONa	CH <sub>3</sub> OH (абс.)	80°C	9 ч.	0 %
4	<i>i</i> PrONa	<i>i</i> PrOH	80°C	9 ч.	0 %
5	KF	Диметилфосфит	80°C	9 ч.	30-40%
6	CsF	Диметилфосфит	80°C	30 мин.	80-90%
7	CsF	Диметилфосфит	20°C	30 мин.	80-90%

В ходе исследования реакции была проведена оптимизация условий, были изучены различные основания в качестве катализаторов и различные растворители. Оптимизация проводилась путем последовательных экспериментов, выполненных с различными параметрами реакции, такими как тип катализатора, количество катализатора, растворитель, температура и время (таблица 1). Из рассмотренных катализаторов, включая K<sub>2</sub>CO<sub>3</sub>, CH<sub>3</sub>ONa, *i*PrONa, KF, CsF, лучшим оказался CsF, обеспечивающий очень хорошие выходы целевого продукта. Поскольку фторид является самым основным из галогенидов, и поскольку электроотрицательность щелочных металлов уменьшается от лития к цезию, основность фторида в солях будет иметь тенденцию к увеличению в том же порядке. Следовательно, это повышение основности может объяснить увеличение выхода продукта в реакции. Оптимизация количества используемого катализатора показала, что повышение количества катализатора 10 до 20 мол. %, повышает выход продукта с 70% до 90%. Поскольку растворитель оказывает влияние на весь процесс, исследовали влияние различных растворителей: наилучшие результаты были получены при использовании в качестве растворителя непосредственно самого диметилфосфита. Мы также провели температурный анализ, и было обнаружено, что нагревание не является обязательным параметром.

Строение полученных соединений исследовано методом ЯМР-спектроскопии на ядрах <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C и <sup>31</sup>P, а также с использованием двумерных гетерокорреляционных методов HSQC <sup>1</sup>H-<sup>13</sup>C, HMBC <sup>1</sup>H-<sup>13</sup>C.

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (№ FSEN-2023-0002).*

Литература

1. Чиряпкин А.С. Обзор производных пиримидина как фармакологически активных соединений // *Juvenis scientia*. 2022. Том 8. No 5. С. 16-30.

© Епифанцева В.Э., Егоров Д.М., 2024

УДК 547.787:547.415.1

4-АРИЛИДЕН-2-ФЕНИЛ-5(4Н)-ОКСАЗОЛОНЫ В РЕАКЦИЯХ С  
ЭТИЛЕНДИАМИНОМ

Зубкова С.Л., Амальчиева О.А., Егорова А.Ю

*Саратовский национальный исследовательский государственный  
университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия*

Арилиденовые производные оксазолонина представляют широкий интерес, т.к. являются подходящими субстратами для синтеза сложных гетероциклических соединений с потенциальной биологической активностью. Оксазолонина и их производные, такие как фуранонина, используются в производстве различных биологически активных препаратов. Эти соединения играют важную роль в разработке противомикробных, антибактериальных, противогрибковых, противовоспалительных, антивирусных препаратов. Замещения в положениях С-4 и С-2 в оксазолонинавом кольце могут оказывать влияние на их активность в определенной степени.[1]

В данной работе изучены реакции взаимодействия арилиденовых производных оксазолонина с бинуклеофильным алифатическим амином. Электронодонорные и электроноакцепторные заместители в исходном соединении позволяют наблюдать различное протекание реакций в одних и тех же условиях.

Несколько замещенных оксазолонинаов были синтезированы путем конденсации гиппуровой кислоты с различными ароматическими альдегидами в присутствии ацетата натрия и пропионового ангидрида. Процесс циклодегидратации с последующей конденсацией является самым ранним методом получения оксазолонинаов. Ацетат натрия служит катализатором реакции и необходим для снятия протона в положении С-3 лактонного цикла. Пропионовый ангидрид является водоотнимающим средством. [2] (схема 1)

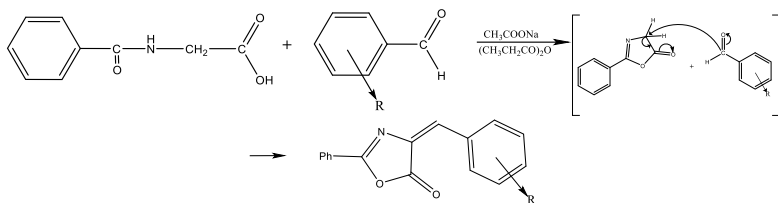


Схема 1. R: -2,4-Cl, -3,4-OCH<sub>3</sub>

Взаимодействие 5-арилиден-2-фенил-5(4H)-оксазолонов с этилендиамином протекает с избытком нуклеофильного агента (1:3) и при нагревании в толуоле. Нуклеофил атакует субстрат по карбонильной группе оксазолонового цикла. Последующая внутримолекулярная циклодегидратация, приводит к образованию продуктов 1-2. (схема2)

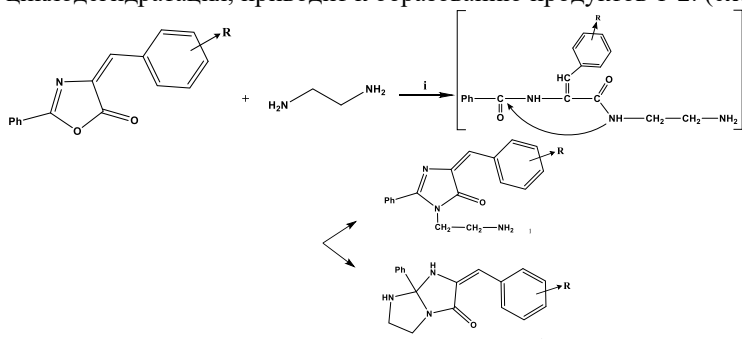


Схема 2. i: толуол, 1:3, t°C, R: -2,4-Cl, -3,4-OCH<sub>3</sub>

#### Литература

- Haneen D. S. A., Abou-Elmagd W. S. I., Youssef A. S. A. 5 (4 H)-oxazolones: synthesis and biological activities //Synthetic Communications. – 2021. – Т. 51. – №. 2. – С. 215-233.
- Kushwaha N., Kushwaha S. Synthetic approaches and biological significance of oxazolone moieties: A review //Biointerface Res. Appl. Chem. – 2022. – Т. 12. – С. 6460-6486.

©Зубкова С.Л., Амальчиева О.А., Егорова А.Ю., 2024

УДК 542.97: 547-314

### НОВЫЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ НЕНАСЫЩЕННЫХ (Z,Z)-1,5-ДИЕНОВЫХ МАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ ДИОЛИДОВ

Исламов И.И., Гайсин И.В.

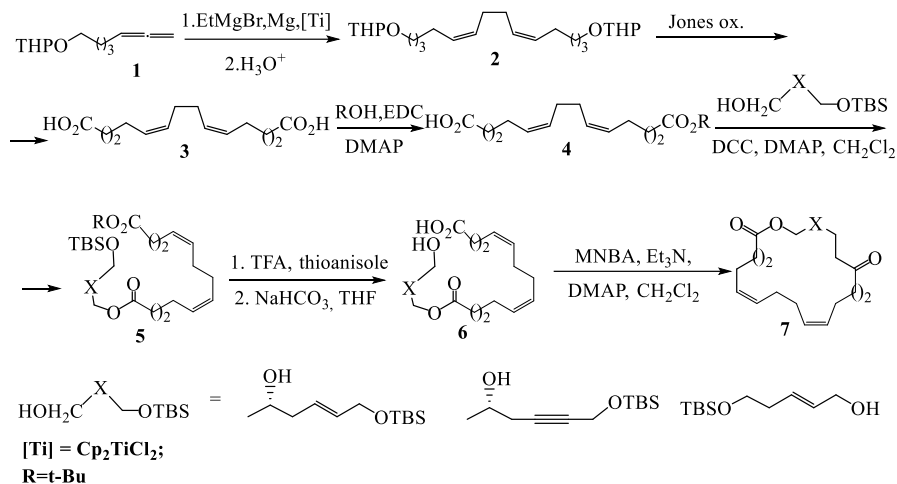
*Институт нефтехимии и катализа РАН, Уфа, Россия*

В работе предложена схема синтеза новых непредельных макроциклов, содержащих в структуре фармакофорный (Z,Z)-1,5-диеновый фрагмент, перспективных противоопухолевых и антибактериальных соединений.



Целевые макродиолиды получены из (5*Z*,9*Z*)-тетрадека-5,9-диен-1,14-диовой кислоты **3**, синтез которой основан на оригинальной реакции гомоцикломагнирования *O*-содержащих 1,2-диенов катализируемой  $\text{Cr}_2\text{TiCl}_2$  (реакции Джемилева) (Схема 1) [1]. Предварительно защитив одну из карбоксильных групп дикислоты **3**, синтезировали сложные эфиры **5** с различными диолами. После снятия защитных групп осуществили внутримолекулярную макролактонизацию по Шиине с получением диолидов **7** с выходами 66-75% (Схема 1) [2].

Схема 1



Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 22-73-10164).

#### Литература

1. Dzhemileva L.U., Islamov I.I., et al. // *Bioorg. Chem.* **2020**, 99, p. 103832.
2. Shiina I., Kubota M., Oshiumi H., Hashizume M. // *J. Org. Chem.* **2004**, 69, 6, 1822–1830.

© Исламов И.И., Гайсин И.В., 2024 г.

УДК 547

#### ПОТЕНЦИАЛЬНО ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ НА ОСНОВЕ 3-ГИДРОКСИТЕТГИДРОФУРАНА

Исхакова А.И., Охиров Ш.М., Кутлуялова Г.А.,  
Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

С целью расширения спектра проявляемых фармакологических свойств 3-гидрокситетрагидрофурана (**1**) были проведены взаимодействия

последнего с кислотами: бензойной, 4-бромбензойной, 4-нитробензойной. В результате получены тетрагидрофуран-3-ил бензоат (**2a**), тетрагидрофуран-3-ил 4-бромбензоат (**2b**), тетрагидрофуран-3-ил 4-нитробензоат (**2c**), соответственно (см. схему). Соединения **2(a-c)**, согласно программе Pass Online, могут проявлять виды биологической активности (таб. 1), отличные от свойств 3-гидрокситетрагидрофурана (**1**), при их низкой токсичности, рассчитанной на основе программы Gusar Online.

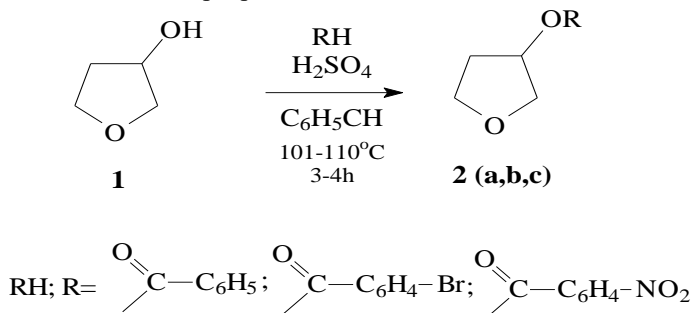


Схема 1. Реакция 3-гидрокси-тетрагидрофурана (**1**) и кислот в присутствии катализатора.

Таблица 1

Фармакологическая активность соединений (**2a-c**)

Соединение	Вид активности	Pa
2a	Ингибитор 5-O-(4-кумароил)-D-хинат 3 монооксигеназы	0,804
	Ингибитор UDP-N-ацетилглюкозамин-4-эпимеразы	0,797
	Ингибитор транскетолазы формальдегида	0,782
2b	Субстрат CYP2H	0,898
	Лечение фобических расстройств	0,674
	Ингибитор бета-глюкуронидазы	0,548
2c	Субстрат CYP2H	0,883
	Ингибитор орнитинэстеразы фузаринин-C	0,825
	Субстрат CYP3A	0,649

Pa – вероятность наличия у соединения активности на основании его структуры  
 В таблице представлены свойства продуктов, отсутствующие у исходных веществ.

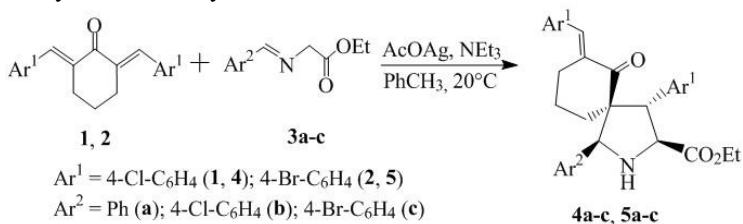
© Исхакова А.И., Охиров Ш.М., Кутлююлова Г.А.,  
 Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф., 2024

КИСЛОТНО-КАТАЛИЗИРУЕМАЯ ИЗОМЕРИЗАЦИЯ ПРОИЗВОДНЫХ  
2-АЗАСПИРО[4.5]ДЕКАНА

Калязин В.А., Безрукова Е.В., Кострюков С.Г.  
ФГБОУ ВО «МГУ им. Н.П. Огарёва», Саранск, Россия.

Циклические  $\alpha,\beta$ -непредельные кетоны с экзоциклическим расположением кратной связи интересны в качестве диполярфилов в реакциях 1,3-диполярного циклоприсоединения, поскольку позволяют получать спироциклические [1] и спирогетероциклические [2,3] соединения с высокой регио- и стерео-селективностью.

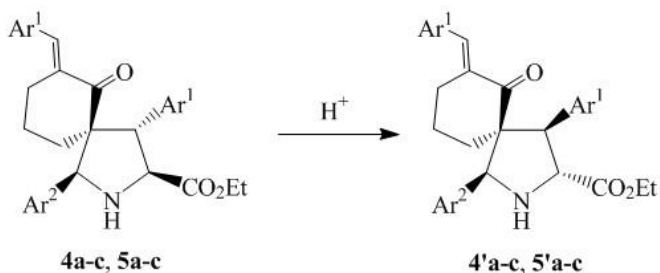
Нами были получены производные *para*-галогензамещенных дибензилиденциклогексанонов **1** и **2**, как предшественники соответствующих диаддуктов.



Реакцию с ариальдимидами **3a-c** проводили в толуоле при катализе ацетатом серебра, в присутствии полуторакратного избытка триэтиламина, без доступа света. Ход реакции контролировали методом ТСХ. В качестве основного продукта во всех случаях получались спиропроизводные **4a-c**, **5a-c** (90–93%), которые очищали кристаллизацией из смеси петролейного эфира и хлористого метилена (10 : 3).

В ходе ЯМР-исследований полученных соединений было установлено, что в растворах в  $\text{CDCl}_3$  происходит постепенная изомеризация, причем при добавлении к образцу основания (триэтиламин, трехкратный молярный избыток) скорость этого процесса заметно снижается. Это свидетельствует о каталитической роли кислотных примесей в составе дейтерохлороформа и что изомеризация носит кислотно-катализируемый характер.

Строение полученных изомеров устанавливали на основании данных  $^1\text{H}$  –  $^{13}\text{C}$  НМВС и  $^1\text{H}$  –  $^1\text{H}$  NOESY спектров реакционных смесей.



Так, на основании  $^1\text{H} - ^{13}\text{C}$  НМВС установлено, что изомеры сохраняют положение заместителей у пирролидинового цикла. Это подтверждается наличием кросс-пиков  $\text{H}^3/\text{C}_{\text{сл.эф}}$ ,  $\text{H}^4/\text{C}_{\text{сл.эф}}$  и  $\text{H}^1/\text{C}_{\text{кет}}$ ,  $\text{H}^2/\text{C}_{\text{кет}}$ .

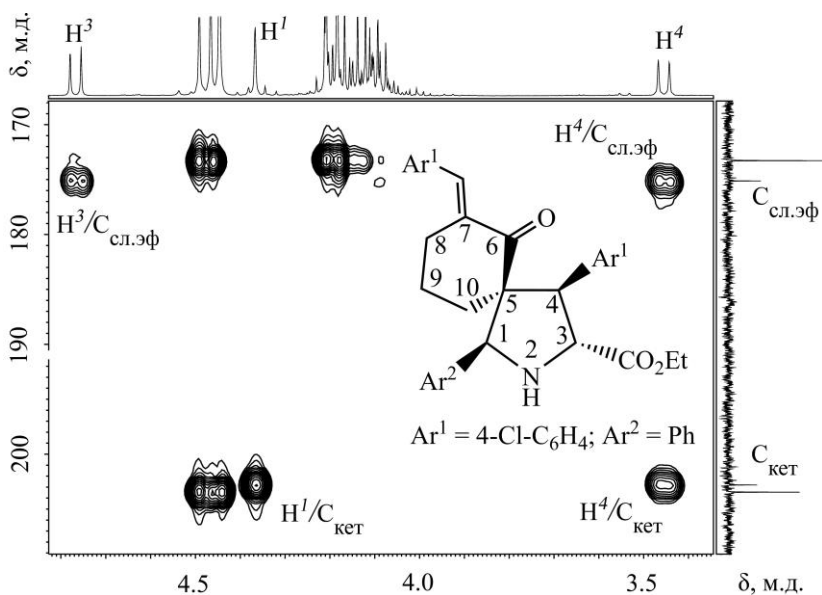


Рис. 1. Фрагмент  $^1\text{H} - ^{13}\text{C}$  НМВС спектра соединения **4'b**

Расположение арильных заместителей определяли по наличию кросс-пиков 1 и 2 углеродов бензольного кольца с  $\text{H}^1$  и  $\text{H}^4$  пирролидинового цикла.

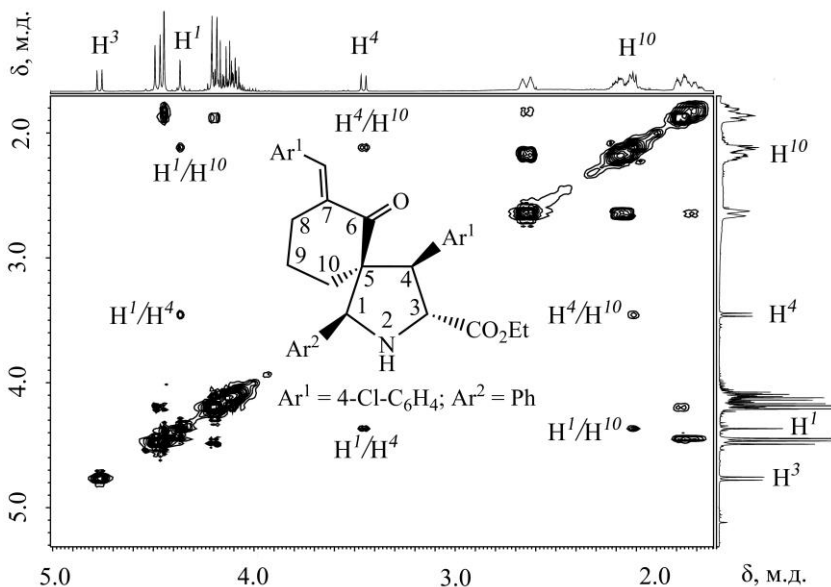


Рис. 2. Фрагмент  $^1\text{H} - ^1\text{H}$  NOESY спектра соединения **4'b**

Пространственное строение устанавливали посредством NOESY-эксперимента (Рисунок 2). Наличие кросс-пиков  $\text{H}^1/\text{H}^{10}$ ,  $\text{H}^4/\text{H}^{10}$ ,  $\text{H}^1/\text{H}^4$  указывает на расположение кето-группы и двух арильных заместителей по одну сторону пирролидинового цикла. Это указывает, изменению конфигурации подверглись 3 и 4 атомы цикла.

Следует отметить, что для аналогичных циклоаддуктов с производными дибензилиденацетона процесса изомеризации не наблюдается. Это позволяет предположить ключевую роль пространственно фиксированной кето-группы, а также стерического взаимодействия арильного заместителя в положении 4 и  $\text{CH}_2$  в положении 10 для соединений **4a-c**, **5a-c**.

#### Литература

1. Hui C., Brieger L., Strohmann C. et al. Stereoselective Synthesis of Cyclobutanes by Contraction of Pyrrolidines // *J. Am. Chem. Soc.* 2021. V. 143, № 45. P. 18864–18870.
2. Bdiri B., Li C., Zhou Z. Asymmetric synthesis of spirocyclohexanone-pyrrolidine via AgI-catalysed asymmetric 1,3-dipolar cycloaddition of azomethine ylides // *Tetrahedron: Asymmetry*. 2017. V. 28, № 85. P. 1044–1052.
3. Gayen B., Banerji A. Selective Synthesis of 6'-Arylidene-1-aryl-3-aryl-spiro[pyrrolizidine-2,2'-cyclohexanone] by Cycloaddition of Azomethine Ylides to Dibenzylidene Cyclohexanone // *J. Heterocyclic Chem.* 2014. V. 52, № 3. P. 919–925.

© Калязин В.А., Безрукова Е.В., Кострюков С.Г., 2024

УДК 547.831.3

СИНТЕЗ НОВОЙ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ 10А-ГИДРОКСИ-6,6,8-ТРИМЕТИЛ-4-НИТРО-7,8-ДИГИРО-6Н-ПИРАНО[2,3,4-С,Д]ПИРИДО[3,2,1-Н,1]ИНДОЛ-10(10АН)-ОНА

Карелина К.О., Потапов А.Ю., Шихалиев Х.С.

*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

Современная органическая химия все больше внимания уделяет разработке методов синтеза гибридных гетероциклических молекул, например, содержащих фрагменты пиррола и хинолина. Интерес к таким соединениям обусловлен перспективой поиска новых биологически активных веществ, так как их молекулы содержат два широко известных фармакофорных фрагмента. Многие из недавно полученных пирролохинолинов проявляют ярко выраженную физиологическую активность [1-5], что стимулирует разработку новых методов получения систем на их основе.

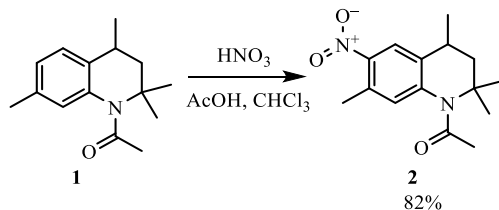
Целью данной работы являлась разработка метода аннелирования пиррольного цикла к 2,2,4,7-тетраметил-1,2,3,4-тетрагидрохинолину.

Для достижения поставленной цели был выбран метод синтеза индольного цикла по реакции Лемгрубера-Бачо [6], включающий два этапа: конденсация диметилацетала диметилформамида с нитропроизводным 7-метилтетрагидрохинолина; восстановительная циклизация енамина с образованием пиррологидрохинолина.

Поскольку в условия прямого нитрования тетрагидрохинолин может подвергаться N-протонированию [7], для сохранения нейтральности системы был использован N-ацетил-2,2,4,7-тетраметил-1,2,3,4-тетрагидрохинолин **1**. Известно, что в результате обработки дымящей азотной кислотой раствора N-ацилгидрохинолина в среде хлороформа, содержащего каталитические количества ледяной уксусной кислоты, нитрование протекает по 6 положению хинолинового остова [8].

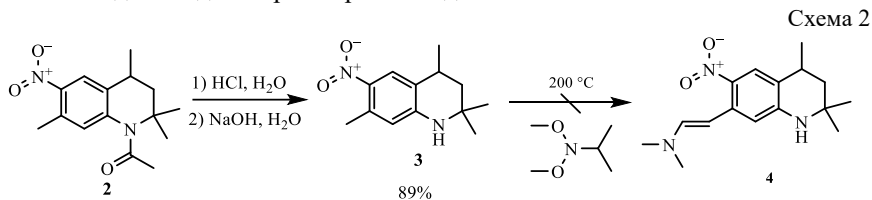
В результате нитрования в данных условиях N-ацетил-2,2,4,7-тетраметил-1,2,3,4-тетрагидрохинолина **1** был получен N-ацетил-2,2,4,7-тетраметил-6-нитро-1,2,3,4-тетрагидрохинолин **2** с выходом 82 % (схема 1).

Схема 1

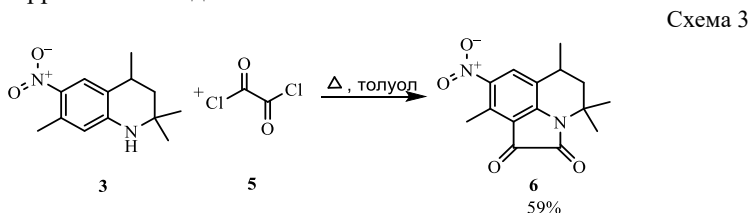


Для удаления защитной N-ацетильной группы был проведен кислотнокатализируемый гидролиз хинолина **2**. Выход 2,2,4,7-тетраметил-6-нитро-1,2,3,4-тетрагидрохинолина **3** составил 89% (схема 2).

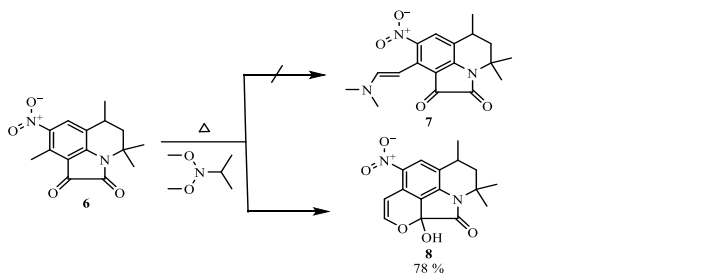
К сожалению, конденсация хинолина **3** с диметилацеталем диметилформаида не увенчалась успехом (схема 2). Образование 7-(2-(диметиламино)винил)-2,2,4-триметил-6-нитро-1,2,3,4-тетрагидрохинолина **4** не наблюдалось даже при нагревании до 200 °С.



С целью повышения СН-кислотности 7-СН<sub>3</sub>-группы был синтезирован 4,4,6,9-тетраметил-8-нитро-5,6-дигидро-4Н-пирроло[3,2,1-ij]хинолин-1,2-дион **6** (схема 3). Реакцию проводили при кипячении эквимольной смеси хинолина **3** и оксалилхлорида **5** в среде толуола по известной методике [9, 10]. Выход пирролохинолиндиона **6** составил 59 %.



Было установлено, что в ходе конденсации пирролохинолиндиона **6** с избытком диметилацетала диметилформаида вместо 9-(2-(диметиламино)винил)-4,4,6-триметил-8-нитро-5,6-дигидро-4Н-пирроло[3,2,1-ij]хинолин-1,2-диона **7** получен неожиданный продукт циклизации 10а-гидрокси-6,6,8-триметил-4-нитро-7,8-дигидро-6Н-пирано[2,3,4-с,d]пиридо[3,2,1-h,i]индол-10(10аН)-он **8** (схема 4).



Строение полученных соединений подтверждено методами ВЭЖХ/МС и ЯМР <sup>1</sup>Н спектроскопии.

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2023-2025 годы, проект № FZGU-2023-0009.*

#### Литература

1. Synthesis and anti-leukaemic activity of pyrrolo[3,2,1-hi]indole-1,2- diones, pyrrolo[3,2,1-ij]quinoline-1,2-diones and other poly olo[3,2,1-ij]quinoline-1,2-diones and other polycyclic isatin deriv clic isatin derivatives / L. Matesic [et al.] // Tetrahedron. – 2012. – V. 68, № 34. – P. 6810 – 6819.
2. Discovery of 3H-pyrrolo[2,3-c]quinolines with activity against Mycobacterium tuberculosis by allosteric inhibition of the glutamate-5- kinase enzyme . M. Panciera [et al.]// Eur. J. Med. Chem. – 2022. – V. 232. – 114206. – <https://doi.org/10.1016/j.ejmech.2022.114206>.
3. Ryu, C.-K Synthesis and antifungal activity of 1H-pyrrolo[3,2-g]quinoline-4,9-diones and 4,9-dioxo-4,9-dihydro-1H-benzo[f]indoles / C.-K. Ryu [et al.] // Bioorg. Med. Chem. Lett. – 2009. – V. 19, № 1. – P. 146 – 148.
4. Synthesis and in vitro and in vivo antitumor activity of 2-phenylpyrroloquinolin-4-ones / M.G. Ferline [et al.] // J. Med. Chem. – 2005. – V. 48. – P. 3417 – 3427.
5. A facile synthesis and antibacterial activity of novel pyrrolo[3,4-b]quinolin-2(3H-yl)benzamides / T.H. Largani [et al.] // Green Chem. Lett. Rev. – 2017. – V. 10, № 4. – P. 387 – 392.
6. Bugaenko D.I. Synthesis of indoles: recent advances / D.I. Bugaenko, A.V. Karchava, M.A. Yurovskaya // Russ. Chem. Rev. – 2019. – Vol. 88, № 2. – P. 99-159.
7. Synthesis of 6-Nitro-1,2,3,4-tetrahydroquinoline: An Experimental and Theoretical Study of Regioselective Nitration / A. Cordeiro [et al.] // Eur. J. Org. Chem. – 2011. – V. 2011, № 8. – P. 1504 – 1513.
8. Нитрование 2,2,4-триметил-4-фенил-1,2,3,4-тетрагидрохинолина и его N-ацилпроизводных / Ж.В. Шмырева [и др.] // ЖОХ. – 1989. – Т. 59, № 6. – С.1391 – 1397.
9. Синтез 4,4,6-триметил-8-R-4H-пирроло[3,2,1-ij]хинолин-1,2-дионов / Е.В. Лещева [и др.] // Журн. орг. та фармац. хімії. – 2014. – Т. 12, № 2. – С. 15 – 20.
10. New hybrid compounds bearing pyrrolo[3,2,1-ij ]quinolin-2-one and coumarin motifs. Synthesis and evaluation of anticoagulant activity / A.A. Skoptsova [et al.] // Russ. Chem. Bull. – 2023. – V. 72, № 12. – P. 2898 – 2907.

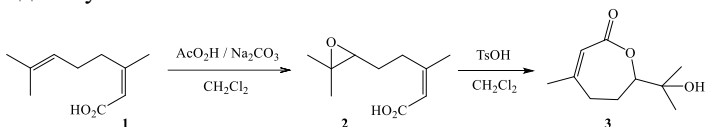
© Карелина К.О., Потапов А.Ю., Шихалиев Х.С., 2024



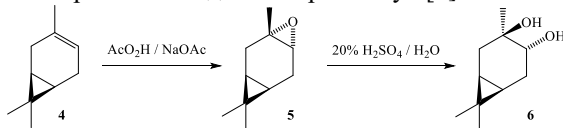
ОКИСЛЕНИЕ МОНОТЕРПЕНОВЫХ ОЛЕФИНОВ  
НАДУКСУСНОЙ КИСЛОТОЙКоваленко<sup>1</sup> А.А., Выдрин<sup>2</sup> В.А., Яковлева<sup>2</sup> М.П.<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия<sup>2</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Реакция Прилежаева – это диастереоселективная реакция взаимодействия алкенов с надкислотами с образованием оксиранов (эпоксидов), в которой электрофильный реагент подходит и реагирует со стерически менее затрудненной стороны. Полученные оксираны легко раскрываются под действием кислотных реагентов, что часто используется в органическом синтезе.

Региоселективное эпоксидирование присутствующей во многих видах герани *Geranium* цис-гераниевой кислоты (1) протекает по изолированной двойной связи надуксусной кислотой (получена добавлением 30%-ной  $H_2O_2$  к  $As_2O$ ) в присутствии  $Na_2CO_3$  (для предотвращения раскрытия оксиранового цикла) в  $CH_2Cl_2$  с получением цис-6,7-эпоксигераниевой кислоты (2). Последняя под действием каталитического количества  $TsOH$  циклизуется в 3,7-диметил-7-гидрокси-2-октен-1,6-олид (3). Непредельный лактон (3) ранее [1] был выделен из плодов растения литсея *Litsea cubeba* из семейства лавровых в Тибете и проявил хорошую противогрибковую и антиоксидантную активность.



Диастереоселективное окисление по Прилежаеву доступного из живицы сосен *Pinus*  $\Delta^3$ -карена (4) (ее 100%) надуксусной кислотой в присутствии  $AcONa$  (для предотвращения раскрытия оксиранового цикла) в  $CH_2Cl_2$  протекает с образованием (1S,3S,5R,7R)-3,8,8-триметил-4-оксатрицикло-[5.1.0.03,5]октана (5) с хорошей диастереоселективностью. Обработка его 20%-ным водным раствором  $H_2SO_4$  приводит к (1S,3R,4R,6R)-3,7,7-триметилбицикло[4.1.0]октан-3,4-диолу (6). Последний проявляет свойства репеллента для комаров и мух [2].



## Литература

1. Dong H.-Bo, Yang M.-Y., Jiang J.-Z., Wang M.-An. // J. Asian Nat. Prod. Res. 2013. V. 15 (8). P. 880–884, <http://dx.doi.org/10.1080/10286020.2013.803474>
2. Xiaoling S., Gying J., Ping C., Xiaoyan Z., Rui W. Pat. CN102060671A. China.

© Коваленко А.А., Выдрина В.А., Яковлева М.П., 2024

УДК 541.14:547.551.2

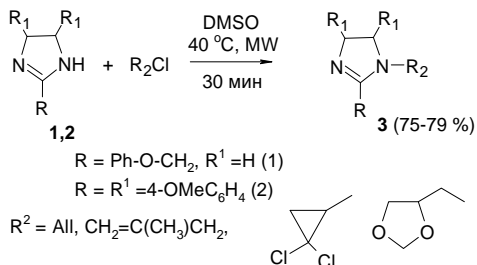
### ВЛИЯНИЕ МИКРОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА РЕАКЦИЮ NH-АЛКИЛИРОВАНИЯ 2-ЗАМЕЩЕННЫХ ИМИДАЗОЛИНОВ

Кулешина Г.З., Хуснутдинова Н.С., Султанова Р.М.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет,  
Уфа, Россия*

Замещенные имидазолины применяются в качестве ингибиторов коррозии, компонентов моющих средств, основы неполярных растворителей для гидрофобизации древесины, бетона, металла, смягчителей и антистатиков тканей [1]

В настоящей работе с целью синтеза третичных аминов **3** осуществлено *NH*-алкилирование моно- и тризамещенных имидазолинов **1**, **2** промышленно доступными алкилгалогенидами (хлористым аллилом, метилаллилхлоридом, 2-хлорметил-гем-дихлорциклопропаном, 4-бромэтил-1,3-диоксоланом) в условиях микроволнового излучения (МВИ). Реакция протекает при эквимольном соотношении исходных реагентов (40 °С, 400 Вт, DMSO, 30 мин). Целевые третичные амины были выделены с выходами 75-79%.



Обнаружено, что природа заместителя в галоидном алкиле и имидазолиновом фрагменте не влияет на выход имидазолинов **3**. Образование четвертичных солей в выбранных условиях не наблюдается.

*Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России в сфере научной деятельности, номер для публикаций FEUR — 2022-*

Литература

1. D. Vajpai, V. K. Tyagi, Journal of Oleo Science. 2006, 55, 319.

© Кулешина Г.З., Хуснугдинова Н.С., Султанова Р.М., 2024

УДК 547.76:543.429.23:543.51

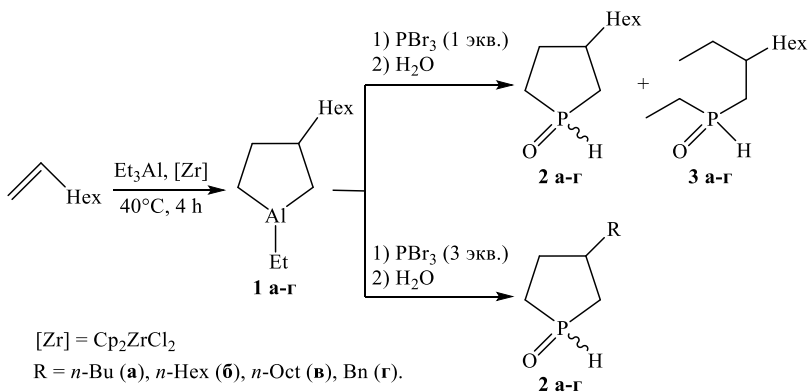
СИНТЕЗ 3-ЗАМЕЩЕННЫХ 1Н-ФОСФОЛАНОКСИДОВ РЕАКЦИЕЙ  
АЛЮМОЛАНОВ С  $PBr_3/H_2O$

Куликова А.М., Алехина И.Е., Махаматханова А.Л.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В развитие исследований по разработке эффективных методов синтеза пятичленных фосфатгетероциклов [1], разработан метод синтеза 3-замещенных 1Н-фосфоланоксидов реакцией алюмоланов с трибромидом фосфора.

Установлено, что алюмолананы, синтезированные реакцией циклоалюминирования  $\alpha$ -олефинов (гексена-1, октана-1, децена-1, аллилбензола) с помощью  $Et_3Al$  в присутствии 5 мол%  $Cp_2ZrCl_2$ , без предварительного выделения вступают в реакцию с 3-х кратным избытком  $PBr_3$  и после гидролиза реакционной массы образуют целевые 1Н-фосфоланоксиды **2 а-г** с выходами 54–78 %. При использовании эквимольного количества  $PBr_3$  происходит образование двух продуктов – 3-замещенного 1Н-фосфоланоксида **2** и продукта раскрытия алюминациклопропанового кольца **3** в соотношении ~ 2 : 1.



Полученные циклические 1Н-фосфиноксиды перспективны в качестве лигандов для синтеза новых катализаторов для гомогенного катализа, а также в качестве антисептиков, фунгицидов, инсектицидов.

#### Литература

1. Makhamatkhanova, A.L., Tyumkina, T.V., Dzhemilev, U.M. Approach to the synthesis of five-membered organophosphorus compounds through alumoles and alumolanes. – // Chemistry Proceedings. – 2022. – Vol.12. – P.47. DOI: 10.3390/ecsoc-26-13637

© Куликова А.М., Алехина И.Е., Махаматханова А.Л., 2024

УДК 547.816.4

### ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ 3-ЗАМЕЩЕННЫХ (БЕНЗО)ПИРАНОНОВ С РЕАКТИВОМ ЛАВЕССОНА

Куренкова Д.Х., Арязмова Е.М., Мажукина А.О.

*Саратовский национальный исследовательский государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Институт химии, Саратов, Россия*

Замещенные 2Н-пиран-2-оны формируют системы с широким спектром фармакологической активности, поэтому используются в качестве действующего вещества во многих современных лекарственных препаратах. Для них описаны антибактериальное, сосудорасширяющее, антимуtagenное, противоопухолевое, антиvirусное свойства [1]. В последние годы рассматривается применение реагента Лавессона для синтеза как открыто цепных P,S-содержащих производных, так и P,S-гетероциклических систем, потенциально обладающих биологической активностью [2].

В данной работе в качестве исходного соединения были выбраны арилметилден-2Н-пиран-2-оны с целью изучения их взаимодействия с 2,4-бис(4-метоксифенил)-1,3,2,4-дитиадифосфэтан-2,4-дисульфидом (реагентом Лавессона). В зависимости от условий реакции и строения исходных субстратов, взаимодействие с реагентом Лавессона приводит к разнообразным продуктам. В нашем случае субстрат (1a-b) и реагент Лавессона перемешивали на магнитной мешалке при нагревании в течение 6 часов, в качестве растворителя использовался толуол.

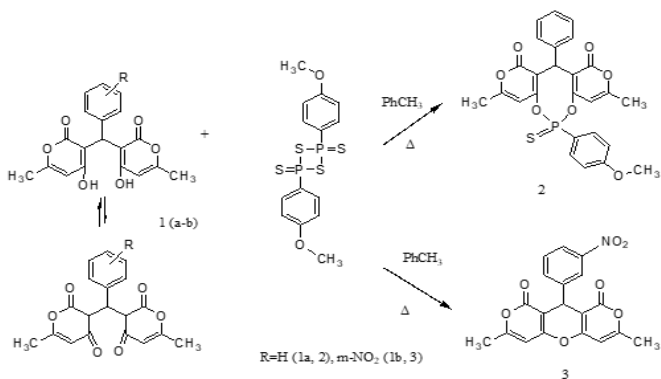


Схема 1. Синтез (4aR,7aR,11aR,12aR)-6-(4-метоксифенил)-3,9-диметил-12-фенил-7a,11a,12,12a-тетрагидро-1H-дипирано[4,3-d:3',4'-g][1,3,2]диоксафосфин-1,11(4aH)-дион 6-дульфида (2) 3,7-диметил-10-(3-нитрофенил)-5a,9a,10,10a-тетрагидро-1H-дипирано[4,3-b:3',4'-e]пиран-1,9(4aH)-диона (3)

Известно, что для систем, включающих 4-гидрокси-2H-пиран-2-оновый фрагмент, существует keto-енольное равновесие, смещение которого в ту или иную сторону определяется двумя факторами: характером заместителя в ароматическом кольце и полярностью растворителя [3]. Используемый в реакции толуол способствует енолизации субстрата, и в реакции с фенилзамещенным метилен-2H-пиран-2-оном происходит образование фосфорсероорганического соединения (2). Данный факт подтверждается наличием в ЯМР<sup>1</sup>H спектров сигналов метоксигруппы при 3.84 м.д. и исчезновением сигналов гидроксильных групп, синглет метинового протона отмечается при 5.50 м.д. В случае нитрофенилзамещенного субстрата реагент Лавессона, выступая в роли кислоты Льюиса, активирует оксофункцию и способствует кетализации субстрата, в следствии чего происходит внутримолекулярная O-гетероциклизация (3). В ЯМР<sup>1</sup>H спектрах продукта сохраняются синглет метинового протона при 5.45 м.д и винильных протонов при 5.97 м.д.

#### Литература

1. B. Lakshminarayanan, V. Rajamanickam, T Subburaju, L. A. Pradeep Rajkumar, H. Revathi, Synthesis and Antimicrobial Activity of Some Aldehyde Derivatives of 3-Acetylchromen-2-one, E-Journal of Chemistry (2010), Vol. 7, P. 400-404.
2. Maha D. Khidre, Azza A. Kamel, An approach to biologically important chromenes bearing P-S-heterocycles. Based on the chemistry of Lawesson's reagen, ARKIVOC 2008 (xvi), P. 189-201.

3. O. Mazhukina, Y. Monakhova, S. Kolesnikova, O. Fedotova, S. Mushtakova, Keto-enol tautomerism in the series of 3-substituted chromen-2-ones, Journal of Materials Science and Engineering B 2 (10) (2012), P. 505 – 512.

© Куренкова Д.Х., Арзямова Е.М., Мажукина А.О., 2024

УДК 547.415.1'435.1'484.2'745.04:543.422.25

## ХИМИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ АРИЛИДЕНОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ОКСАЗОЛО-5(4Н)-ОНОВ В РЕАКЦИЯХ С БИНУКЛЕОФИЛЬНЫМИ РЕАГЕНТАМИ

Курилкина О.Е., Амальчиева О.А., Егорова А.Ю.

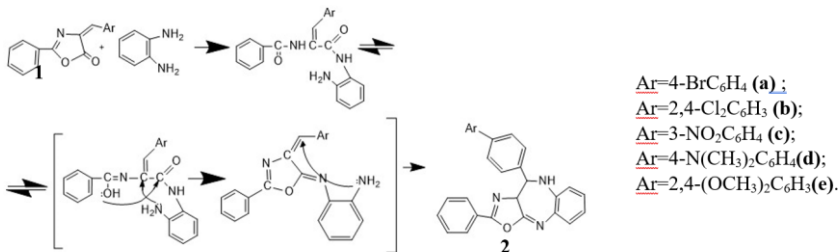
*ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский  
государственный университет имени Н.Г. Чернышевского», Саратов,  
Россия*

Оксазолоновая группа участвует в качестве промежуточного звена в синтезе различных соединений таких как аминоспирты, амиды, аминокислоты и красители. Оксазолонны представляют собой гетероциклические соединения, которые могут быть использованы в качестве универсальных строительных блоков в органическом синтезе, поскольку они содержат многочисленные реакционноспособные центры, допускающие разнообразие возможных модификаций [1]. Их реакционная способность (нуклеофильная атака на атом углерода в положении 5 оксазолонового кольца) делает их отличными субстратами для синтеза, например, енолацетата и производных бензоксазина, фенилпировиноградной кислоты, имидазолинонов, аминокислот и триазинонов.

Исходя из вышесказанного и был разработан ряд новых бензамидов. Бензамиды являются биологически активными агентами, проявляющими антибактериальную, обезболивающую, противомикробную, противодиабетическую, противовоспалительную активности, а также ингибируют трипсин и тирозиназу.

В данной работе было исследовано взаимодействие бинуклеофильных реагентов ароматического ряда с азотосодержащими гетероциклическими соединениями на основе арилиденовых производных оксазолов -5(4Н)-онов, содержащих различные заместители в ароматическом кольце, также установлены наиболее оптимальные условия синтеза.

Установлено, что при кипячении соединения (**1a-e**) с двухкратным избытком 1,2-фенилендиамина в этаноле и с добавлением поташа в реакторе приводит к образованию продукта (**2a-e**).



Выход продуктов составляет: **2a**- 53,3% , **2b**-63,5%, **2c**- 14,3%, **2d**-61,5%, **2e**-21,9%. Такой выход может быть обусловлен стерическими особенностями соединений.

Строение полученных соединений (**2a-e**) было охарактеризовано с помощью ИК-спектроскопии и данных элементного анализа.

#### Литература

1.Gucky, T.; Frysova, I.; Slouka, J.; Hajduch, M.; Dzubak, P. Eur/ T. Gucky [et al.] // Eur J Med Chem- 2009.- Vol. 44- P. 891.

© Курилкина О.Е., Амальчиева О.А., Егорова А.Ю., 2024

УДК 547.915:665

#### ЭФИРЫ ЖИРНЫХ КИСЛОТ *RUTA GRAVEOLENS* L И *HAPLOPHYLLUM PERFORATUM* (M.ВІЕВ.) VVED.

Мамарозиков У.Б., Хидирова Н.К., Тураева С.М., Закирова Р.П.,  
Асилбекова Д.Т.

*Институте химии растительных веществ им. академика С.Ю. Юнусова АН РУз, Ташкент, Республика Узбекистан*

Интенсификация сельского хозяйства требует широкое применение синтетических пестицидов, которые могут в значительной степени изменять интенсивность метаболических процессов растений, снижать продуктивности и качества урожая. Однако существуют виды растений, обладающие токсическим действием в отношении насекомых-вредителей, и они могут быть использованы для получения биопрепаратов. Ранее в Институте химии растительных веществ им. академика С.Ю. Юнусова АН РУз разработан регулятор роста «Учкун» растительного происхождения на основе полипренолов, выделенных из листьев хлопчатника (*Gossipium hirsutum* L., сем. Malvaceae). Препарат обладает стресс-протекторной активностью при культивировании растений в условиях засоления и дефицита воды [1].

Продолжая исследования в этом направлении изучили надземную часть растений *Ruta graveolens* L и *Haplophyllum perforatum* (M.Bieb.) Vved. (сем. Rutaceae). Во флоре мира род *Haplophyllum* A.Juss. включает 32 вида, 16 из которых, в том числе изученный таксон произрастают в Республике Узбекистан, а *R. graveolens* – интродуцированное в нашем регионе растение [2]. Для исследований получили гексановые фракции этанольных экстрактов из двух растений. Химические анализы проводили, применяя хроматографические методы анализов (ТСХ, ГЖХ, ГХ-МС) соединений липидной природы, описанные в [3].

В гексановом экстракте из *R. graveolens* с помощью ГЖХ и масс-спектрометрии были идентифицированы пигменты (каротиноиды, хлорофиллы), восковые эфиры алифатических спиртов с жирными кислотами, свободные жирные кислоты, метиловые и бутиловые эфиры гексадекановой (пальмитиновой) кислоты. Среди двадцати четырех летучих компонентов (ГХ-МС) основными были 2-ундеканон и 2-нонанон.

Гексановой фракции спиртового экстракта *H. perforatum* методом ГХ-МС, кроме пигментов, идентифицировали этиловые эфиры гексадекановой (этилпальмитат, 23.66%), (Z,Z,Z)-октадека-9,12,15-триеновой (этиллиноленат, 15.66%), (Z,Z)-октадека-9,12-диеновой (этиллинолеат) и (Z)-октадец-9-триеновой гислот (этилолеат, в сумме 14.36%), фитол (19.80%), (Z)-валеренил ацетат (3.62%), гексагидрофарнезил ацетон (1.89%) и еще 22 летучих соединений в минорном количестве (в пределах 1,32-0,03%).

Биологические исследования показали, что гексановой фракция этанольного экстракта *H. perforatum* обладает высокой инсектицидной активностью в отношении картофельной тли *Macrosiphum euphorbiae* Tomas. Кроме того, выявлена высокая токсичность экстракта и его комплекса с регулятором роста Учкун против томатной минирующей моли *Tuta absoluta* (Meurick) (Lepidoptera: Gelechiidae).

#### Литература

1. Khidirova N.K., Mamatkulova N.M., Kurbanova E.P., Ismailova K., Zakirova R.P., Khodjaniyazov Kh.U. Influence of an Uchkun preparation to some agricultural crops which are grown under unfavorable conditions. *International Journal Environmental & Agriculture Research*, 2016, 2(1): 102-108.
2. Asilbekova D.T., Gusakova S.D., Glushenkova A.I., Azizkhodzhaev A.R., Erkkenova E.M., Sakhibaeva M. *Chem. Nat. Comp.*, 29 (5), 574 (1993).
3. Kates M., *Techniques of Lipidology. Isolation, Analysis and Identification of Lipids*. New York: Elsevier, 1972, 610 pp.

© Мамарозиков У.Б., Хидирова Н.К., Тураева С.М., Закирова Р.П., Асилбекова Д.Т., 2024

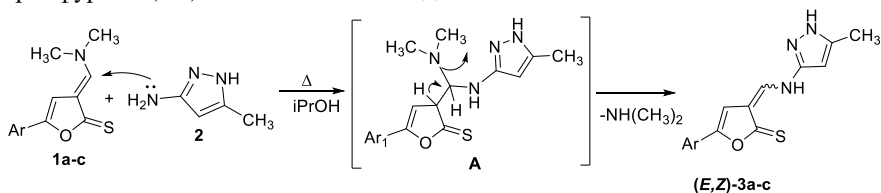


СИНТЕЗ (E,Z)-3-[[5-МЕТИЛ-1Н-ПИРАЗОЛ-3-ИЛ)АМИНО)-  
МЕТИЛИДЕН]-5-АРИЛФУРАН-2(3Н)-ТИОНОВ

Мамлеева Ж.В., Тихомолова А.С., Егорова А.Ю.

Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Институт химии, Саратов, Россия

В последнее время в области органического синтеза неуклонно возрастает интерес к енаминовым системам, а именно к диметиламинометилиденовым производным различных классов соединений. Данные структуры широко используются как платформенные соединения в дизайне и создании новых лигандов, обладающих противоопухолевой<sup>1-3</sup>, противовоспалительной<sup>1</sup> и антибактериальной<sup>4</sup> активностями. Соединения, содержащие диметиламинометилиденовый фрагмент, активно вводят в реакции с аминами различных классов соединений, которые сопровождаются получением аминометилиденовых структур. Ранее для синтеза аминометилиденовых производных использовался метод прямого аминирования 5-арилфуран-2(3Н)-онов, ортоэфира и гетероциклических аминов<sup>5-7</sup>. В продолжение исследований по разработке способов получения новых аминометилиденовых производных на основе фуран-2(3Н)-тионов и изучению химических свойств пуш-пульных 3-[[диметиламино)метилиден]5-арилфуран-2(3Н)-тионов **1a-c** проведены реакции их переаминирования с 3-амино-5-метилпиразолом **2**. Данное превращение проводили при кипячении в среде изопропилового спирта в течение 20 минут. Реакция протекает как первичная атака аминогруппы амина по Михаэлю с формированием промежуточного соединения **A**, с последующим элиминированием молекулы диметиламина, что приводит к образованию (E,Z)-3-[[5-метил-1Н-пиразол-3-ил)амино)метилиден]-5-арилфуран-2(3Н)-тионов **3a-c** с выходами 82-90%



Строение полученных соединений охарактеризовано методами ИК и ЯМР спектроскопии. Так, в ЯМР <sup>1</sup>H спектрах соединений **3a-c** наблюдается два набора сигналов, что позволяет интерпретировать их как существование равновесия E- и Z-форм в растворе, появление которого обусловлено двухтактной природой енаминов. Дублирование сигналов в спектрах ЯМР <sup>1</sup>H, зарегистрированных в ДМСО-d<sub>6</sub>, наблюдается для сигналов

экзоциклических протонов, синглетов винильных протонов при С-4 фуран-2(3*H*)-тионового фрагмента и дублетов NH-протонов для *E*- и *Z*-изомеров соответственно. Отнесение интегральных интенсивностей сигналов протонов NH-группы в спектрах ЯМР  $^1\text{H}$  позволяет определить содержание соответствующих изомеров в равновесных смесях: *Z*-изомера - по сигналу при 12.51 м.д. (0.55H), а *E*-изомера - по сигналу при 13.35 м.д. (0.45H) для соединения **3b**.

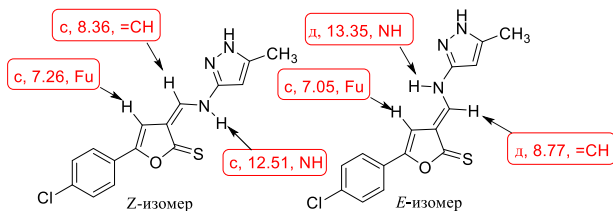


Рисунок 1. Характеристичные сигналы в спектрах ЯМР  $^1\text{H}$  на примере соединения **3b** ( $\delta$  в м.д.)

Таким образом, нами разработаны условия осуществления реакции переаминирования 3-[(диметиламино)метилен]-5-арилфуран-2(3*H*)-тионов с участием 3-амино-5-метилпиразола, которые протекают с образованием аминометилденовых производных 5-арилфуран-2(3*H*)-тионов, существующих в растворе в виде смеси *E*- и *Z*-форм.

#### Литература

1. Kaping, S.; Kalita, U.; Sunn, M.; Singha L. O.; Vishwakarma, J. N. *Monatsh. Chem.* 2016, *147*, 1257.
2. Abu-Bakr, S. M.; Khidre, M. D.; Omar, M. A.; Swelam, S. A.; Awad, H. M. *J. Heterocycl. Chem.* 2020, *57*, 731.
3. Fadda, A. A.; Soliman, N. N.; Fekri, A. *Ann. Adv. Chem.* 2017, *1*, 32.
4. El-Azab, I. H.; Break, L. M.; El-Zahrani, Z. A. A. *Orient. J. Chem.* 2016, *32*, 2435.
5. Tikhomolova, A. S.; Grinev, V. S.; Yegorova, A. Yu. *Molecules* 2023, *28*, 963.
6. Tikhomolova, A. S.; Mayorova, O. A.; Yegorova, A. Yu. *Izvest. Sar. Univer. Chem. Bio. Eco.* 2022, *22*, 4. [*Изв. Сарат. ун-та. Нов. сер. Сер.: Химия. Биология. Экология.* 2022, *22*, 4]
7. Amal'chieva, O. A.; Egorova A. Yu. *Russ. J. Org. Chem.* 2006, *42*, 1340. [О. А. Амальчиева, А. Ю. Егорова, *Журн. орган. химии*, 2006, *42*, 1358.]

© Мамлеева Ж.В, Тихомолова А.С., Егорова А.Ю., 2024

СИНТЕЗ N-АРОИЛ(ГЕТЕРОИЛ)ЗАМЕЩЁННЫХ  
СПИРОПИРАЗОЛИНКАРБОНИТРИЛОВ И 1-N-ПИРАЗОЛОВ НА  
ОСНОВЕ ГИДРАЗИДОВ В УСЛОВИЯХ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ  
АКТИВАЦИИ

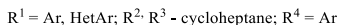
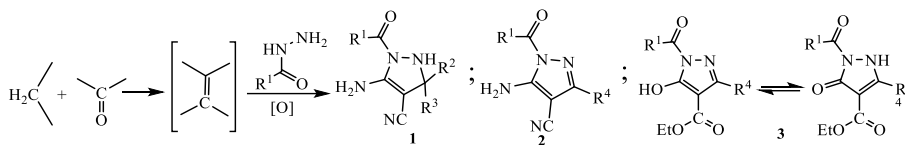
Мещерякова А.А., Константинова Е.А., Видлацкая Д.В., Пятунин Б.Н.,  
Сорокин В.В.

*ФГБОУ ВО Саратовский национальный исследовательский  
государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия*

Пиразолы и пиразолины, содержащие в своем составе аминокарбонитрильный фрагмент, представляют интерес для прикладных исследований и синтеза на их основе различных конденсированных полигетероциклических систем [1-2].

Ранее нами было описано получение спиропиразолинкарбонитрилов и 5-амино-3-R-1-(нитробензоил)-1Н-пиразол-4-карбонитрилов путём трехкомпонентных реакций гидразидов ароматических и гетероароматических кислот, малонитрила и замещённых ароматических альдегидов и пяти- и шестичленных циклоалканонов [3-4]. В продолжение исследований нами изучена возможность синтеза подобных систем в условиях, соответствующим принципам «зеленой химии» и при варьировании различных карбонильных и метиленовых компонентов. Так, были получены спиропиразолинкарбонитрилы **1** с использованием циклогептанона в качестве карбонильной компоненты и 1Н-пиразолы **2-3** с использованием в качестве таковой бензальдегидов. Метиленовыми компонентами служили малондинитрил или диэтиловый эфир малоновой кислоты. Трёхкомпонентные и постадийные реакции проводились в воде с добавлением каталитических количеств триэтиламина в условиях ультразвуковой активации.

Предполагаемый механизм реакции включает первоначальную конденсацию Кнёвенагеля карбонильной и метиленовой компоненты в присутствии основного катализатора триэтиламина с образованием интермедиата илиденмалонитрила, и последующие нуклеофильную атаку гидразида и гетероциклизацию с образованием пиразолинокарбонитрилов **1**. В случае 3-фенил-1Н-пиразолов промежуточные пиразолинокарбонитрилы окисляются кислородом воздуха до искомым пиразолокарбонитрилов **2-3**. Состав и строение продуктов подтверждены с помощью элементного анализа и спектральных методов.



Таким образом, трёхкомпонентные реакции гидразидов, производных малоновой кислоты и карбонильных соединений в условиях ультразвуковой активации являются удобным способом синтеза разнообразных замещённых спиропиразолинкарбонитрилов и 1-Н-пиразолов.

#### Литература

1. Ahmed M. M. El-Saghier (2004): A novel synthesis of spiro 1,3-dithiin and spiro 1,3-thiazine derivatives under phase transfer catalysis (ptc) conditions, Phosphorus, Sulfur, and Silicon and the Related Elements, 179:7, 1237-1250
2. Apse B. et al. Targeted polypharmacology: discovery of dual inhibitors of tyrosine and phosphoinositide kinases //Nature chemical biology. – 2008. – Т. 4. – №. 11. – С. 691.
3. Синтез новых потенциально биологически активных пиразолокарбонитрилов на основе гидразидов / Е. А. Константинова, А. А. Мещерякова, Д. В. Видлацкая, В. В. Сорокин // Проблемы и достижения химии кислород- и азотсодержащих биологически активных соединений: сборник тезисов VII Всероссийской молодежной конференции, Уфа, 23–24 ноября 2023 года. – Уфа: Уфимский университет науки и технологий, 2023.
4. Meshcheryakova A. A., Neumoina K. S., Sorokin V. V. Three-Component Synthesis of Spiropyrazolines Derived from Benzohydrazides //Russian Journal of Organic Chemistry. – 2023. – Т. 59. – №. 8. – С. 1309-1314. <https://doi.org/10.1134/S1070428023080031>

© Мещерякова А.А., Константинова Е.А., Видлацкая Д.В., Пятунин Б.Н., Сорокин В.В., 2024

УДК 547.853+544.165

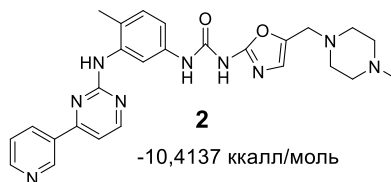
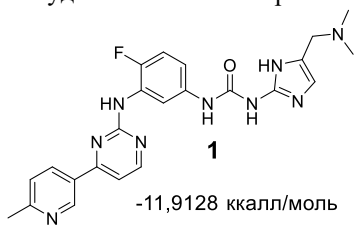
#### IN SILICO ДИЗАЙН НОВЫХ ИНГИБИТОРОВ ТИРОЗИНКИНАЗЫ BCR-ABL1 С МУТАЦИЕЙ T315I, СОДЕРЖАЩИХ СТРУКТУРНЫЙ ФРАГМЕНТ МОЧЕВИНЫ

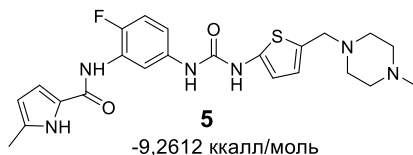
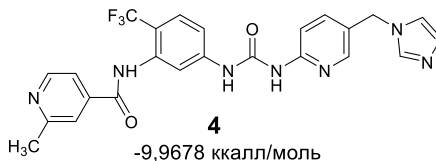
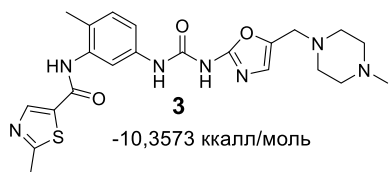
Мишкин Д.В., Мещерякова А.В., Ямашкин Д.И., Кострюков С.Г.  
*Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва, Саранск, Россия*

BCR-ABL – гибридный белок, продукт гибридного гена BCR-ABL1, формирующегося в результате реципрокной транслокации между хромосомами 9 и 22 (филадельфийская хромосома). BCR-ABL является конститутивно активной тирозинкиназой, ответственной за онкогенную

трансформацию клеток – ключевой патогенетический фактор развития подавляющего количества случаев хронического миелолейкоза. Заболевание поддается лечению ингибиторами тирозинкиназ, такими как иматиниб, нилотиниб, дазатиниб и др. Однако ввиду точечных мутаций в тирозинкиназе BCR-ABL у пациентов со временем развивается резистентность к данным препаратам. Наиболее частой является мутация T315I, которая приводит к потере ключевых водородных связей между белком и ингибитором. Поиск препаратов способных преодолеть мутацию T315I, остается актуальным в настоящее время.

В данной работе представлены разработанные на основе структур иматиниба, бозутиниба, дазатиниба, нилотиниба и ингибитора DCC-2036 [1] новые потенциальные ингибиторы тирозинкиназы BCR-ABL1 с мутацией T315I. Для генерации структур использовали метод BREED [2], реализованный в программном продукте Schrödinger, Maestro [3], в результате чего из пяти исходных структур было сгенерировано 187 молекул. Для докинга использовали трехмерную структуру мутантной ABL1-киназы заимствованной из комплекса с DCC-2036 (код 3QRJ, <http://www.rcsb.org/pdb/>) [1], а энергия связывания (Docking Score) с ингибитором DCC-2036 использовалась как реперная точка для отсеки малоэффективных молекул. В результате было отобрано 27 молекул, имеющих энергию связывания менее -9 ккал/моль. Проверка сгенерированных соединений протоколом SwissADME [3] позволила выделить пять соединений, потенциально способных всасываться через желудочно-кишечный тракт и выводящихся из ЦНС р-гликопротеином.





Ключевыми взаимодействиями, необходимыми для связывания соединений **1-5** с белковой мишенью являются водородные связи с Asp318 и Glu286, в образовании которых участвует фрагмент мочевины. В целом, соединения **1-5** показывают достаточно высокую аффинность к тирозинкиназе ABL1 с мутацией T315I, демонстрируют выполнение правил Lipinski, Ghose, Veber, Egan и Muegge, что делает перспективными соединениями для дальнейшего исследования.

#### Литература

1. Flynn D.L. et al. Conformational control inhibition of the BCR-ABL1 tyrosine kinase, including the gatekeeper T315I mutant, by the switch-control inhibitor DCC-2036 // *Cancer Cell*. 2011. V. 19. N 4. P. 556-568. Doi: 10.1016/j.ccr.2011.03.003.
2. Pierce A.C., Rao G., Bemis G.W. BREED: Generating Novel Inhibitors through Hybridization of Known Ligands. Application to CDK2, P38, and HIV Protease // *J. Med. Chem.* 2004. V. 47. N. 11. P. 2768-2775. Doi: 10.1021/jm030543u.
3. Maestro Version 12.9.123, MMshare Version 5.5.123, Release 2021-3, <https://www.schrodinger.com/products/maestro/>.
4. Daina A., Michielin O., Zoete V. SwissADME: a free web tool to evaluate pharmacokinetics, drug-likeness and medicinal chemistry friendliness of small molecules // *Sci. Rep.* 2017. V. 7. ID 42717. Doi: 10.1038/srep42717.

© Мишкин Д.В., Мещерякова А.В., Ямашкин Д.И., Кострюков С.Г., 2024

УДК 547.464.7

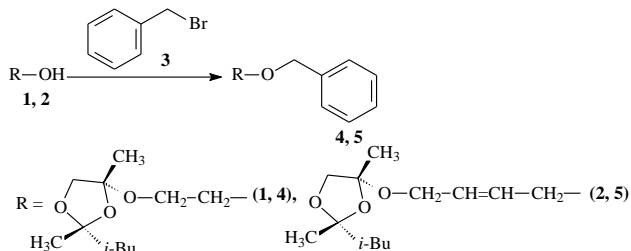
АЛКИЛИРОВАНИЕ БРОМИСТЫМ БЕНЗИЛОМ СПИРТОВ,  
СОДЕРЖАЩИХ 1,3-ДИОКСОЛАНОВЫЙ ФРАГМЕНТ

Мусин А.И., Джумаев Ш.Ш., Борисова Ю.Г., Раскильдина Г.З.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа,  
Россия*

4-Метилен-1,3-диоксоланы – высокореакционные циклические виниловые эфиры – легко могут быть получены дегидрохлорированием 4-хлорметил-1,3-диоксоланов [1] и использоваться как соединения-«платформы» для синтеза новых полифункциональных гетероциклов [2].

В настоящей работе нами было выполнено алкилирование алканолов **1**, **2** – продуктов присоединения диолов различного строения к 2-метил-2-изобутил-4-метил-1,3-диоксоланам бромистым бензилом **3** в условиях межфазного катализа.



Алкилирование спиртов **1**, **2** проводилось при температуре 80 °С, мольном соотношении спирт: бромистый бензил **3** = 1 : 5 и продолжительности реакции 3-5 ч., при этом выход эфиров **4**, **5** достигал 90-95 %.

Для установления закономерностей, связывающих строение спиртов **1**, **2**, с их относительной реакционной способностью в реакции алкилирования методом конкурентных реакций исследовано взаимодействие бромистого бензила **3** и алканов **1**, **2**. Согласно полученным результатам, при конверсии спиртов **1**, **2** не более 30 %, относительная реакционная способность алканол **1** в 1,5 раза превосходила активность соединения **2**.

*Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России в сфере научной деятельности, номер для публикаций FEUR — 2022-0007 «Нефтехимические реагенты, масла и материалы для теплоэнергетики».*

Литература

1. Соков С.А., Борисова Ю.Г., Раскильдина Г.З., Злотский С.С., Голованов А.А. Присоединение спиртов к 4-метил-1,3-диоксоланам // Журнал общей химии, 2023. – Т. 93. – № 10. – С. 1–6

2. Раскильдина Г.З., Борисова Ю.Г., Беляева Э.Р., Мусин А.И., Султанова Р.М., Злотский С.С. Синтез новых полифункциональных циклических кеталей на основе замещенных 4-метилена-1,3-диоксоланов // Доклады академии наук. 2023. – Т. 513. – № 12. – С.82-85.

© Мусин А.И., Джумаев Ш.Ш., Борисова Ю.Г., Раскильдина Г.З., 2024

УДК 547.814.5

РЕАКЦИИ ГИДРАЗИНИРОВАНИЯ 4-ГИДРОКСИ-3-(3-ОКСО-1-АРИЛ-3-(4-АМИНОФЕНИЛ)ПРОПИЛ)-2Н-ХРОМЕН-2-ОНОВ

Мухомодьярова Д.М., Вахрушина В.А., Ибрагимова Д.Н.

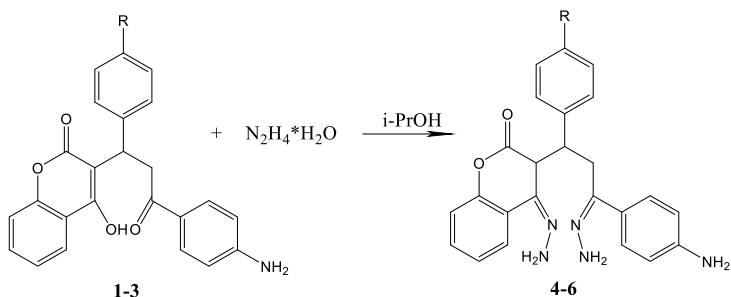
*ФГБОУ ВО Саратовский национальный исследовательский  
государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Институт химии,  
Саратов, Россия*

Одним из наиболее прогрессивных направлений органической химии является синтез новых биологически активных соединений, важным представителем которых является хромен-2-он (кумарин) и его производные. Структурное многообразие соединений на основе кумарина позволило создать ряд высокоэффективных и малотоксичных лекарственных препаратов, которые имеют спазмолитические, противоопухолевые свойства, а также обладают антивирусным, антикоагулянтным и антиоксидантным действием [1-4].

Среди производных 4-гидроксикумарина особое значение имеют высоко реакционноспособные 1,5-дикарбонильные соединения, которые могут служить предшественниками разнообразных азотсодержащих конденсированных гетеросистем, в свою очередь также обладающих широким спектром биологической активности.

Нами осуществлены реакции 4-гидрокси-3-(3-оксо-1-арил-3-(4-аминофенил)пропил)-2Н-хромен-2-онов (**1-3**) с гидразин гидратом при кипячении в изопропиловом спирте, в результате которых получены 3-(3-(4-аминофенил)-1-арил-3-гидразинилиденпропил)-4-гидразинилиденхромен-2-оны (**4-6**) с выходом 65, 74 и 52% соответственно – продукты нуклеофильной атаки сразу по обеим карбонильным группам 1,5-дикарбонильного фрагмента субстрата.





R = N(CH<sub>3</sub>)<sub>2</sub> (1, 4), Br (2, 5), Cl (3, 6)

Состав и строение полученных соединений **4-6** установлены на основании данных элементного анализа и ИК-спектроскопии.

Нами осуществлено прогнозирование биологической активности 3-(3-(4-аминофенил)-1-арил-3-гидразинилиденпропил)-4-гидразинилиденхроман-2-онов (**4-6**) с помощью программы PASS Online.

На основе расчета были выявлены общие возможные активности в виде спазмолитических, мочегонных свойств, а также полученные соединения, вероятно, могут выступать ингибиторами протонной помпы и использоваться в составе лекарств для лечения сердечной недостаточности.

Интересным результатом прогнозирования стала вероятность выстушения всех полученных веществ в роли ингибитора IRES HCV. IRES является частью вируса гепатита С, который встречается в разных генотипах организмов. Учёными уже давно поставлена цель поиска ингибитора IRES, благодаря которому выработка вируса снизится. Соответственно, выявление такой активности в соединениях делает их весьма важными для дальнейшего изучения и применения в производстве лекарственных препаратов.

#### Литература

1. Воеводина И. В. Новые реакции гетероциклизации β, β-трикарбонильных соединений в ряду производных кумарина: диссертация кандидата химических наук: 02.00.03 / И.В. Воеводина. – Москва, 2009. – 133 с.
2. Абышев А. З., Агаев Э. М., Абышев Р. А. Синтез, физико-химический анализ и фармакологическая активность некоторых производных варфарина. – Баку: Наука и образование, 2014. – 482 с.
3. Hirsh J., Dalen J. E. et al. Oral anticoagulants: mechanism of action, clinical effectiveness, and optimal therapeutic range / J. Hirsh, J. E. Dalen et al. // CHEST Journal 108. – 1995. – № 4. – P. 231S–246S.
4. Мажукина, О. А. Электрофильные и нуклеофильные реакции сложнопостроенных полиоксосоединений 2*H*-хромен-2-онового ряда: автореф. дис. ... канд. хим. наук / О. А. Мажукина. – Саратов, 2011. – 23 с.

© Мухомодьярова Д.М., Вахрушина В.А., Ибрагимова Д.Н., 2024

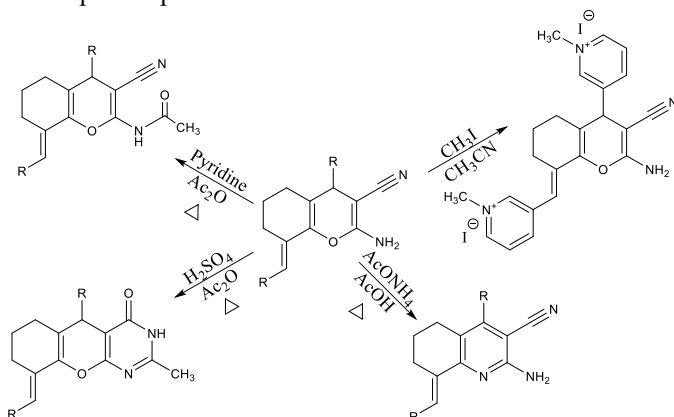
РЕАКЦИИ 2-АМИНОХРОМЕН-3-КАРБОНИТРИЛОВ С УЧАСТИЕМ  
РАЗЛИЧНЫХ РЕАКЦИОННЫХ ЦЕНТРОВ

Никулин А.В., Смолькина А.А., Кривенько А.П.

*Саратовский национальный исследовательский государственный  
университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия*

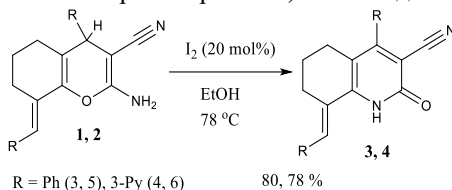
К настоящему времени химия 2-аминохромен-3-карбонитрилов широко представлена в многочисленных публикациях, в том числе и обзорного характера.

В данном сообщении обобщены полученные нами ранее и новые данные по модификации 2-аминохромен-3-карбонитрилов (ацилирование, гетероаннелирование, рециклизация, кватернизация) [1,2]. Так, при ацелировании уксусным в условиях основного катализа (пиридин) происходит избирательное ацилирование аминогруппы с образованием N-ацетильного производного, а при использовании  $(\text{CH}_3\text{CO})_2\text{O}$  и  $\text{H}_2\text{SO}_4$  происходит аннелирование пиридидинового цикла с участием вицинальных амино- и цианогрупп. Реакция пиридилзамещенных аминохроменкарбонитрилов привела к образованию водорастворимых форм – продуктов избирательной кватернизации с участием атома азота пиридинового цикла при сохранении первичной аминогруппы хроменового фрагмента. Рециклизация хроменкарбонитрилов проводилась при кипячении в уксусной кислоте с избытком ацетата аммония. При этом получены аминокинолинкарбонитрилы – функциональные аналоги аминохроменкарбонитрилов.

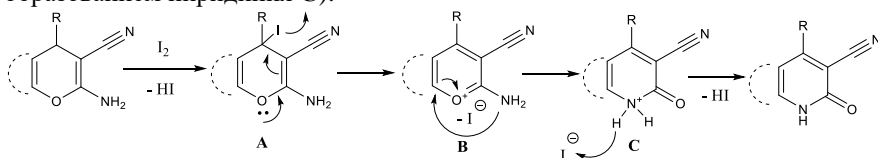


Новые данные нами получены по рециклизации 2-аминохромен-3-карбонитрилов (на примере Ph, 3-Ry-содержащих представителей).

Кипячение хроменов **1, 2** в этаноле в присутствии 20 мол.% иода привело к образованию оксохроменкарбонитрилов **3, 4** с выходами 78, 80%..



Согласно литературной аналогии [3], реакция протекает как SE замещение по бензильному положению хромена с последующей реорганизацией интермедиата **A** в соль пирилия **B** с отщеплением иодид-аниона, внутримолекулярную нуклеофильную перегруппировку (с образованием пиридиния **C**).



Состав и строение полученных веществ установлено с использованием элементного анализа, ИК-, одномерной ( $^1\text{H}$ ) и двумерной (HSQC, HMBC) ЯМР спектроскопии.

Исследование биологической активности в лабораториях ИБФРМ РАН выявило высокую антибактериальную активность соединения **4** по отношению к *Staphylococcus aureus* (12,5 мкг/мл), приближенную к препарату сравнения – фурацилину (5 мкг/мл).

Таким образом, нами проведены реакции 2-аминохромен-3-карбонитрилов с участием аминогруппы, amino- и цианогрупп, хроменового фрагмента и пиридинового заместителя, найдены условия превращений.

#### Литература

1. Никулин А.В., Кулиева В.Р., Чернышова К.А., Кривенько А.П. Синтез потенциально биологически активных 2-аминогидрохромен-3-карбонитрилов и их иодметилатов // Сб/ тезисов VII Всероссийской молодежной конференции «Проблемы и достижения химии кислород- и азотсодержащих биологически активных соединений». Уфа. 23-24 ноября 2023 г. С. 64-66
2. Nikulin A.V., Meshcheryakova A.A., Sklyar A.E., Vasilkova N.O., Sorokin V.V., Krivenko A. P. Fusion of Pyrimidine and Pyridine Rings to Substituted 4H-Chromenes // Rus. J. Org. Chem. 2021. V. 57. No. 10. P. 1650-1655.
3. Buduma K., Chinde S., Arigari N.K., Grover P., Srinivas K.V.N.S., J.K. Kumar. Iodine Catalyzed simple and efficient synthesis of antiproliferative 2-pyridones. // Bioorg. Med. Chem. Lett. - 2016. - V. 26. No. 9. - P. 2159-2163

© Никулин А.В., Смолькина А.А., Кривенько А.П., 2024

УДК 631.417.8

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРОЙНЫХ  
КОМПЛЕКСОВ ЭССЕНЦИАЛЬНОГО МИКРОЭЛЕМЕНТА ЖЕЛЕЗА С  
ВИТАМИНОМ С И НЕЗАМЕНИМЫМИ АМИНОКИСЛОТАМИ

Блинов А.В., Гвозденко А.А., Голик А.Б., Облогин Я.А., Вакуленко М.В.,  
Аскерова А.С.

*ФГАОУ ВО Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь,  
Россия*

Дефицит железа является важной проблемой нашего времени. Недостаток железа наблюдается у 39,9 % населения России [1]. Железо является эссенциальным микроэлементом, который участвует в переносе кислорода эритроцитами и входит в состав некоторых белков и ферментов. Суточная норма для взрослого мужчины в среднем составляет 8 мг, для взрослой женщины – 18 мг. Недостаток железа в организме может приводить к железодефицитной анемии, характеризующейся нарушением работы некоторых органов и систем [2]. Основной причиной недостатка железа является неправильное или несбалансированное питание, а также плохая усвояемость железа из пищи. Проблему усвояемости железа помогают решать хелатные комплексы, содержащие микроэлемент, в частности тройные комплексы железа с аскорбиновой кислотой и незаменимыми аминокислотами. Данные комплексы являются наиболее эффективными хелатными формами железа с аскорбиновой кислотой, значительно повышающей биоусвояемость элемента. Тройные комплексы железа с аскорбиновой кислотой и незаменимыми аминокислотами так же улучшают белковый, витаминный и минеральный обмена [3]. Целью данной работы является проведение квантово-химического моделирования комплексов и его анализ.

Компьютерное квантово-химическое моделирование взаимодействия эссенциального микроэлемента железа с аскорбиновой кислотой и незаменимыми аминокислотами проводилось в программе IQmol. Расчёт выполнялся на оборудовании Центра Обработки Данных (Schneider Electric) Северо-Кавказского федерального университета.

В рамках моделирования рассматривали модели, в которых формирование тройного хелатного комплекса проходило через amino- и карбоксильную группы или через amino- и гидроксильную группы незаменимых аминокислот и гидроксильные группы, присоединенные к C2 или C3 или C5 или C6 атомам углерода аскорбиновой кислоты.

Анализ результатов квантово-химического моделирования показал, что рассмотренные модели молекулярных комплексов являются энергетически выгодными и химически стабильными ( $0.058 < \eta < 0.113$  эВ). Установлено, что взаимодействие между незаменимыми аминокислотами и витамином С (аскорбиновая кислота) происходит через amino- и карбоксильную группы незаменимых аминокислот и гидроксильные группы, присоединенные к C2 и C3 атомам углерода аскорбиновой кислоты, что связано с тем, что для данной конфигурации наблюдается минимальное значения полной энергии системы по сравнению с другими конфигурациями.

На рисунке 1 представлены результаты моделирования оптимального молекулярного комплекса аскорбатолейцината железа.

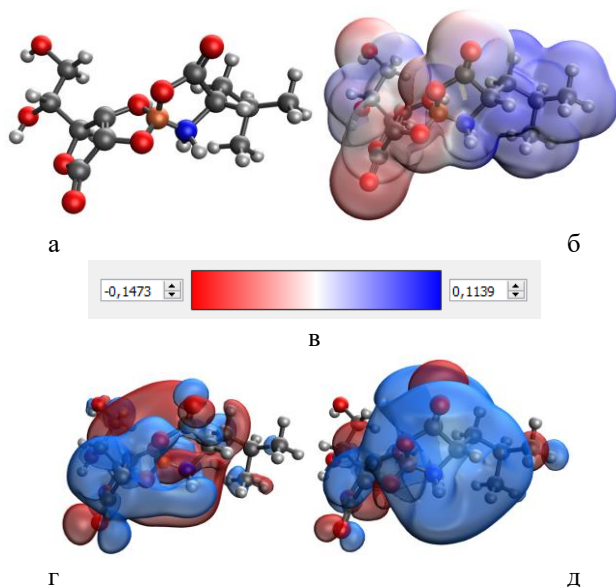


Рис. 1. Результаты моделирования аскорбатолейцината железа через amino- и карбоксильную группы L-лейцина и гидроксильные группы, присоединенные к C<sub>2</sub> и C<sub>3</sub> атомам углерода аскорбиновой кислоты: модель молекулярного комплекса (а), распределение электронной плотности (б), градиент распределения электронной плотности (в), HOMO (г), LUMO(д)

Из полученных результатов следует, что рассмотренные модели молекулярных комплексов являются энергетически выгодными и химически стабильными, что позволяет использовать их для дальнейших исследований.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-76-00029, <https://rscf.ru/project/22-76-00029/>.*

## Литература

1. Стуклов Н. И., Митченкова А. А. Анемия и дефицит железа. Глобальные проблемы и алгоритмы решений //Терапия. – 2018. – №. 6. – С. 147-156.
2. Елисеева Т. Железо (Fe) для организма–30 лучших источников и значение для здоровья //Журнал здорового питания и диетологии. – 2021. – Т. 4. – №. 18. – С. 66-75.
3. Blinov A. et al. Synthesis and stability study of iron (II) ascorbatolizinate //AIP Conference Proceedings. – AIP Publishing, 2023. – Т. 2931. – №. 1.

© Блинов А.В., Гвозденко А.А., Голик А.Б., Облогин Я.А., Вакуленко М.В.,  
Аскерова А.С., 2024

УДК 547.3

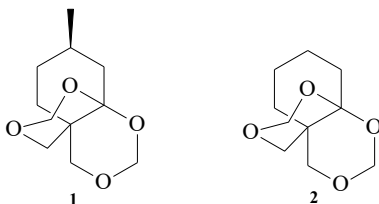
### ОСОБЕННОСТИ СПЕКТРОВ ЯМР $^1\text{H}$ И $^{13}\text{C}$ ТЕТРАГИДРО-8А,4А- (ЭПОКСИМЕТАНООКСИМЕТАНО)БЕНЗО[1.3]ДИОКСАНА

Охиров<sup>1</sup> Ш.М., Исхакова<sup>1</sup> А.И., Лобов<sup>2</sup> А.Н., Латыпова<sup>1</sup> Э.Р., Талипов<sup>1</sup> Р.Ф.

<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологии, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский институт химии Российской академии наук, Уфа, Россия

Ранее [1] в ходе целенаправленного синтеза потенциально фармакологически активных соединений был выделен 7-метилтетрагидро-8а,4а-(эпоксиметанометоксиметано)бензо[1.3]диоксан (1). Строение соединения было подтверждено данными ИК, ЯМР  $^1\text{H}$ , ЯМР  $^{13}\text{C}$  спектроскопии, масс-спектрометрии и однозначно доказано методом рентгеноструктурного анализа. Однако в ходе синтеза соединения (2) с использованием в качестве исходного циклогексанона было получено индивидуальное вещество, в спектрах ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  (рис. 1) которого наблюдались уширенные сигналы метиленовых групп 1,3-диоксолановых фрагментов. Подобная картина, вероятно, связана с конформационной подвижностью соединения за счет инверсии 1,3-диоксоланового кольца. Использование различных по полярности дейтерированных растворителей (бензол, хлороформ, диметилсульфоксид) не привело к существенному изменению картины спектра.



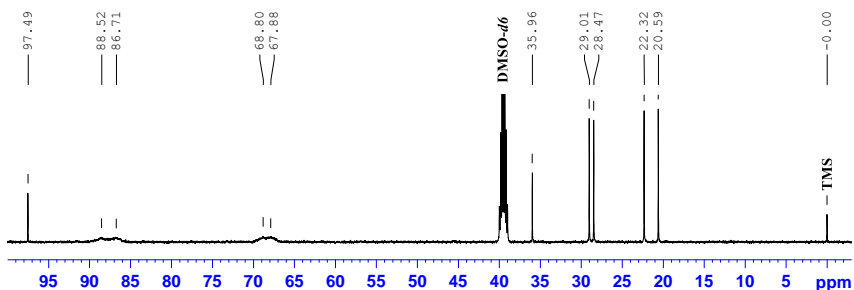


Рис. 1. Спектр ЯМР  $^{13}\text{C}$  (125 МГц) соединения **2** в растворе DMSO-*d*<sub>6</sub>.

Известно, что повышение температуры проведения ЯМР-анализа может привести к усреднению сигналов ЯМР. На самом деле, использование дейтерированного диметилсульфоксида в качестве растворителя при снятии ЯМР-спектров и повышение температуры проведения анализа до 90 °С (рис. 2) позволили получить картину ЯМР спектров, при которых удалось расшифровать структуру соединения. Оно было идентифицировано как -тетрагидро-8а,4а-(эпоксиметанометоксиметано)бензо[1,3]диоксан (**2**)

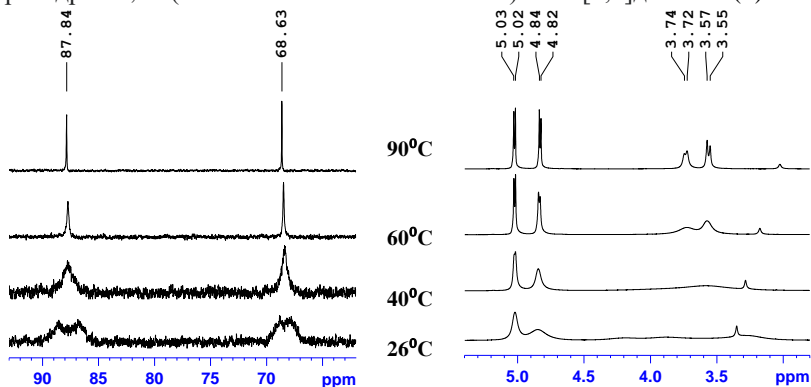


Рис. 2. Температурная зависимость сигналов метиленовых групп 1,3-диоксолановых фрагментов соединения **2** в спектрах ЯМР  $^1\text{H}$  (500 МГц) и  $^{13}\text{C}$  (125 МГц) в растворе DMSO-*d*<sub>6</sub>.

#### Литература.

1. Н.В. Громько, И.Ш. Якупов, Л.З. Халитова, Н.В. Яикбаева, Р.Ф. Калимкин, Э.Р. Латыпова, Р.Ф. Талипов. Трансформации монотерпеноида (R)-(+)-пулегон в направлении азотсодержащих производных// Материалы VI Всероссийской молодежной конференции «Достижения молодых ученых: химические науки». – Уфа. – 2020. – с.61.

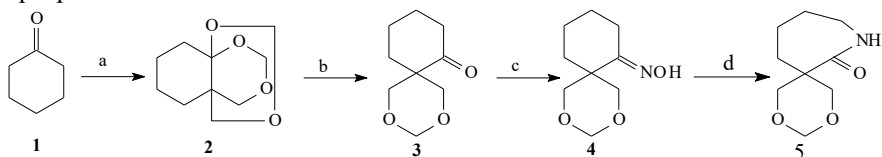
© Охиров Ш.М., Исакова А.И., Лобов А.Н., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф., 2024

ТРАНСФОРМАЦИИ ЦИКЛОГЕКСАНОНА В НАПРАВЛЕНИИ  
АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ

Охиров Ш.М., Исхакова А.И., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф.

*ФГБОУ ВО Уфимский университет науки и технологии, Уфа, Россия*

С целью синтеза фармакологически активного азотсодержащего соединения на основе промышленно доступного циклогексанона (1) вовлечением последнего в реакцию Принса был получен триоксалан (2). Структура соединения (2) доказана с использованием спектров ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$  и РСА. Дальнейшие трансформации триоксалана (2) обработкой 10% раствором  $\text{HCl}$  позволили получить спиросоединение (3), воздействием на который  $\text{NH}_2\text{OH} \cdot \text{HCl}$  в  $\text{P}_2\text{O}_5$  синтезировали оксим (4). Последующее его использование в бекманской перегруппировки с  $\text{P}_2\text{O}_5$  позволило получить 2,4-диоксо-8-азаспиро[5.6]додекан -7-он (5). Соединения (2 - 4), согласно программе Pass Online, могут проявлять различные виды биологической активности (таб. 1) при их низкой токсичности, рассчитанной на основе программы Gusar Online.



Условия проведения реакции: а)  $\text{HCHO}$ ,  $\text{TiCl}_4$ ,  $\text{CHCl}_3$ ,  $50^\circ\text{C}$ ; б) 10 %  $\text{HCl}$  [1];  
с)  $\text{NH}_2\text{OH} \cdot \text{HCl}$ ; д)  $\text{P}_2\text{O}_5$ .

Таблица 1

Фармакологическая активность соединений (2-4)

Соединение	Спектр биологической активности	$\text{Pa}$
2	Противоопухолевое	0,935
3	Лечение фобических расстройств	0,836
4	Противоишемическое, церебральное	0,883

$\text{Pa}$  – вероятность наличие у соединения активности на основании его структуры.

Литература

1. F. Hirano, Sh. Wakabayshi. The Acid catalyzed Reaction of Alicyclic Ketones with Formaldehyde. III. The Reactiob of 3- and 3,5-Methyl-sybtituted Cyclohexanones with Formaldehyde // Bulletin of the Chemical Society of Japan. – 1979. – v.52. - № 3. – p. 779 – 783.

© Охиров Ш.М., Исхакова А.И., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф., 2024



ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ  
МОЛЕКУЛАМИ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛАПоложенцева<sup>1</sup> Е.А., Лебедев<sup>2</sup> Ю.А., Кинзябулатов<sup>2</sup> Р.Р.<sup>1</sup> Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия<sup>2</sup> Институт физики молекул и кристаллов УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Введение магнитные наночастицы (МНЧ) в жидкие кристаллы (ЖК) вызывает большой интерес для фундаментальных исследований и технологических применений. Вносимые МНЧ могут эффективно изменять электрооптические и магнитооптические свойства ЖК, однако введение частиц в ЖК-матрицы сложная задача. Стабильность дисперсий МНЧ обычно невысока из-за образования агрегатов. Покрытие МНЧ специальными (про)мезогенными лигандами – один из перспективных способ решения этой проблемы.

В настоящей работе произведено покрытие МНЧ методом алкилирования по Фриделю-Крафтсу [1]. Конечный продукт получали по реакции Фриделя-Крафтса олеиновой кислоты на поверхности магнитных частиц с 4-гидрокси-4-бифенилкарбонитрилом в присутствии безводного  $AlBr_3$  в колбе, в которой их молярное соотношение приблизительно 1:5:1. Смесь нагревали до  $65^\circ C$  и выдерживали в течение 6 ч при перемешивании. Промывали ацетоном, отделяли магнитным полем и сушили.

ИК-спектр полученных магнитных частиц показал малоинтенсивный пик в районе  $2250\text{ см}^{-1}$ , принадлежащий нитрильной группе. Это показывает возможность использования данного метода для покрытия МНЧ специальными (про)мезогенными лигандами. Следующая задача - оптимизировать условия и повысить выход реакции.

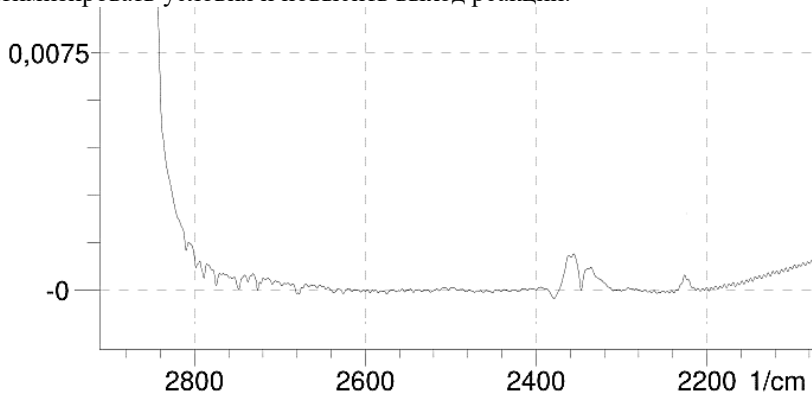


Рис. 1. ИК-спектр полученных магнитных частиц

## Литература

1. Peng-Cheng Bian, Wen-Jie Xu, Hong-Ze Gang, Jin-Feng Liu, Bo-Zhong Mu, Shi-Zhong Yang Insight into the shift and rearrangement of carbocation in Friedel-Crafts alkylation of unsaturated fatty acids revealed by GC-MS // International Journal of Mass Spectrometry – 2017. – V.415, P. 85-91.

© Положенцева Е.А., Лебедев Ю.А., Кинзябулатов Р.Р., 2024

УДК 54.544.165

### ПРОТИВОРАКОВЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ФУНКЦИОНАЛЬНО ЗАМЕЩЕННЫХ ГИДРОХИНАЗОЛИНОВ

Пузанов Д.А., Кривенько А.П.

*ФГБОУ ВО Саратовский национальный исследовательский  
государственный университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов,  
Россия*

За последние два десятилетия FDA одобрило более 20 противораковых препаратов с хиназолиновым или хиназолиноновым ядром [1], некоторые из которых действуют как ингибиторы тирозинкиназ (TKs) [1,2]. Среди трансмембранных TKs отмечают рецептор эпидермального фактора роста (EGFR), регулирующий пролиферацию и дифференцировку клеток у млекопитающих [1,2], сверхэкспрессия и мутационная активность которого связана с развитием группы немелкоклеточных раков легких. Развитие мутации *S797S* в EGFR, обеспечивает резистентность ко всем протестированным препаратам, при сохранении чувствительности к ингибиторам на основе хиназолина - афатинибу и gefитинибу [3].

С целью разработки новых ингибиторов EGFR, были получены, крайне малоизученные [4,5], октагидрохиназолин-2-илиденцианамиды, содержащие более липофильное, гидрированное хиназолиновое ядро, что может сказаться на возможности проникновения через гематоэнцефалический барьер, а также обеспечить более прочное взаимодействие в гидрофобном кармане в АТФ-связывающей щели EGFR.

В процедуру Induced Fit Docking (IFD) были введены как октагидрохиназолин-2-илиденцианамиды 1-9, так и продукты их окислительной трансформации 10-12 (рис.1).

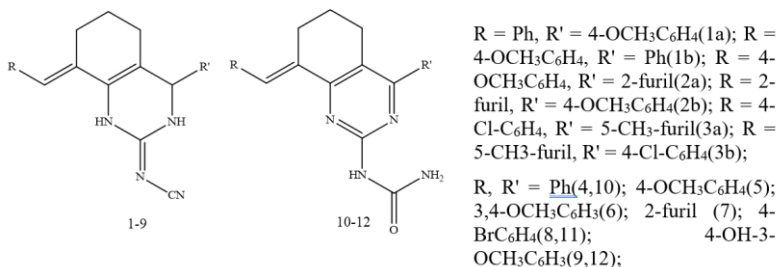


Рис. 1. Структуры октагидрохиназолин-2-илиденцианамидов 1-9 и тетрагидрохиназолин-2-илмочевин 10-12

В табл.1 представлены результаты докинга для наиболее прочных комплексов рецептор-лиганд, характеризующихся минимальным значением свободной энергии связывания Docking Score.

В качестве мишени из Protein Data Bank был взят белок EGFR L858R/T790M/C797S (PDB ID: 6LUB) [6], а его сокристаллическая структура с CH7233163 использовалась в качестве модели сравнения.

Таблица 1  
Свободная энергия связывания (DockingScore) для лучших поз Induced Fit Docking (Glide/Schrodinger-suite 2022)

Протеиновая мишень	Лиганд	DockingScore (kcal/mol)
EGFR <sub>L858R/T790M/C797S</sub>	CH7233163	-10,82
	Соед. 7	-9,85
	Соед. 12	-10,71

Молекулярная графика, отражающая режим связывания наиболее перспективной ((E)-8-(4-гидрокси-3-метоксибензилиден)-4-(4-гидрокси-3-метоксифенил)-5,6,7,8-тетрагидрохиназолин-2-ил)мочевины (12) и точность сгенерированной модели представлена на рис.2 А,Б.

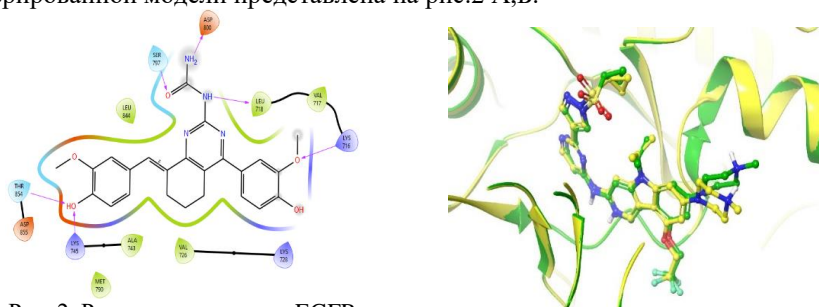


Рис. 2. Режимы связывания EGFR L858R/T790M/C797S (PDB ID: 6LUB) с соединением 12 (А) и CH7233163 (Б). Цветовые обозначения: сокристаллическая структура белка и нативного лиганда. (желтый); сгенерированная IFD модель (зелёный).

Наличие липофильного конденсированного циклогексенового кольца в составе полученных хиназолинов, способствует их “гидрофобному зажиму” в гидрофобном АТФ-связывающем кармане, формируемом между боковыми цепями Leu718, Leu844 и Val726 [7], а замена цианамидной группы на 2-аминокарбамоильную приводит к увеличению аффинности лиганда с рецептором.

По итогу экспериментов *in silico* ((E)-8-(R)-4-(R)-5,6,7,8-тетрагидрохиназолин-2-ил)мочевины обладают высоким потенциалом против немелкоклеточного рака легких. В частности, соединение 12 может быть сопоставимо по эффективности с препаратом SH7233163, мощно ингибирующим пролиферацию раковых клеток NIH3T3, экспрессирующих EGFR<sub>L858R/T790M/C797S</sub> (IC<sub>50</sub> 20 нмоль/л) [6].

#### Литература

1. Kashif Haider, Subham Das, Alex Joseph, et al. // Drug Dev. Res., 2022, 83(4), P. 859-890.
2. Heba T. Abdel-Mohsen, Manal M. Anwar, et al. // Molecules 2024, 29(4), 875
3. Ercan, D., Choi H. G., Yun C.-H., et al. // Clin. Cancer Res., 2015, 21(17), P. 3913–3923.
4. Puzanov D. A., Sklyar A. E., Konenkova M. V., et al.. // Izvestiya of Saratov University. Chemistry. Biology. Ecology, 2023, 23(3), P. 299–307.
5. Amr H. Moustafa and Bahgat R. M. Hussein. // Synthetic Communications, 2022, 52(8) P.1-8.

© Пузанов Д.А., Кривенько А.П., 2024

УДК 544.43:544.47

## СРАВНЕНИЕ ЭНЕРГИЙ СТАБИЛИЗАЦИИ ПЕРЕХОДНЫХ СОСТОЯНИЙ РЕАКЦИИ ПРИНСА В ПОЛОСТЯХ ЦЕОЛИТОВ РАЗНОГО ДИАМЕТРА

Рахманов Д.А., Вакулин И.В.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Нами рассмотрено улучшение расчётного метода в теоретическом алгоритме прогнозирования селективности пористых катализаторов, который сформулирован на базе концепции «селективности по форме переходного состояния». На примере взаимодействия димера формальдегида с этиленом и пропиленом по реакции Принса показано, что предложенный алгоритм успешно воспроизводится при замене методов молекулярной механики (ММ) на полужемпирические с учётом дисперсионной коррекции D3H4 [1]. Особенностью ММ методов является их малая чувствительность к размерам переходного состояния (TS), размещаемого в полости цеолита. Вследствие чего, диаметр пор, при котором наблюдается максимум стабилизации TS в полости, совпадает для однотипных TS, обладающих заметной разницей в геометрических

размерах. Поэтому в данном исследовании нами рассмотрена чувствительность к размерам TS полуэмпирических методов, применяемых в вышеуказанном алгоритме. Для этого был взят ряд TS, соответствующих образованию 1,3-диоксанов из алкенов (этилен, пропилен, бутен-1, *транс*-бутен-2 и изобутилен) и димера формальдегида по реакции Принса. При этом максимальная найденная разность геометрических размеров TS (этилен vs бутен-1) составляет до 2.24, 0.62 и 0.56 Å по осям X, Y, Z соответственно. Были взяты следующие цеолиты: ANA, NAT, TON, MTW, LOS, EUO, MEL, MEI и KFI. Результаты для полуэмпирического метода PM6-D3H4 (в программе MORAC v22.0.6) и MP2-оптимизированных TS показаны на Рис. 1.

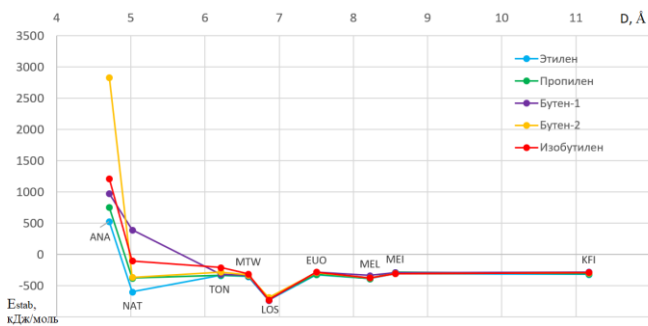


Рис. 1. Энергии стабилизации TS (кДж/моль) в зависимости от диаметра полости цеолита (Å)

Результаты показывают, что существенные отличия в энергиях стабилизации наблюдаются только для цеолитов самого малого диаметра (ANA и NAT), причём ANA дестабилизирует все TS. Оптимальный цеолит во всех случаях LOS – такой же результат был получен в предыдущих исследованиях с использованием метода молекулярной механики [2]. Таким образом, при использовании в данном алгоритме метод PM6-D3H4 обладает слабой чувствительностью к изменению геометрических размеров TS в диапазоне  $\pm 1$  Å.

#### Литература

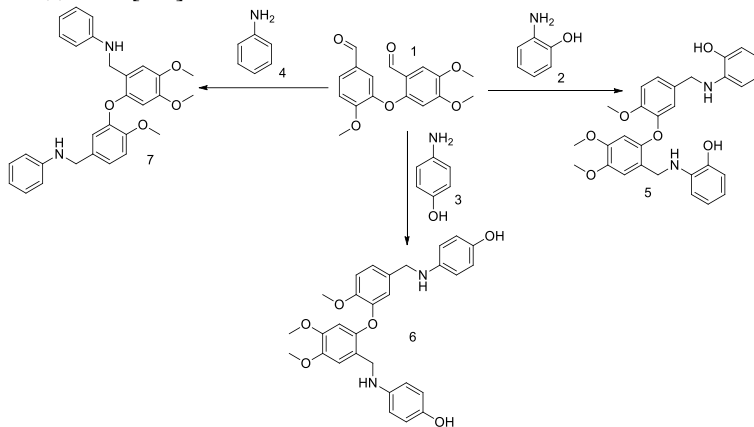
1. Vakulin, I.V. Improvement of Theoretical Algorithm for Prediction of Carbon Nanotubes Catalytic Activity, Based on Quantum Chemical Semi-Empirical Approaches / I.V. Vakulin, D. Rakhmanov, R.F. Talipov, G.R. Talipova // Catalysis Letters. – 2023. <https://doi.org/10.1007/s10562-023-04465-1>
2. Vakulin, I.V. Influence of the pore diameter in zeolites on the activation energy of formation of 4-alkyl-1,3-dioxanes in the Prins reaction / I.V. Vakulin, P.A. Pasko, R.F. Talipov, G.R. Talipova, O.Yu. Kupova // Kinetics and Catalysis. – 2019. – V. 60. – №. 3. – P. 320–324.

© Рахманов Д.А., Вакулин И.В., 2024

## СИНТЕЗ БИСАМИНОВ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ АНИЛИНА

Ремезова<sup>1</sup> Г.В., Петрова<sup>2</sup> А.О., Сахаутдинов<sup>1</sup> И.М.<sup>1</sup>Уфимский Институт химии – обособленное структурное подразделение ФГБНУ «Уфимского федерального исследовательского центра РАН», Уфа, Россия<sup>2</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

На сегодняшний день гидроксопроизводные анилина представляют собой важные органические соединения. 4-Аминофол служит ключевым сырьем в фармацевтической химии для изготовления лекарственного препарата парацетамол, который является эффективным анальгетиком-антипиретиком и широко применяется в медицине. 2-Аминфенол используется как промежуточный продукт в синтезе красителей и пигментов, а также является исходным материалом для производства антиоксидантов [1-3].



Нами был осуществлен синтез 2-((2-(5-(((2-гидроксифенил)амино)метил)-2-метоксифенокси)-4,5-диметоксибензил)амино)фенола (5), 4-((2-(5-(((4-гидроксифенил)амино)метил)-2-метоксифенокси)-4,5-диметоксибензил)амино) фенола (6), N-(3-(4,5-диметокси-2-((фениламино)метил)фенокси)-4-метокси бензил)анилина (7) на основе диарилового эфира Эрнандиаль (1) и анилина (4), а также его производных орто- (2) и пара-аминофенола (3). Реакцию проводили в среде толуола с использованием насадки Дина-Старка, образовавшиеся соединения восстанавливали  $\text{NaBH}_4$  в среде метанола. Структура установлена на основании данных ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$ .

Таким образом, разработан простой и эффективный метод получения бисаминов на основе производных анилина.

*Работа выполнена при поддержке госзадания №122031400278-2 с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Химия» Уфимского института химии УФИЦ РАН.*

#### Литература

1. Du, Y.; Chen, H.; Chen, R.; Xu, N. Synthesis of p-aminophenol from p-nitrophenol over nano-sized nickel catalysts. *Appl. Catal., A* 2004, 277, 259–264.
2. Fu, L.; Zhou, W.; Wen, M.; Wu, Q.; Li, W.; Wu, D.; Zhu, Q.; Ran, J.; Ren, P. Layered CuNi-Cu<sub>2</sub>O/NiAlO<sub>x</sub> nanocatalyst for rapid conversion of p-nitrophenol to p-aminophenol. *Nano Res.* 2021, 14, 4616–4624.
3. Yu, Y.; Jung, E.; Kim, H. J.; Cho, A.; Kim, J.; Yu, T.; Lee, J. Protein Particles Decorated with Pd Nanoparticles for the Catalytic Reduction of p-Nitrophenol to p-Aminophenol. *ACS Appl. Nano Mater.* 2020, 3, 10487–10496.

© Ремезова Г.В., Петрова А.О., Сахаутдинов И.М., 2024

УДК 547.31:542.913:577.181

### СИНТЕЗ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ АНАЛОГОВ МЕТИЛОВОГО ЭФИРА ФУЗИДОВОЙ КИСЛОТЫ

Салимова<sup>1</sup> Е.В., Головнина<sup>2</sup> Д.А., Куковинец<sup>2</sup> О.С., Парфенова<sup>1</sup> Л.В.

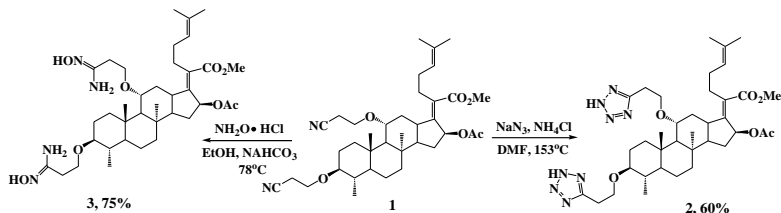
<sup>1</sup> *Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

<sup>2</sup> *Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Проведение направленных синтетических трансформаций природных соединений с целью усиления нативной биологической активности, ослабления нежелательных побочных эффектов и появления новых фармакологических свойств является одной из важнейших задач органического синтеза и медицинской химии. Тритерпеноиды фузиданового ряда – группа природных соединений, продуцируемых грибами, представители которой обладают антибиотическими свойствами по отношению к стафилококкам [1]. Одним из успешных направлений синтетических модификаций природных соединений является введение разнообразных гетероциклических фрагментов в состав молекулы, например, азолов, так как данный вид гетероциклов входит в состав многих биологически активных молекул, в том числе многочисленных лекарственных препаратов [2]. В связи с этим, представляет интерес синтез гетероциклических аналогов фузидановых тритерпеноидов, перспективных в качестве новых антибактериальных средств. В качестве исходного соединения было использовано нитрильное производное метилового эфира ФК **1**, полученное нами ранее по реакции цианэтилирования метилфузидата [3]. Соединение **1** вовлекали в реакцию гетероциклизации с азидом натрия в

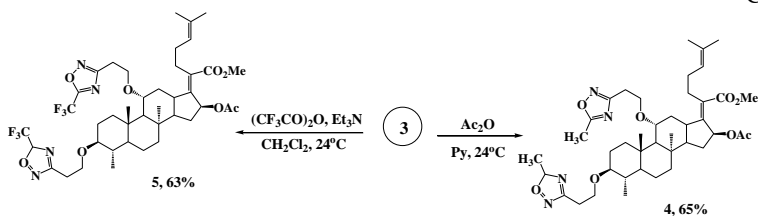
присутствии хлорида аммония в среде ДМФА при нагревании в течение 12 часов. Реакция сопровождалась гидролизом ацетатной группы при С16 до гидроксильной функции и последующей дегидратацией с образованием двойной связи Δ15(16). После очистки реакционной массы было выделено бис-тетразольное производное метилфузидата **2** с выходом 60% (схема 1).

Схема 1



Для дальнейшего синтеза оксадиазолов цианэтильные группы соединения **1** были трансформированы в амидоксимные действием солянокислого гидроксиламина в присутствии гидрокарбоната натрия в среде этилового спирта при кипячении. В результате реакции был выделен бисамидоксим метилфузидата **3** с выходом 75% (схема 1). Соединение **3** вовлекали в реакцию гетероциклизации с уксусным ангидридом в среде пиридина или трифторуксусным ангидридом в среде хлористого метилена в присутствии триэтиламина в качестве основания. Реакционную массу перемешивали при комнатной температуре в течение 12 часов и выделяли 1,2,4-оксадиазол **4** или 1,2,4-трифтороксадиазол **5** с выходами 65 и 63%, соответственно (схема 2).

Схема 2



Структуры полученных соединений были подтверждены комплексом спектральных исследований, включая данные одномерной и двумерной спектроскопии ЯМР и масс-спектрометрии.

Таким образом, на основе цианэтильного производного метилового эфира фузидовой кислоты нами осуществлен синтез новых азотсодержащих производных фузидановых тритерпеноидов, а именно – бисамидоксима, бистетразола и замещенных 1,2,4-оксадиазолов, которые представляют интерес в качестве потенциальных противомикробных агентов.

*Работа выполнена в рамках государственного задания № FMRS-2022-0081.*



## Литература

1. Zhao M., Gödecke T., Gunn J., Duan J.A., Che C.T. *Molecules*. 2013, *18*, 4054–4080.
2. Facchinetti V., Gomes C.R.B., de Souza M.V.N. *Tetrahedron*. 2021, *102*, 132544–132567.
3. Салимова Е.В., Мамаев А.Г., Третьякова Е.В., Куковинец О.С., Мавзютов А.Р., Швец К.Ю., Парфенова Л.В. *ЖОРХ*. 2018, *54*, 1395–1402.  
© Салимова Е.В., Головнина Д.А., Куковинец О.С., Парфенова Л.В., 2024

УДК 547.721/.729

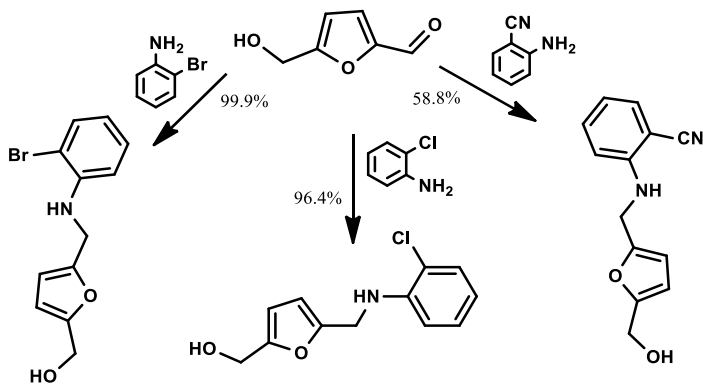
### СИНТЕЗ 5-(ГИДРОКСИМЕТИЛ)-2-ФУРФУРИЛАМИНОВ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ АНИЛИНА

Сахаутдинова <sup>1</sup>Г.Ф., Сабирова <sup>2</sup>А.Э., Сахаутдинов <sup>1</sup>И.М., Мустафин <sup>1,2</sup>А.Г.

<sup>1</sup>Уфимский Институт химии – обособленное структурное подразделение ФГБНУ «Уфимского федерального исследовательского центра РАН», Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

N-замещенные 5-(гидроксиметил)-2-фурфуриламины являются важными органическими соединениями [1], которые обладают известными фармацевтическими активностями [2]. Поэтому разработка эффективных схем синтеза новых N-замещенных фурфуриламинов является актуальной задачей. В качестве исходных соединений использовали: 2-броманилин, 2-аминобензонитрил, 2-хлоранилин. Реакцию проводили путем кипячения насадкой Дина-Старка в среде бензола, с последующим восстановлением борогидридом натрия, что привело к продуктам аминирования 5-гидроксиметилфурфура. Структура установлена на основании данных ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C.



Таким образом, разработан простой и эффективный метод аминирования 5-гидроксиметилфурфура. Данный подход является перспективным в

получении новых фурфуроламинов для биохимии и фармацевтической отрасли.

*Работа выполнена при поддержке госзадания №122031400278-2 с использованием оборудования Центра коллективного пользования «Химия» Уфимского института химии УФИЦ РАН.*

#### Литература

1. G. C. Vishwas, N. Kishore, M. Asma, S. A. Ahmad, K. Carsten, V. J. Rajenahally, Chem. Cat. Chem., 14 (1), e202101234 (2022)
  2. B. Plitta, E. Adamska, M. Giel-Pietraszuk, A. Fedoruk-Wyszomirska, M. Naskre-Barciszewska, W. T. Markiewicz, J. Barciszewski, Eur. J. Med. Chem., 55, 243 (2012)
- © Сахаутдинова Г.Ф., Сабирова А.Э., Сахаутдинов И.М., Мустафин А.Г., 2024

УДК 66.092.097.3

### ПРОМЕЖУТОЧНЫЕ ПРОДУКТЫ ТЕРМОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ ДЕСТРУКЦИИ УГЛЕВОДОРОДОВ, МОДЕЛИРУЮЩИХ КОМПОНЕНТЫ ТЯЖЕЛЫХ НЕФТЯНЫХ ОСТАТКОВ

Сахибгареев С.Р., Султанова М.Р., Андреева Ю.С., Кравченко К.Д.,  
Чирко О.Н.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет,  
Уфа, Россия*

В настоящее время Правительством России поставлена задача повышения степени переработки нефти до 95 % [1-2]. Одним из перспективных направлений решения данной задачи является термокаталитическая конверсия компонентов тяжелых нефтяных остатков (ТНО) до светлых углеводородов [3-4].

В настоящей работе изучены кинетические закономерности накопления и состав первичных молекулярных продуктов начальной стадии деструкции декалина, нафталина и гексадекана под воздействием металлхлоридного катализатора при 550 °С. Газохроматографически идентифицированы следующие продукты (табл.1).

Таблица 1

Промежуточные продукты термокаталитической деструкции  
модельных углеводородов

Углеводород	Продукты деструкции
Гексадекан	Октан, октен-3, октен-4, декан, додекан, 2,3-диметилдекан, 2-метилдодекан, тридекан, 2-метилтридекан, 6-метилтридекан, 2,3-диметилдодекан, тетрадекан
Декалин	Нафталин, бутилциклогексан, 1-метил-2-пропилциклогексан, 1,2-диэтилциклогексан
Нафталин	Бензол, толуол, <i>o</i> -ксилол

Изучение кинетики накопления этих продуктов показало, что данные соединения являются промежуточными продуктами: вначале они накапливаются до некоторого максимального значения концентрации, а затем расходуются. Расходование происходит на поверхности катализатора и образуются соединения с меньшей молекулярной массой.

Исходные реагенты-углеводороды под действием температуры и катализатора превращаются в указанные выше продукты по закону реакции первого порядка. Кинетические кривые расходования гексадекана, декалина и нафталина линеаризуются в прямые линии в координатах уравнения

$$\ln[\text{RH}]_t = \ln[\text{RH}]_0 + k_{\text{эф}} t$$

#### Литература

1. Sakhbigareev S.R., Tsadkin M.A., Badikova A.D., Gumerova E.F. Catalysts for destruction of hydrocarbon raw materials based on barium chloride // ChemChemTech. 2022. Т. 65. № 9. С. 64-73.
2. Бадикова А.Д., Цадкин М.А., Сахибгареев С.Р., Гумерова Э.Ф., Рулло А.В. Каталитический крекинг мазута на цеолитсодержащем ферратном катализаторе // Химия и технология топлив и масел. 2022. № 3 (631). С. 43-47.
3. Сахибгареев С.Р., Цадкин М.А., Бадикова А.Д., Бикбулатов Ш.Н., Матюшкин С.Н., Новикова В.Д. Каталитическое расщепление мазута на модифицированном металлхлоридном катализаторе // Башкирский химический журнал. 2022. Т. 29. № 3. С. 78-83.
4. Сахибгареев С.Р., Цадкин М.А., Бадикова А.Д., Осипенко Е.В. Влияние некоторых добавок на каталитическую активность тетраалюмината натрия в процессе гидрогенолиза гексилмеркаптана // Вестник Башкирского университета. 2020. Т. 25. № 4. С. 829-833.

© Сахибгареев С.Р., Султанова М.Р., Андреева Ю.С., Кравченко К.Д., Чирко О.Н., 2024

УДК 547.944/945

### ПИНАКОЛИНОВАЯ ПЕРЕГРУППИРОВКА ЛАППАКОНИТИНА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ

Саяхов Р.Р., Габбасов Т.М., Цырлина Е.М., Юнусов М.С.

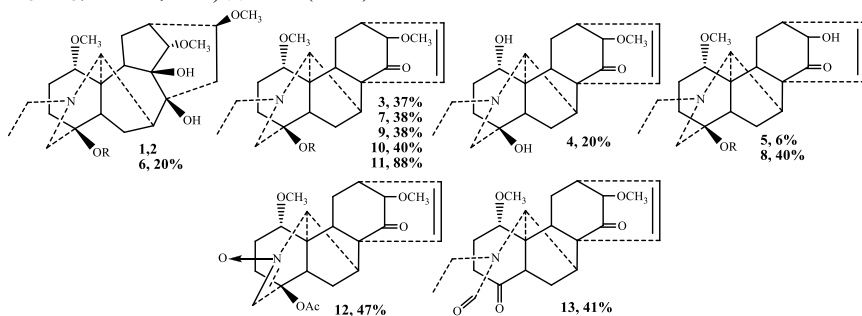
*Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

Модификации структур биоактивных природных соединений, включающие как простейшие трансформации функциональных групп природного субстрата, так и достаточно глубокие изменения в его структуре - один из современных путей получения новых лекарственных препаратов. Одними из доступных стартовых привлекательных объектов для таких трансформаций являются алкалоид лаппаконитин (1) и его производные [1-4].

Ранее было установлено, что в жестких условиях (65% HClO<sub>4</sub>, 100°C, 18 ч.) из лаппаконина (2) с выходом 83% образуется продукт пинаколиновой

перегруппировки **3**. В этих условиях при увеличении времени реакции (25 ч) до полной конверсии исходного лаппаконина, выход целевого **3** падает до 50% и наблюдается сильное осмоление [5,6].

В продолжении исследований нами обнаружено, что при нагревании **2** в 50% HClO<sub>4</sub> в течение 30 ч при 100°C наблюдается образование продуктов **3-5**. В то время как при использовании HClO<sub>4</sub> лаппаконитин **1** не образует продуктов перегруппировки, использование **1** в реакции с 65% CF<sub>3</sub>SO<sub>3</sub>H (100°C, 8ч.) приводит к продукту пинаколиновой перегруппировки **7** (38%). Непосредственное использование N-деацетиллаппаконитина **6** (65% CF<sub>3</sub>SO<sub>3</sub>, 100°C, 20ч) дает **8** (40%).



1. R = *o*-COC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>NHAc; 2,3,5. R=H; 6,7,8. R=*o*-COC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>NH<sub>2</sub>; 9. R=*p*-COC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>I; 10. R=*p*-COC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>NO<sub>2</sub>; 11. R=Ac

Ацилированием **3** *n*-йод- и *n*-нитробензойной кислотами [7] получены производные **9,10**, а в случае с AcCl - продукт ацилирования **11**, дальнейшее окисление которого комплексом H<sub>2</sub>O<sub>2</sub>-мочевина в присутствии Na<sub>2</sub>WO<sub>4</sub> [8] привело к нитрону (**12**) с выходом 47%.

Окисление **3** в указанных условиях даёт кето-формамидное производное **13** с выходом 41%.

*Работа выполнена по теме № 122031400260-7 «Синтез биологически активных веществ на основе природных соединений. Создание экологически чистых материалов и технологий».*

#### Литература

1. Смит В. А. Основы современного органического синтеза / Смит В. А., Дильман А. Д. — Москва : Лаборатория знаний, 2020. — 753 с. (Учебник для высшей школы)
2. Huigens III R. W., Morrison K. C., Hicklin R. W., Flood Jr T. A., Richterand M. F., Hergenrother P. J. // *Nat. Chem.*, 2013. — V. 5.— P. 195.
3. Chen Q. H., Wang F. P., Yu K. B. // *Chin. Chem. Lett.*, 2000. — V. 11. — № 8. — P. 689.
4. Shafikova E. U., Tsyrlina E. M., Spirikhin L. V., Balandina A. A., Latypov Sh. K., Sinyashin O. G. // *Nat. Prod. Comp.*, 2008. — V. 3. — № 10. — P. 1565.
5. Tel'nov V. A., Yunusov M. S., Yunusov S. Yu. // *Chem.Nat. Compd.*, 1970. — V. 6. — P. 598.
6. Sayakhov R.R., Gabbasov T.M., Tsyrlina E.M., Yunusov M.S. // *Chem. Nat. Compd.*, 2023. — V. 59. — № 6. — P. 1212.

7. Gabbasov T.M., Tsyrlina E.M., Komissarova N.G., Yunusov M.S. // *Chem. Nat. Compd.*, 2021. – V. 57. – № 3. – P. 512.

8. Gabbasov T.M., Tsyrlina E.M., Spirikhin L.V., Yunusov M.S. // *Chem. Nat. Compd.*, 2016. – V. 52. – № 2. – P. 280.

© Саяхов Р.П., Габбасов Т.М., Цырлина Е.М., Юнусов М.С., 2024

УДК 547.824, 542.91, 548.737

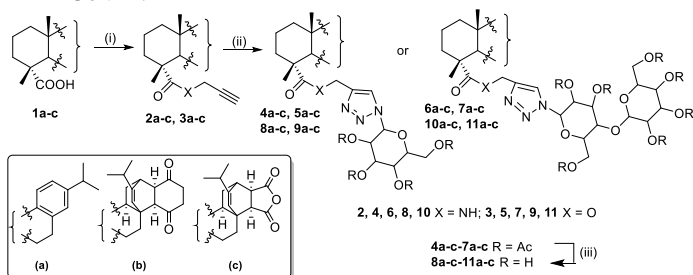
## СИНТЕЗ И ПРОТИВОВИРУСНАЯ АКТИВНОСТЬ 1,2,3-ТРИАЗОЛЬНЫХ ГЛИКОКОНЬЮГАТОВ ДИТЕРПЕНОВЫХ КИСЛОТ

Смирнова А.А., Третьякова Е.В.

*Уфимский Институт химии РАН, Уфа, Россия*

Дитерпеновые кислоты ряда абиетана и их производные проявляют широкий спектр биологической активности, включая противомикробные, противоопухолевые, цитотоксические, противовирусные, противоязвенные, антиоксидантные, противовоспалительные и др. свойства. Кроме того, недавние исследования продемонстрировали их способность эффективно ингибировать вирусы гриппа А и SARS-CoV-2 [1,2].

Катализируемая соединениями меди реакция 1,3-диполярного азидо-алкинового циклоприсоединения (CuAAC) с образованием 1,2,3-триазольной системы широко используется в синтезе современных фармацевтических препаратов и биологически активных соединений и представляет большой интерес в связи с широким спектром биологического действия и низкой токсичностью полученных соединений [3]. В настоящей работе мы осуществили синтез оригинальной серии гликозилированных триазолилзамещенных абиетановых дитерпеноидов CuAAC-реакцией гликозилазидов с алкинильными производными смоляных кислот и исследовали их противовирусную активность *in vitro* в отношении вирусов гриппа и SARS-CoV-2.



Реагенты и условия: (i) а)  $(\text{COCl})_2$ ,  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ , ДМФА, к.т., 2 ч.; б)  $\text{HC}\equiv\text{CCH}_2\text{NH}_2$  или  $\text{HC}\equiv\text{CCH}_2\text{OH}$ ,  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ , к.т., 4 ч.; (ii) азид,  $\text{CH}_2\text{Cl}_2$ ,  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ ,  $\text{AscNa}$ , к.т.; (iii)  $\text{CH}_3\text{OH}$ ,  $\text{CH}_3\text{ONa}$ .

В качестве исходных соединений для модификации использовались дегидроабиетиновая **1a**, 2,3-дигидрохинопимаровая **1b** и малеопимаровая **1c**

кислоты, зарекомендовавшие себя как соединения с высокой реакционной способностью и ценными фармакологическими свойствами. Гликозилазиды получали реакцией пер-О-ацетилированных  $\beta$ -D-глюкозы и  $\beta$ -D-лактозы с триметилсилилазидом в присутствии  $\text{SnCl}_4$  [4]. В результате взаимодействия кислот **1a-c** с пропаргиламином или пропаргилловым спиртом хлорангидридным методом получены ацетиленовые производные **2a-c** и **3a-c**, которые вводили в реакцию с азидами сахаров при комнатной температуре в хлористом метиле в присутствии аскорбата натрия и  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  с образованием 1,2,3-триазольных гликоконъюгатов **4a-c-7-a-c** выходами 77-89%. В условиях переэтерификации Земплена с использованием метоксида натрия в метаноле все ацетильные защитные группы были де-О-ацетилированы с получением конъюгатов **8a-c-11a-c** с количественными выходами (>90%).

Исследование противовирусной активности *in vitro* синтезированных соединений в отношении вируса гриппа A/PuertoRico/8/34 (H1N1) и псевдовируса SARS-CoV-2 показало, что 1,2,3-триазольные производные дигидрохинонимаровой и малеопимаровой кислот, конденсированные с гепта-О-ацетиллактозой **10b** и **10c**, оказались наиболее эффективными в отношении вируса гриппа ( $\text{IC}_{50}$  8.5-15.0  $\mu\text{M}$ ,  $\text{CC}_{50}$  >200  $\mu\text{M}$ , SI 15-34), в то время как производное дегидроабетиновой кислоты с азидом лактозы **10a** обладало выраженной противовирусной активностью и высокой селективностью в отношении псевдовируса SARS-CoV-2 ( $\text{EC}_{50}$  1.79  $\mu\text{M}$ , SI 46.4).

#### Литература

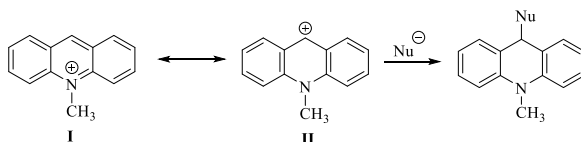
1. Tretyakova E.V., Ma X., Kazakova O.B., Shtro A.A., Petukhova G.D., Smirnova A.A., Xu H., Xiao S. Abietic, maleopimaric and quinopimaric dipeptide Ugi-4CR derivatives and their potency against influenza A and SARS-CoV-2. *Nat. Prod. Res.* – 2023. – Vol. 37. – P. 1954-1960.
2. Tretyakova E.V., Ma X., Kazakova O.B., Shtro A.A., Petukhova G.D., Klabukov A.M., Dyatlov D.S., Smirnova A.A., Xu H., Xiao S. Synthesis and Evaluation of Diterpenic Mannich Bases as Antiviral Agents against Influenza A and SARS-CoV-2. *Phytochem. Lett.* – 2022. – Vol. 51. – P. 91-96.
3. Moorhouse A.D., Moses J. E. Click chemistry and medicinal chemistry: a case of “cyclo-addiction”. *Chem. Med. Chem.* – 2008. – Vol. 3 – P. 715–723.
4. Singh K., Tyagi R., Mishra V.K., Tiwari G., Sagar, R. Recent advances in the synthesis of bioactive glycohybrids via click-chemistry. *SynOpen.* – 2023. – Vol. 7. – P. 322-352.

© Смирнова А.А., Третьякова Е.В., 2024

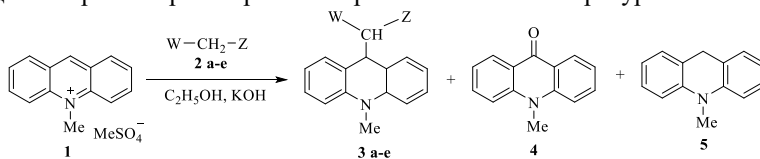
## О РЕАКЦИЯХ N-МЕТИЛАКРИДИНИЕВЫХ СОЛЕЙ С НЕКОТОРЫМИ СН-КИСЛОТАМИ

Стульников Д.В., Козлов А.Ш., Малов Н.А., Кострюков С.Г.  
*Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва, Саранск, Россия*

Как известно, катион акридиния **I** может давать резонансную хиноидную структуру **II**, которая, способна реагировать с нуклеофильными частицами [1]. Таким образом, настоящее исследование посвящено изучению реакций метилсульфата метилакридия **1** с различными СН-кислотами **2a-e**.



В качестве СН-кислот были выбраны: диэтиловый эфир малоновой кислоты **2a**, динитрил малоновой кислоты **2б**, ацетилацетон **2в**, нитрометан **2г**, бензофенон **2д** и бис-(фенилсульфонил)метан **2е**. N-Метилакридиний метилсульфат **1** получали при действии на акридин диметилсульфата в этиловом спирте. Реакции соединения **1** со всеми СН-кислотами проводили в водно-спиртовом растворе КОН при комнатной температуре.



W = Z = CO<sub>2</sub>Et (**a**); CN (**б**); Ac (**в**); W = H, Z = NO<sub>2</sub> (**г**); W = H, Z = PhCO (**д**), W = Z = PhSO<sub>2</sub> (**е**)

Чтобы избежать взаимодействия соли N-метилакридиния с гидроксид-анионом, реакцию проводили в избытке СН-кислоты. Состав реакционных смесей анализировался с помощью хроматографического анализа с использованием ВЭЖХ-МС. Идентификацию продуктов проводили по пику молекулярного иона. Во всех случаях кроме образования производных акридина **3a-e** наблюдали образование незначительных количеств N-метилакридона **4** и N-метилакридана **5**. Акриданы **3a-e** в индивидуальном виде получены перекристаллизацией реакционных смесей. Их строение подтверждено данными ИК, ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C спектров.

## Литература

1. Kröhnke F., Honig H.L. Über Pseudobasen. V. Versuche in der Acridinium-Reihe // Chem. Ber. 1957. Vol. 90. Iss. 10. P. 2215-2225. Doi: 10.1002/cber.19570901015.

© Козлов А.Ш., Стульников Д.В., Малов Н.А., Кострюков С.Г., 2024

## ВЛИЯНИЕ ДИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ НА ПРОТЕКАНИЕ ПЦР

Субханкулова<sup>1</sup>Э.И., Гарафутдинов<sup>1,2</sup> Р.Р.<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия<sup>2</sup>Институт биохимии и генетики УФИЦ РАН, Уфа, Россия

ПЦР остается наиболее используемым методом амплификации нуклеиновых кислот благодаря своей высокой чувствительности, надежности и доступности. С момента своего появления в 1985 г. были предложены различные модификации ПЦР для решения проблем, возникающих, когда традиционная ПЦР не дает надежных результатов. Одним из подходов к повышению эффективности ПЦР является использование низкомолекулярных соединений, известных как "усилители" (энхансеры) ПЦР. Первые исследования по улучшению ПЦР с использованием диметилсульфоксида (ДМСО) и формамида были опубликованы в 1990 году. Впоследствии были отмечены положительные эффекты детергентов, гликолей, солей тетрааммония, бетаина, сульфоксидов, сульфонов, белков, аналогов нуклеотидов, трегалозы, эктоинов и наноматериалов. на эффективность ПЦР. Эти энхансеры оказывают свое действие посредством различных механизмов, включая снижение температуры плавления нуклеиновых кислот, защиту полимераз от стрессоров, стабилизацию нуклеиновых кислот и полимераз, изменение электростатического окружения молекул нуклеиновых кислот и влияние на конформацию спирали ДНК.

Настоящее исследование направлено на изучение влияния диэтиленгликоля на эффективность ПЦР-амплификации. Амплификацию проводили в приборе LightCycler 96. Термоциклирование проводили следующим образом: начальная денатурация при 95°C (3 мин), до 50 циклов - денатурация при 95°C (15 с), отжиг при 60°C (30 с), элонгация при 72°C (15 с) Использовали следующие реагенты: диэтиленгликоль разных концентраций; прямые и обратные праймеры; ДНК-полимеразы: Taq (Сибэнзим, Россия); интеркалирующий краситель EvaGreen (Синтол, Россия); дНТФ; ДНК-матрицы (ДНК богомола обыкновенного и фага Лямбда). Оказалось, что для использованных условий с ростом концентрации диэтиленгликоля в диапазоне 2-10% масс. эффективность ПЦР постепенно снижается, а при концентрации выше 15% амплификация специфической мишени не протекает.

© Субханкулова Э.И., Сахабутдинова А.Р., Гарафутдинов Р.Р., 2024



## ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ЭФФЕКТИВНОСТЬ СЛОЖНЫХ КОЛОНН ПРИ РАЗДЕЛЕНИИ ПРОДУКТОВ ПИРОЛИЗА

Тихонова А.А., Рудаков Д.Г., Тимошенко А.В.

*МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия*

Одним из основных промышленных способов получения ненасыщенных углеводородов для основного органического синтеза является пиролиз. Для разделения продуктов пиролиза применяют ректификацию, которая характеризуется высокими удельными затратами энергии. Одним из перспективных направлений повышения энергоэффективности является приближение процесса ректификации к гипотетическому термодинамически обратимому процессу. Такой подход может быть реализован в виде комплексов с частично связанными тепловыми и материальными потоками (ЧСТМП), которые на практике могут быть исполнены в виде сложных колонн с перегородками (СКП) [1].

Цель настоящей работы заключается в оценке эффективности применения СКП в процессе разделения смеси после печей пиролиза на бутановую фракцию ( $C_4$ ), пентановую фракцию ( $C_5$ ) и фракцию тяжелых углеводородов ( $C_{6+}$ ), работающих как по первому (I ЗР), так и по второму (II ЗР) заданным разделениям. Варианты схем приведены на рисунке 1.

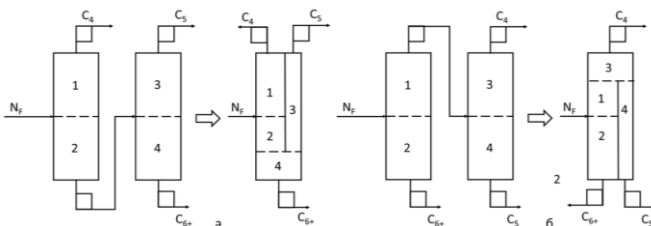


Рис. 1. Варианты схем: а – I ЗР, б – II ЗР

Решение поставленной задачи осуществляли методом вычислительного эксперимента. Оптимизируемыми параметрами являлись: положение тарелок подачи питания, уровень отбора пара (при I ЗР) или жидкости (при II ЗР) в боковую секцию, а также расход отбираемых потоков.

Расчеты показали, что энергоемкость разделения в колонне с перегородкой на 13 % ниже по сравнению с двухколонной схемой, работающей по I ЗР и на 36% ниже, для схемы, работающей по II ЗР.

### Литература

1. Тимошенко А. В. и др. Энергосбережение в ректификации с использованием комплексов со связанными потоками //Вестник МИТХТ им. МВ Ломоносова. – 2011. – Т. 6. – №. 4. – С. 28-39.

© Тихонова А.А., Рудаков Д. Г., Тимошенко А.В., 2024

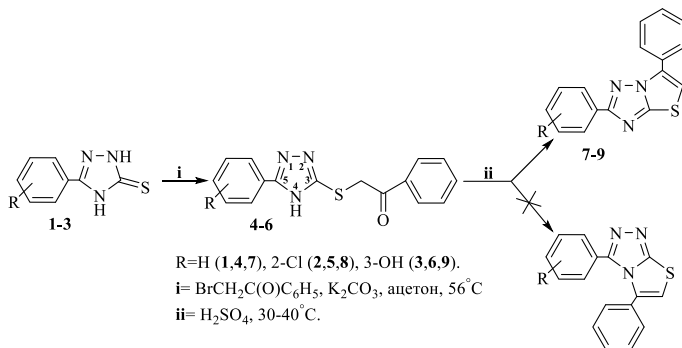
УДК 547.79: 222-224;

СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА 2-(R-ФЕНИЛ)-6-ФЕНИЛ-1,3-ТИАЗОЛО[3,2-b][1,2,4]ТРИАЗОЛОВ

Тошмуродов Т.Т., Зияев А.А., Окманов Р.Я.

*Институт химии растительных веществ им. акад. С.Ю. Юнусова АН, Ташкент, Республики Узбекиста,*

С целью получения новых гетероциклических соединений содержащих триазольную и тиазольные фрагменты были продолжены исследования по изучению химических превращений ранее синтезированных [1,2] алкил производных 5-арил-2,4-дигидро-1,2,4-триазол-3-тионов **1-3**. В результате небольшого нагрева 1-фенил-2-((5-(R-фенил)-4Н-1,2,4-триазол-3-ил)тио)этан-1-онов **4-6** в концентрированной серной кислоте, который выступает как циклизующий агент, получены бициклические производные **7-9**:



Строение синтезированных соединений установлены спектральными данными (ИК-, <sup>1</sup>Н ЯМР). Так, в ИК-спектрах соединений **7-9** отсутствуют полосы поглощения карбонильной (C=O) группы при 1685-1689 см<sup>-1</sup> феноцильного фрагмента 1-фенил-2-((5-(R-фенил)-4Н-1,2,4-триазол-3-ил)тио)этан-1-онов **4-6**. При этом в <sup>1</sup>Н ЯМР спектрах полученных циклических продуктах отсутствуют соответствующие сигналы протонов NH и S-CH<sub>2</sub> групп исходных соединений **4-6**. Вместо этого наблюдаются характерные синглетные сигналы в пределах 7.69-7.78 м.д. метинового протона тиазольного цикла 2-(R-фенил)-6-фенил-1,3-тиазоло[3,2-b][1,2,4]триазолов **7-9**. Рентгеноструктурный анализ (РСА) на примере соединения **7** также подтверждает строение полученного бициклического продукта. По РСА в асимметрической части кристаллической структуры **7** содержится четыре молекулы 2,6-дифенил-1,3-тиазоло[3,2-b][1,2,4]триазола (рис.1):

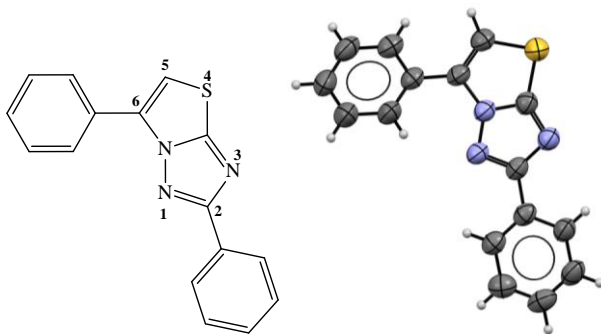


Рис. 1. Строение 2,6-дифенил-1,3-тиазоло[3,2-*b*][1,2,4]триазола **7** в кристалле

В целом молекула **7** состоит из трех плоских фрагментов двух фенильных колец и тиазоло[3,2-*b*][1,2,4]триазольного фрагмента. Двугранный угол между этими фрагментами отличаются. Кристаллографические данные: молекулярная формула  $C_{16}H_{11}N_3S$ , пространственная группа *P*-1. Параметры элементарной ячейки  $a=9.0428(12)$ ,  $b=13.529(3)$ ,  $c=22.901(5)$  Å,  $\alpha=74.88(3)^\circ$ ,  $\beta=81.10(3)^\circ$ ,  $\gamma=88.90(3)^\circ$ ,  $V=2671.5(10)$  Å<sup>3</sup>,  $M=277.34$ ,  $Z=8$ .

Таким образом, гетероциклизация 1-фенил-2-((5-(*R*-фенил)-4Н-1,2,4-триазол-3-ил)тио)этан-1-онов **4-6** проходит с хорошими выходами (79-86%) образованием бициклических гетероциклических соединений **7-9** при участии атома азота находящегося в положении 2 триазольного цикла, которая обладает большей нуклеофильностью чем с N(4). Полученные 2-(*R*-фенил)-6-фенил-1,3-тиазоло[3,2-*b*][1,2,4]триазолы **7-9** представляют интерес для изучения дальнейших модификаций и биологической активности.

#### Литература

1. A.A. Ziyayev Synthesis and heterocyclization of 3-phenacylthio-5-aryl-(4H)-1,2,4-triazoles 14th International Symposium on the Chemistry of Natural Compounds, October 7-8, 2021, Tashkent, Uzbekistan. p. 68.
2. Зияев А.А., Окманов Р.Я. Гетероциклизация 2-фенацилтио-5-арил-1,3,4-оксадиазолов // «Научная перспектива: проблема интерпретации знания в современном образовательном процессе», 30 октября 2020 г., Россия, Казань, с. 141-142.

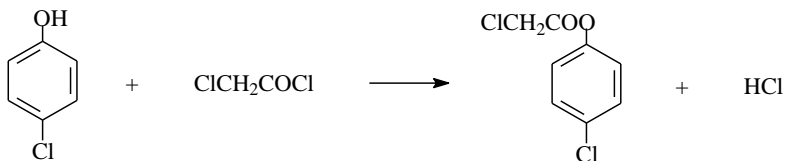
© Тошмуродов Т.Т., Зияев А.А., Окманов Р.Я., 2024

## СИНТЕЗ 4-ХЛОРФЕНИЛХЛОРАЦЕТАТА И ЕГО РЕАКЦИИ С ТИОЦИАНАТ КАЛИЯ

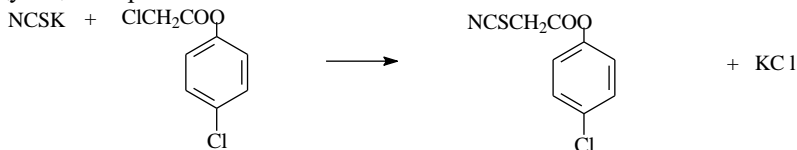
Утаева С.М., Чориев А.У., Мирзаева С.К., Нормуродов И.У.  
*Каршинский государственный университет, Карши, Республика  
Узбекистан*

Химический дизайн биологически активных веществ, в том числе фенолов, осуществляется путем комбинации в молекуле нескольких фармакофорных фрагментов, что довольно часто приводит не только к усилению основного терапевтического эффекта, но и к возникновению новых, порой неожиданных видов активности. Введение галогенов ядре, как, например, в производных фенолсалициланилидов, обладают высокой антибактериальной активностью и проявляют мощный разобщающий эффект [1].

В связи с этим мы составили повышает липофильность лекарственных веществ и облегчает их прохождение через биомембраны. Одновременное присутствие галоген- и родано группы в ароматическом следующую схему превращений. Синтезированные по известным методикам хлорацетилхлорид, 4-хлорфенол, выгодно отличающейся от приведенной схемы получения в методике, ацилировали хлорангидридом хлоруксусной кислоты по схеме



В связи с этим уравнение и механизм реакции 4-хлорфенилхлорацетата с роданидом калия в присутствии диметилформаида можно представить следующим образом:



Состав и строение полученных соединений подтверждают данные элементного анализа, ИК- и УФ-спектроскопии.

### Литература

1. Солдатенков А. Т., Колядина Н. М., Шендрик И. В. Основы органической химии лекарственных веществ // Химия. — Москва, 2001. — 192 с.

© Утаева С.М., Чориев А.У., Мирзаева С.К., Нормуродов И.У., 2024

## СИНТЕЗ 2,3-ИЗОКСАЗОЛА ХОЛЛОНГДИОНА

Фатхутдинова<sup>1</sup> Р.В., Миннибаева<sup>1</sup> Э.М., Галимова<sup>2</sup> З.И., Смирнова<sup>2</sup> И.Е.<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия<sup>2</sup>Уфимский Институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Даммарановые тритерпеноиды являются доступными и биоактивными природными метаболитами с большим структурным потенциалом, что делает их привлекательными источниками в качестве платформ для разработок лекарственных средств. Главными представителями данной группы тритерпеноидов являются диптерокарпол и его ближайшее производное – холлонгдион. Последнее является практически неизученным и поэтому мы решили проверить реакционную способность этой молекулы введением гетероциклических фрагментов, а именно изоксазольного кольца.

В данной работе, мы синтезировали холлонгдион **1** по известной методике путем озонлиза диптерокарпола с выходом 89% [1]. Затем, конденсацией тритерпеноида **1** с этилформиатом в присутствии метилата натрия в бензоле было получено гидроксиметиленпроизводное **2** по положению С2, дальнейшая циклизация которого с солянокислым гидроксиламином в метаноле с каталитическим количеством DMAP привела к соединению **3** с выходом 86 % (Схема 1). В положении С20 наблюдали образование оксимной функции.

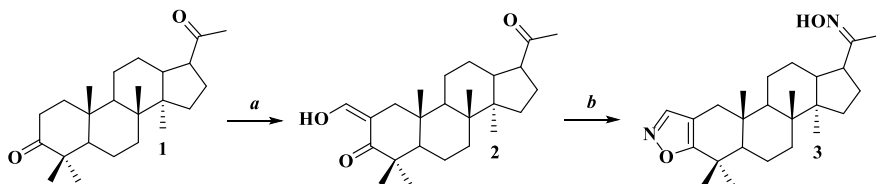


Схема 1. Реагенты и условия: *a.* O<sub>3</sub>/AcOH, 0 °С; *b.* HCOOEt, NaOMe, бензол, 25 °С; *c.* NH<sub>2</sub>OH·HCl, EtOH-H<sub>2</sub>O, Δ.

Для установления структуры было проведено полное отнесение сигналов в спектрах ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C. В спектре ЯМР <sup>13</sup>C характерными были сигналы C1' при δ 154.40 м.д., а также при C2 и C3 углеродных атомов в области δ 113.41 и 163.40 м.д. В спектре ЯМР <sup>1</sup>H в области δ 8.34 м.д. наблюдался характеристичный сигнал H-1' в виде уширенного синглета.

## Литература

1. Smirnova I. E. et al. One-pot synthesis of hollongdione from diptercarpol // Natural Product Communications. – 2014. – Т. 9. – №. 10. – С. 1934578X1400901005.

© Фатхутдинова Р.В., Миннибаева Э.М., Галимова З.И., Смирнова И.Е., 2024

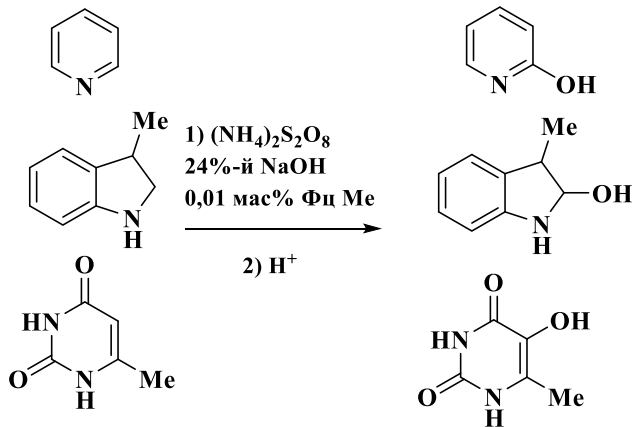
УДК 541.14:547.551.2

## ПЕРСУЛЬФАТНОЕ ОКИСЛЕНИЕ В РЯДУ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Хазимуллина Ю.З., Гилимханова А.А.

*Уфимский Институт химии – обособленное структурное подразделение  
Федерального государственного бюджетного научного учреждения  
Уфимского федерального исследовательского центра РАН,  
Уфа, Россия*

Большая часть химических соединений, обладающих выраженной биологической активностью и использующихся в качестве действующего вещества многих лекарственных препаратов, входит в число азотсодержащих гетероциклических соединений, в частности пиридинов, индолов, урацилов и других [1, 2]. На их основе синтезируются практически полезные соединения, ключевым моментом процесса является гидроксילирование. Нами выявлено, что персульфатным окислением с последующим кислотным гидролизом возможно введение OH-группы в молекулы гетероциклов [3, 4]. Максимальные выходы удалось достичь использованием фталоцианиновых катализаторов различных металлов (Co, Fe(II), Fe(III), Ni, Zn, Mn):



При введении 0,01-0,05 мас % катализаторов и повышению температуры реакционной смеси до 45-55 °С достигли максимальных выходов 2-гидроксипиридина (78-80 %), 2-гидроксискатола (60-62 %) и 5-гидрокси-6-метилурацила (85-88%).

*Исследование выполнено при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 19-73-20073*

## Литература

1. Гимадиева А.Р., Чернышенко Ю.Н., Абдрахманов И.Б., Мустафин А.Г. Синтез, модификации и биологическая активность урацилов. – Уфа: Гилем. –2013. – 176 с.
2. Петрова И.В., Катаев В.А., Мещерякова С.А. и др. // Медицинский вестник Башкортостана. – 2013. –Т.- №4. С. 64-67.
3. Гимадиева А.Р., Хазимуллина Ю.З., Абдрахманов И.Б., Мустафин А.Г. // Журнал прикладной химии. – 2022. – Т.95. – № 3. – С.382-388. doi: 10.31857/S0044461822030112
4. Патент № 2784429. Способ получения пиридин 2(1H)-она : № 2022124039 : заявл. 12.09.2022 : опубл. 24.11.2022 / А.Р. Гимадиева, Ю.З. Хазимуллина, И.Б. Абдрахманов, А.Г. Мустафин; заявитель, патентообладатель Уфимский федеральный исследовательский центр Российской академии наук (УФИЦ РАН). – 7 с.

© Хазимуллина Ю.З., Гилимханова А.А., 2024

УДК 547.82. 542.97

## СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ НА ОСНОВЕ ДИПИРИДИЛОВ

Хикматова М.М.

*Национальный университет Узбекистана им. Мирзо Улугбека,  
Ташкент, Республика Узбекистан*

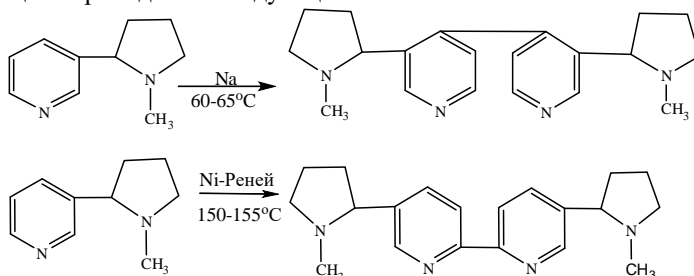
Дипиридины, молекулы которых состоят из двух пиридиновых колец по С-С связям имеют шесть структурных изомеров, отдельные из них в свободном виде или в виде производных встречаются в растительных, грибковых и животных организмах. Они проявляют большие теоретические и практические интересы в ряду азотсодержащих гетероциклических соединений. Некоторые изомеры дипиридилов и их производные встречаются и в растениях *Anabasis aphylla*, *Nicotiana tabacum*, *Cosmos Condatus*, в грибах *Streptomices*, *Kaerylous Baldacci*, а также в организмах отдельных хищных животных как морских червей - немертилены *Anopla Amphiporus angulatus* [1-3].

Ранее, нами с целью получения более эффективных и малотоксичных производных -  $\alpha, \alpha'$ -дипиридила была проведена реакция взаимодействия последнего с различными амидами монохлоруксусной кислоты и получены соответствующие N,N'-ди-(амидометил)- $\alpha, \alpha'$ -дипиридилийдихлорид, N,N'-ди-(диметиламидометил)- $\alpha, \alpha'$ -дипиридилийдихлорид и N,N'-ди-(диэтиламидометил)- $\alpha, \alpha'$ -дипиридилийдихлориды [4,5].

В настоящей работе излагаются результаты реакции димеризации алкалоида никотина (2-N-метилпирролидин-пиридин) в присутствии диспергированного металлического натрия и активированного Ni-Ренея в качестве катализаторов. Реакции проводились при различных условиях

(температура, время) в растворителях ДМФА и нитробензола в соотношении исходного реагента и катализаторов 4:1, оптимальным условием димеризации никотина в присутствии металлического натрия является 6 часовое нагревание реакционной смеси в ДМФА при 60-65<sup>0</sup>С с 58%ным выходом, а для димеризации никотина в присутствии катализатора активированного Ni-Ренея оптимальным условием являлось 16 часовое нагревание реакционной смеси в ДМФА при 150<sup>0</sup>С с 36%-ным выходом.

Реакции проходят по следующей схеме:



Таким образом, в результате реакции димеризации алкалоида никотина в присутствии диспергированного металлического натрия и активированного Ni-Ренея в качестве катализаторов были получены соответствующие производные 4,4'-и 2,2'-дипиридилов – 3,3'-ди-(N-метилпирролидин-2)- 4,4'-дипиридил и 3,3'- (N-метилпирролидин-2)- 2,2'-дипиридил, строение которых доказаны на основании анализа данных ИК- и ПМР-спектров.

В ИК-спектре 3,3'-ди-(N-метилпирролидин-2)-4,4'-дипиридила обнаруживаются следующие характеристические частоты, 700-900см<sup>-1</sup> деформационное колебание-СН-пиридинового ядра, 810см<sup>-1</sup>-деформационное колебание замещенного пиридиного ядра (1,2,4-тип замещения), 2800-2900см<sup>-1</sup> валентные колебания N-метил пиррольного кольца. В ПМР-спектре 3,3'-ди-(N-метилпирролидин-2)-4,4'-дипиридила наблюдаются следующие пики; 8,8 м.д. (4Н, Н<sub>2,6</sub>), 8,2 м.д. (2Н, Н<sub>3,5</sub>), 3,4м.д. (С-СН<sub>2</sub>), 3,1м.д. (N-СН<sub>3</sub>).

В ИК-спектре 3,3'-ди-(N-метилпирролидин-2)-2,2'-дипиридила имеются следующие характерные частоты: 790-900см<sup>-1</sup>-деформационное колебание СН групп пиридиного ядра, 820см<sup>-1</sup>-деформационное колебание замещенных пиридиновых ядер (1,2,4-тип замещения), 2800-2900см<sup>-1</sup>-валентное колебание-метилпирролидинового кольца. В ПМР-спектре 3,3'-ди-(N-метилпирролидин-2)-2,2'-дипиридила наблюдаются следующие пики; 8,6м.д. (2Н, Н<sub>2,6</sub>), 8,2 м.д. (2Н, Н<sub>3,5</sub>), 7,5 м.д. (2Н, Н<sub>4</sub>), 3,2 м.д.(С-СН<sub>2</sub>), 3,0 м.д. (6Н, 2N-СН<sub>3</sub>).

4,4'-ди-(N-метилпирролидин-2)-4,4'-дипиридила представляет собой в виде игольчатых кристаллов с T<sub>пл</sub>=270-272<sup>0</sup>С. 3,3'-ди-(N-метилпирролидин-



2)-2,2'-дипиридил представляет собой кристаллы коричневого цвета, имеющим  $T_{пл}=278-280^{\circ}\text{C}$ , которое дает положительную малиновую окраску ионами двухвалентного железа подобно 2,2'-дипиридила (показывает наличие 2,2'-дипиридильного ядра),  $R_f=0,82$  (система этилацетат-изопропиловый спирт-аммиак (50:35:25)). Выход 0,42г (21%).

#### Литература

1. Садыков А.С. Химия алкалоидов *Anabasis aphylla*. Ташкент, Изд. АН УзССР, 1956, 222с.
2. Орехов А.П. химия алкалоидов. Изд.АН СССР, 1955. 859с.
3. Ragasa Consolacion Y., Naspil Zenaida D., Penabosa Beatris A., Redaut John A. Антимутагенные и противогрибковые соединения из *Cosmos Sandatus*. // *Phulip J.Sci.*, 1997, 126, №3, P.1999-2006; по Р.Ж.Хим., 2000, 02-19E102.
4. Зияев А.А., Махсудова М.М. (Хикматова М.М.). Синтез дихлоридов N,N'-бис - (карбомоилметил)-2,2'-дипиридила. // *Узб.хим.журн.* 1997, №1, с.22-24.
5. Зияев А.А., Махсудова М.М. (Хикматова М.М.), Жураев А.Ж. Синтез некоторых производных 2,2'-дипиридила по азоту и их физико-химические свойства. *Узб.хим.журн.* 1997, №1, с.22-24.

© Хикматова М.М., 2024

УДК 541.14:547.551.2

СИНТЕЗ 1-(2-(НАФТИЛОКСИ)-2-ОКСОЭТИЛ)-

1,3,5,7- ТЕТРААЗААДАМАНТАН -1-ИЙ ХЛОРИДА

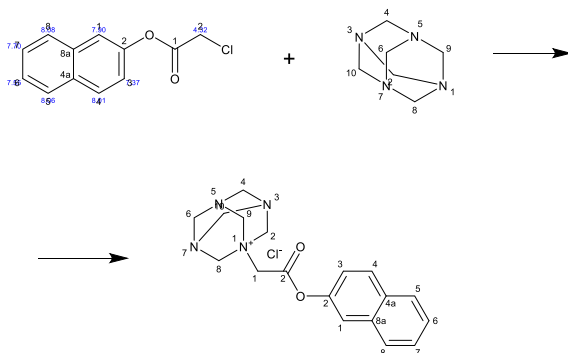
Чориев А.У., Кахарова М.Ф., Абдушукуров А.К., Нахатов И.

*Каршинский государственный университет, Карши, Республика  
Узбекистан*

Среди соединений гексаметилентетрамина и его производных встречаются многие пестициды и лекарственных средства, использующиеся в различных отраслях [1].

В данной работе проведением реакции при комнатной температуре и мольном соотношении реагентов 1:1 в ацетоне синтезированы продукты, имеющие одинаковую температуру плавления, что свидетельствует согласно, литературным данным и результатам УФ-, ИК-, <sup>1</sup>H- и <sup>13</sup>C- ЯМР - спектроскопии об образовании одного продукта.

Схема синтеза 1-(2-(нафтилокси)-2-оксоэтил)- 1,3,5,7- тетрааза-адамantan- 1-ий хлорида:



Образование четвертичных солей продуктов при проведении реакций в нейтральных условиях может служить эффективным альтернативным методом синтеза по сравнению с методами, проводимыми в нейтральной среде.

#### Литература

1. Штейнберг Л.Я., Кондратов С.А., Шейн С.М. Влияние растворителей в катализируемой реакции анилина с бензойной кислотой // Журн. орг. хим., 2005. Том 41. Вып. 2. С. 312-313.

© Чориев А.У., Кахарова М.Ф., Абдушукуров А.К., Нахатов И., 2024

УДК 547.565.2.

### ОКИСЛЕНИЕ 2-АМИНОФЕНОЛА ПЕРСУЛЬФАТОМ АММОНИЯ В ЩЕЛОЧНОЙ СРЕДЕ

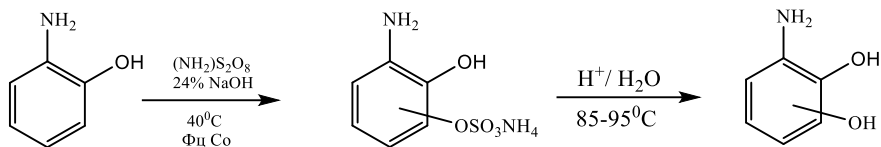
Шайдуллина<sup>1</sup> Г.А., Гимадиева<sup>2</sup> А.Р.

<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Реакция Бойленда-Симса является одним из перспективных направлений для синтеза широкого спектра гидроксипроизводных ароматических аминов. Хотя реакция не отличается большим выходом (40-45%), преимуществом этого окисления являются мягкие условия проведения реакции и высокая селективность [1].

Нами проведена реакция окисления 2-аминофенола персульфатом аммония в щелочной среде. В качестве катализатора был использован фталоцианин кобальта. В результате последующего кислотного гидролиза получена смесь 2,4-дигидроксианилина и 2,6-дигидроксианилина. Строение всех соединений было подтверждено методом ЯМР спектроскопии. Так, в спектрах ЯМР <sup>1</sup>H полученных соединений наблюдался новый характеристичный сигнал ОН- группы в виде синглета при 8.5 м.д.



#### Литература

1. Behrman, E.J. *Mini-Reviews in Organic Chemistry*, 2021, 18, 621-625.

© Шайдуллина Г.А., Гимадиева А.Р., 2024

УДК 547-38

### СИНТЕЗ КАТИОННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ЭКДИСТЕРОИДОВ

Шаймухаметова А.Ф., Савченко Р.Г.

*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфимский  
университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Экдистероиды – обширный класс природных полигидроксилированных стеринов. Самый доступный и наиболее изученный экдистероид 20-гидроксиэкдизон (20E), выделяемый из растения *Serratula coronata*. Практическая перспектива для выделения 20E и синтеза на его основе новых производных определяется широким спектром биологических свойств природной молекулы и его низкой токсичностью [1].

Мировая статистика последних лет свидетельствует о росте онкозаболеваний и разработка высокоэффективных противораковых средств с низким уровнем побочных эффектов продолжает оставаться основным направлением медицинской химии. Мембраны раковых клеток отличаются проницаемостью, что обуславливает их резистентность к действию терапевтических средств [2].

Было установлено, что неполярные производные экдистероидов обладают хемосенсибилизацией противоопухолевых препаратов (доксорубицин, винкристин) [1] и их действие опосредовано проходимостью через мембраны.

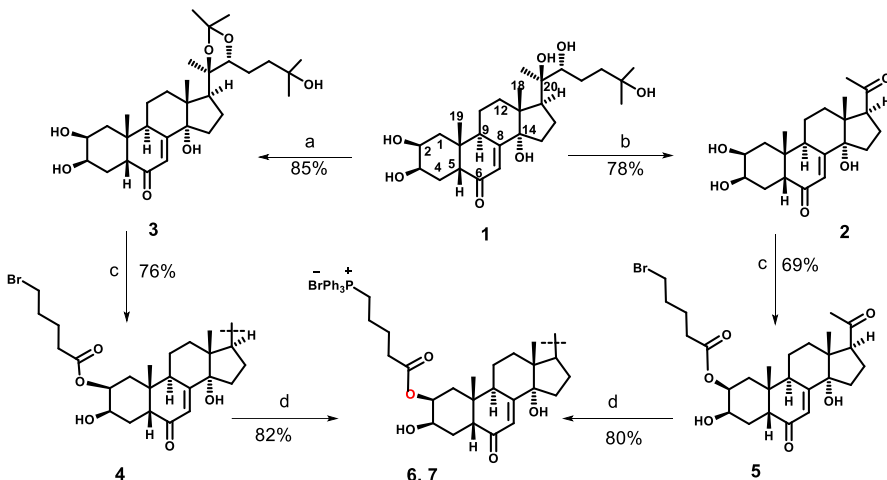
С целью синтеза таргетных мембранно-липидных агентов мы решили синтезировать катионные производные на основе 20E. Его доступность из возобновляемого растительного источника после экстракции и хроматографической очистки для последующих направленных химических трансформаций и изучения свойств полученных аналогов во многом способствует развитию фундаментальных знаний химии природных соединений в контексте «структура-свойство».

В качестве исходных субстратов для разработки схемы синтеза трифенилфосфониевых производных экдистероидов были выбраны экдистероиды **2** и **3**, получаемые из 20E **1** (Схема). Синтез бромпроизводных

**4** и **5** осуществляли хемоселективной этерификацией 2-гидроксильной группы кольца А стартового субстрата с помощью 5-бром валериановой кислоты, активируя ее карбоксильную группу дициклогексилкарбодиимидом (DCC) при катализе диметиламинопиридином (DMAP).

Последующее продолжительное кипячение бромпроизводных в диметоксиэтаноле с 1,5-мольным избытком трифенилфосфина (TPP) привело к образованию целевых катионных производных экдистероидов **6** и **7** (Схема). Их образование установлены с помощью ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  спектров, для которых характерно появление дополнительных сигналов атомов водорода и углерода, принадлежащих ароматическим фрагментам в синтезированных молекулах. Брутто-составы целевых трифенилфосфониевых производных **6** и **7** подтверждены регистрацией положительных ионов  $[\text{M-Br}]^+$ .

Схема



Реагенты и условия: а.  $\text{Me}_2\text{CO-p-TsOH}$ ; б.  $\text{CrO}_3\text{-H}_2\text{SO}_4\text{-Me}_2\text{CO}$  или  $\text{PIDA-MeOH}$ ; в. 5-Br  $\text{C}_2\text{H}_4\text{CO}_2\text{H-DCC-DMAP}$ , 10 ч; д.  $\text{TPP-DME}$ , кипячение, 48 ч.

Таким образом, нами впервые разработана эффективная и хемоселективная схема синтеза ранее неизвестных катионных молекул экдистероидов на основе избирательной этерификации 2-ОН-группы кольца А с помощью 5-бром валериановой кислоты.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 24-23-00413).*

Литература

1. R.G. Savchenko, N.A. Veskina, V.N. Odinokov, G.V. Benkovskaya, L.V. Parfenova, *Phytochem. Rev.*, 2022, 21, 1445-1486.

2. G. Preta "New Insights Into Targeting Membrane Lipids for Cancer Therapy"//Front. Cell Dev. Biol., 2020, v.8.  
3. Martins A., et.al.//Biomed Res Int. 2015.

© Шаймухаметова А.Ф., Савченко Р.Г., 2024

УДК 542.943.5

## СИНТЕЗ КОНЬЮГАТОВ БЕТУЛИНОВОЙ КИСЛОТЫ С ПРИРОДНЫМИ НЕПРЕДЕЛЬНЫМИ КИСЛОТАМИ

Шакирова<sup>1</sup> Р.А., Яковлева<sup>2</sup> М.П., Ишмуратов<sup>2</sup> Г.Ю., Петухова<sup>1</sup> Н.И.

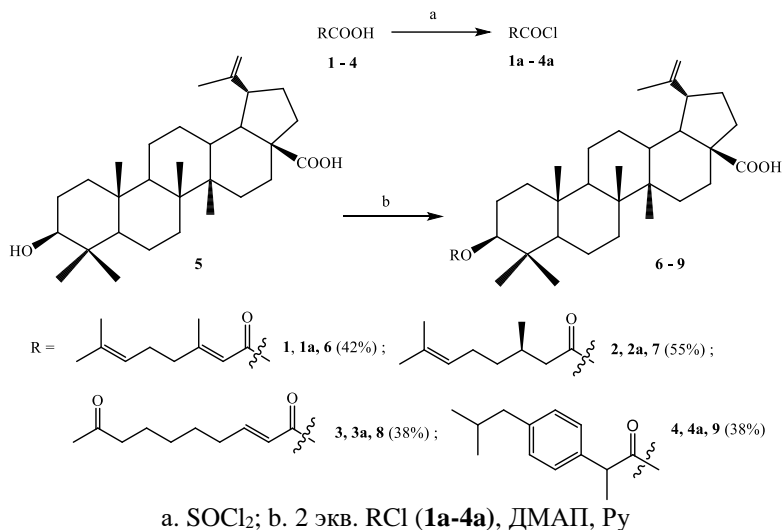
<sup>1</sup>Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Наиболее широко распространенной функцией для создания пролекарств является сложноэфирные, которые легко гидролизуются в плазме крови, органах и тканях с помощью неспецифических эстераз.

Природные гераниевая (3,7-диметилонкта-2,6-диеновая) (1), цитронелловая (2), 9-оксо-2Е-деценовая (3) и ибупрофен (2-(4-изобутилфенил)пропионовая, 4) кислоты обладают различной фармакологической активностью. Мы предположили, что сочетание в одной молекуле фрагментов этих кислот с остатками фармакологически активной бетулиновой кислоты (5) может усилить имеющиеся свойства и/или способствовать возникновению иной биологической активности, а также уменьшить побочные эффекты применения этих соединений, в первую очередь ибупрофена.

Нами кислоты (1-4) действием тионилхлорида переведены в соответствующие хлорангидриды (1a-4a). При действии двукратного количества их на бетулиновую кислоту (5) в пиридине в присутствии каталитических количеств ДМАП получены соответствующие сложные эфиры (6-9).



© Шакирова Р.А., Яковлева М.П., Ишмуратов Г.Ю., 2024

УДК 547.747; 547-3167

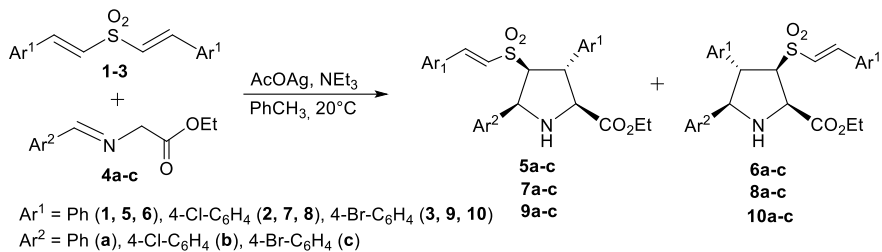
**О РЕАКЦИЯХ 1,3-ДИПОЛЯРНОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ  
АРИЛАЛЬДИМИНОВ ЭТИЛОВОГО ЭФИРА ГЛИЦИНА  
К БИС(СТИРИЛ)СУЛЬФОНАМ**

Шерстнев Н.С., Калязин В.А., Безрукова Е.В., Черноярова А.О.,  
Кострюков С.Г.

*Национальный исследовательский Мордовский государственный  
университет им. Н.П. Огарёва, Саранск, Россия*

Бис(стирил)сульфон и его замещенные аналоги, интересны в качестве субстрата 1,3-диполярного циклоприсоединения поскольку позволяют получить соединения, содержащие активированные акцепторной группой кратные связи. Такие молекулы имеют возможность образования ковалентной связи с центрами-нуклеофилами и могут выступать в качестве потенциальных ковалентных ингибиторов многих ферментов [1].

В данной работе проведено исследование регио- и стереоселективности реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения ариальдиминов этилового эфира глицина к бис(стирил)сульфону и его пара-галогензамещенным производным.



Взаимодействие дивинилсульфонов **1-3** с эквимольным количеством ариальдиминов **4a-c** проводилось в толуоле в инертной атмосфере аргона, без доступа света, при добавлении ацетата серебра и полуторакратного избытка триэтиламина, см. [2]. Ход реакции контролировали методом ТСХ. Было обнаружено, что кроме основного продукта, 3,5-диарилпролинов **5a-c**, **7a-c** и **9a-c** (90–93%), образуются еще минорные (~7–10%) изомеры **6a-c**, **8a-c** и **10a-c**. Полученные циклоаддукты **5a-c** – **10a-c** были выделены методом флеш-хроматографии (элюент – легкий петролейный эфир–МТБЭ) и охарактеризованы методами ИК, ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C спектроскопии. Строение региоизомеров устанавливали методами корреляционной ЯМР-спектроскопии.

#### Литература

- Jaudzems K., Kurbatska V., Jēkabsons A., et al. Targeting Bacterial Sortase A with Covalent Inhibitors: 27 New Starting Points for Structure-Based Hit-to-Lead Optimization // ACS Infect. Dis. 2020. V. 6. № 2. P. 186–194. doi 10.1021/acsinfectdis.9b00265/
- Blaney P., Grigg R., Rankovic Z., et al. Fused and bridged bi- and tri-cyclic lactams via sequential metallo-azomethine ylide cycloaddition–lactamisation // Tetrahedron. 2002. V. 58. № 9. P. 1719–1737. doi 10.1016/S0040-4020(02)00029-7.

© Шершнеv Н.С., Калязин В.А., Безрукова Е.В., Черноярoва А.О., Кострюков С.Г., 2024

УДК 577.29

### ОЦЕНКА СПЕЦИФИЧНОСТИ НИКАЗЫ N.Bst91 В УСЛОВИЯХ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ АМПЛИФИКАЦИИ

Якшибаева<sup>1</sup> Г.Р., Гарафутдинов<sup>2</sup> Р.Р.

<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Институт биохимии и генетики УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Никующие эндонуклеазы, или никазы распознают определенный участок ДНК, сайт узнавания, и расщепляют одну из цепей в определенном месте относительно него. Принято считать, что никазы, как и прочие эндонуклеазы, специфично связываются с ДНК-мишенью. Никаза N.Bst91

распознает сайт 5'-GAGTC-3'/5'-GACTC-3' и вносит разрыв на расстоянии четырех пар оснований от него.

Нами оценено взаимодействие N.Bst9I с ДНК-матрицами разного нуклеотидного состава, содержащими мотивы GAGTC (сайт узнавания N.Bst9I), олиго-dC<sub>n</sub>, олиго-d(AT)<sub>n</sub>, олиго-dT<sub>n</sub>, олиго-dA<sub>n</sub>, олиго-d(AG)<sub>n</sub>, олиго-d(CT)<sub>n</sub>, которые располагались как по центру матрицы, так по ее 5'-концу. Реакционные смеси содержали 10<sup>3</sup> копий матрицы, амплификацию вели с помощью ДНК-полимеразы Bst LF в изотермическом (при 60°C) режиме. Нарботка продуктов амплификации наблюдалась для всех матриц только в присутствии N.Bst9I, что свидетельствует о протекании в этом случае неспецифической амплификации.

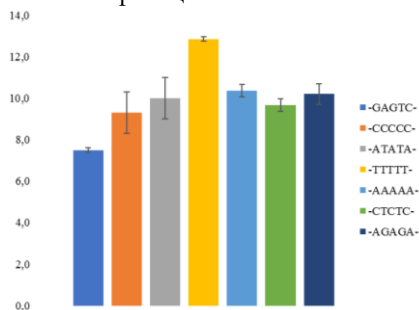


Диаграмма 1. Пороговое время, найденное для ДНК-матриц разного нуклеотидного состава.

Значения порогового времени наибольшие для матриц, содержащих мотивы олиго-dT<sub>n</sub>, наименьшие для матриц, содержащих мотивы GAGTC, олиго-dC<sub>n</sub>.

© Якшибаева Г.Р., Гарафутдинов Р.Р., 2024

УДК 577.332

## ИССЛЕДОВАНИЕ СВЯЗЫВАНИЯ НИКУЮЩЕЙ ЭНДОНУКЛЕАЗЫ N.BspD6I С ПЕНТАНУКЛЕОТИДАМИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Якшибаева<sup>1</sup> Г.Р., Купова<sup>2</sup> О.Ю., Гарафутдинов<sup>2</sup> Р.Р.

<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Институт биохимии и генетики УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Никующие эндонуклеазы, или никазы, относятся к классу нуклеаз. Никазы расщепляют одну из цепей ДНК, верхнюю или нижнюю. Сама по себе никующая эндонуклеаза представляет собой одну из субъединиц эндонуклеазы рестрикции. Никаза N.BspD6I узнает последовательность GAGTC и вносит разрыв на расстоянии 4 пар оснований от него. Считается,



что никазы обладают высокой специфичностью, благодаря чему используются в методах изотермической амплификации.

В связи с недостатком данных, позволяющих судить о строении активного центра никазы N.BspD6I, было проведено исследование, направленное на оценку специфичности связывания фермента с нуклеотидными последовательностями определенного состава с помощью методов молекулярного моделирования. Для определения возможных сайтов узнавания на структуру никазы N.BspD6I была наложена структура эндонуклеазы рестрикции BpuI с уже известным сайтом узнавания, после чего в полученном при наложении сайте узнавания был проведен докинг фрагментов ДНК. Изучалось связывание N.BspD6I и следующих одноцепочечных пентануклеотидов: GAGTC, GACTC, CCCCC, TTTTT, GCGCG, AGAGA, ATATA, GGGGG, AAAAA, GTGTG и ACACA. Моделирование велось с оптимизацией и без оптимизации конформации фрагментов ДНК. Энергетически наиболее выгодными оказались комплексы, представленные в таблице 1.

Таблица 1

Энергетические параметры связывания некоторых фрагментов ДНК с сайтом узнавания никазы N.BspD6I.

Нуклеотидная последовательность	docking score, ккал/моль	
	без оптимизации	с оптимизацией
CCCCC	-5.867	-10.591
GAGTC	-5.750	-10.329
ACACA	-5.368	-12.881
GTGTG	-6.494	-8.200

Найдено, что в предполагаемом сайте узнавания ионные и водородные связи образуют Lys4, Tyr8, Arg70, Asp71, Lys77, Gln122, Lys124, Glu127, Lys230, Asn233.

©Якшибаева Г.Р, Купова О.Ю., Гарафутдинов Р.Р., 2024

УДК 547-326

## СИНТЕТИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ $\beta$ -СИТОСТЕРОЛА ПО ЦИКЛУ А Янтилина<sup>1</sup> Э.З, Миннибаева<sup>1</sup> Э.М., Петрова<sup>2</sup> А.В.

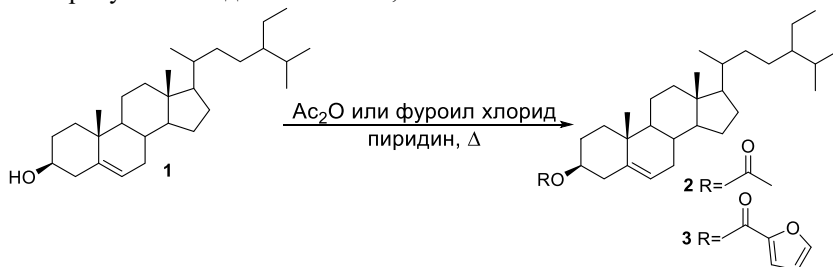
<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский Институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

В настоящее время при разработке методов профилактики и лечения социально значимых заболеваний особую важность приобретают природные биологически активные соединения растительного происхождения. Значительное место отводится веществам класса стероидов, которые обладают широким спектром фармакологического действия, при этом

практически не имеют побочных эффектов [1]. Среди всех представителей наименее изучен  $\beta$ -ситостерол **1**, ввиду чего сведения об активности функционализированных аналогов практически отсутствуют.

Нами получены новые производные  $\beta$ -ситостерола **1**, модифицированные по С3-гидроксильной группе, используя *O*-содержащие реагенты, улучшающие фармакологический профиль молекулы. Реакция с уксусным ангидридом или фууроилхлоридом в пиридине при кипячении привело к образованию 3-*O*-ацетокси-ситостеролу **2** или 3-*O*-фууроилокси-ситостеролу **3** с выходами 97 и 91%, соответственно.



Строение полученных производных было подтверждено методом ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  спектроскопии. Так, в спектрах ЯМР  $^{13}\text{C}$  соединений **2** и **3** наблюдалось смещение сигнала С3-углеродного атома в более слабое поле  $\delta$  (71.84 $\rightarrow$ 74.00 м.д.). Кроме того, наблюдались сигналы в области 170.51 м.д. и 158.20 м.д., соответствующие карбонильным атомам углерода в полученных соединениях.

#### Литература

1. Piironen V. et al. Plant sterols: biosynthesis, biological function and their importance to human nutrition // Journal of the Science of Food and Agriculture. -2000- V.80(2)-p. 939-966.

©Янтилина Э.З., Миннибаева Э.М., Петрова А.В., 2024

**СЕКЦИЯ**  
**«АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»**

РАЗРАБОТКА СЕНСОРА НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНО  
ИМПРИНТИРОВАННОГО ПОЛИПИРРОЛА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ  
БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Абдуллин Я.Р., Назыров М.И.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Электрохимические сенсоры, базирующиеся на молекулярно импринтированных полимерах (МИП), представляют собой весьма перспективные инструменты для проведения быстрого и селективного мониторинга. Они обладают такими преимуществами, как молекулярная селективность, возможность многократного использования и стабильность в физико-химическом отношении [1]. МИП представляют собой полимерные структуры, которые эмулируют специфическое взаимодействие "ключ-замок". Процесс полимеризации МИП обычно происходит в сложной смеси, включающей мономер, инициатор, сшиватель и шаблон, соответствующий анализируемому объекту. После завершения полимеризации молекула-шаблон удаляется, оставляя за собой связывающие участки, которые имеют аналогичные размеры, форму и набор функциональных групп с аналитом.

В данной исследовательской работе был создан сенсор на основе стеклоглеродного электрода, который был модифицирован электрохимически синтезированным молекулярно импринтированным полипирролом (miPPy) для дальнейшего определения энантиомеров биологически активных веществ. Синтез полипиррола проводился методом циклической вольтамперометрии в диапазоне потенциалов от 0 до 1 В при скорости развертки 100 мВ/с за три цикла в растворе, содержащем 100 мМ LiClO<sub>4</sub>, 1.5 мМ пиррола и 0.5 мМ энантиомера биологически активного вещества. Предложенный сенсор был разработан с целью анализа энантиомеров таких веществ, как триптофан, пропранолол, атенолол и клопидогрел. Синтезированную пленку miPPy исследовали при помощи циклической вольтамперометрии, спектроскопии электрохимического импеданса и сканирующей электронной микроскопии. Кроме того, были изучены аналитические характеристики данного сенсора, включая его селективность по отношению к схожим по структуре веществам, а также воспроизводимость результатов измерений при анализе вещества в биологических жидкостях, таких как плазма крови и моча.

## Литература

1. Yarkaeva Yu.A., Dymova D.A., Nazyrov M.I., Zagitova L.R. [et al.] Voltammetric sensor based on molecular imprinted polymer for lincomycin detection. –Chim. Tecno Acta, 2023. – V.10., No. 202310210. DOI: 10.15826/chimtech.2023.10.2.10.

© Абдуллин Я.Р., Назыров М.И., 2024

УДК 543.552

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЛЕВОФЛОКСАЦИНА  
С ПОМОЩЬЮ СЕНСОРА НА ОСНОВЕ ОКСИДА ГРАФЕНА И  
ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОГО ФУЛЛЕРЕНА В ПРОДУКТАХ  
ПИТАНИЯ

Абрамов И.А., Гайнанова С.И.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Антибиотики – один из важнейших классов лекарственных соединений, широко используемый для лечения и профилактики инфекционных заболеваний не только у людей, но и у крупного рогатого скота и птиц. Однако несоблюдение дозировок применяемых препаратов и отсутствие контроля времени выведения лекарства перед забоем приводит к накоплению антибиотиков в мясе животных. Также антибактериальные препараты добавляются непосредственно в продукты питания, например, в молоко и сливки. Вследствие этого возрастает потребность в разработке новых чувствительных методов анализа. Перспективным является использование модифицированных вольтамперометрических сенсоров, позволяющих уменьшить время анализа и пробоподготовки при сохранении необходимой чувствительности и селективности.

Наше исследование направлено на определение левофлоксацина (Лев) в молоке и мясе с помощью вольтамперометрического сенсора, разработанного ранее [1], с углеродсодержащей подложкой восстановленного оксида графена (ВОГ), способствующей увеличению аналитического сигнала, и чувствительным слоем на основе S-N,N'-бис(1-фенилэтил)малонамида фуллерена (S-C60MA), обеспечивающего селективное взаимодействие с молекулой аналита [2].

Предварительно проведено количественное определение Лев методом дифференциально-импульсной вольтамперометрии с использованием сенсора СУЭ/ВОГ/S-C60MA. При построении градуировочного графика наблюдалось две линейные зависимости в диапазоне концентраций  $1.0 \cdot 10^{-6} - 6.0 \cdot 10^{-5}$  и  $6.0 \cdot 10^{-5} - 5.0 \cdot 10^{-4}$  М, описываемые уравнениями  $i_p = (107 \pm 2)C + (0.13 \pm 0.06)$  ( $R^2 = 0.998$ ) и  $i_p = (58.0 \pm 0.3)C + (2.7 \pm 0.1)$  ( $R^2 = 1$ ) соответственно. Пределы обнаружения и количественного определения, рассчитанные по  $3S_b/m$  и  $10S_b/m$  критериям, составили  $1.8 \cdot 10^{-7}$  и  $6.04 \cdot 10^{-7}$  М соответственно.

Определение Лев в молоке и мясе проводилось методом «введено-найденно». Сенсор правильно определил концентрацию Лев в исследуемых растворах, относительное стандартное отклонение составило 0.7 – 8.0%, степень открытия в пределах 87.6 – 102.2%. Таким образом, подтверждена возможность применения разработанного сенсора для определения Лев в продуктах питания животного происхождения.

На данный момент продолжается исследование по созданию и применению новых селекторов на основе функционализированного фуллерена для определения антибиотиков группы амфеникола в продуктах питания.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №22-73-00073, <https://rscf.ru/project/22-73-00073/>.*

#### Литература

1. L.R. Zagitova, I.A. Abramov, V.V. Zagitov, S.I. Gainanova, V.N. Maistrenko, Effect of the chiral blocks of functionalized fullerene on levofloxacin enantioselective voltammetric sensing, *J. Electroanal. Chem.* 940 (2023) 117508, <https://doi.org/10.1016/j.jelechem.2023.117508>.
2. И.А. Абрамов, С.И. Гайнанова, Л.Р. Загитова, В.Н. Майстренко, Вольтамперометрическое определение левофлоксацина в мясе и молоке с использованием сенсора на основе электровосстановленного оксида графена и функционализированного фуллерена, *Журн. аналит. химии.* 79 (2024).

© Абрамов И.А., Гайнанова С.И., 2024

УДК 665.63(675.8)

### ИССЛЕДОВАНИЕ ГРУППОВОГО СОСТАВА НЕФТЯНЫХ СУЛЬФОКСИДОВ И СУЛЬФОНОВ МЕТОДОМ

### ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОГО РАЗДЕЛЕНИЯ НА СИЛИКАГЕЛЕ

Аврамович Д.Д., Шарифуллин А.В., Гимадетдинова Р.Ф., Зарифьянова М.З.  
*ФГБОУ ВО Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия*

Окислительная десульфуризация дистиллятных фракций с получением нефтяных сульфоксидов и сульфонов является альтернативой промышленному процессу гидроочистки. Для оценки качества получаемых нефтяных сульфоксидов и сульфонов необходимо знать групповой состав сырья и продуктов по всем стадиям процесса. В качестве сырья использовали дизельную фракцию 220-350°C ашальчинской сверхвязкой нефти. Методы получения сульфоксидных и сульфонных оксидатов, а также их физико-химические показатели, представлены в работе [1]. Органическая фаза сульфонного оксидата разделилась на светлую часть – легкий сульфонный оксидат и темную часть – тяжелый сульфонный оксидат, представляющий собой смолообразный осадок с выходом 4,5 мас % на исходную дизельную фракцию.

Структурно-групповой состав дизельной фракции, сульфоксидного и сульфонных оксидатов определяли элюентно-хроматографическим методом. Активированный силикагель АСКГ (размер зерен 70-200 меш) загружали в стеклянную колонку с внутренним диаметром 3-4 мм до высоты 950 мм.

Навеску оксидата в количестве 0,15-0,25 г растворяли в 1 см<sup>3</sup> н-гексана и заливали в хроматографическую колонку. Градиентное элюирование образцов проводили последовательной подачей увеличивающихся по полярности растворителей: н-гексан – 3 см<sup>3</sup>, хлористый метилен – 2,5 см<sup>3</sup>, бензол – 2 см<sup>3</sup>, этиловый спирт – 7 см<sup>3</sup>. Фракции элюата отбирали в 16 предварительно взвешенных пробирок по 30 капель в каждую. В пробирки № 1-6 отделяли парафино-нафтенный элюат, в пробирки № 7-15 сливали ароматический элюат, в пробирку № 16 собирали этиловый спирт с растворенными в нем полярными соединениями (нефтяными кислотами, сульфоксидами, сульфонами). Растворители отдували азотом, пробирки с элюатами термостатировали и взвешивали. На дне пробирки № 16 после отгонки этилового спирта оставался концентрат сульфоксидов или сульфонов. Количественное содержание различных групп соединений исследуемых оксидатов и их хроматограммы разделения приведены в табл. 1 и на рис. 1.

Для идентификации полученных фракций элюатов были сняты их ИК-спектры на спектрофотометре «Spectrum-71 IR» в диапазоне частот 4000-400 см<sup>-1</sup>. ИК-спектр 1-ой фракции элюата показал присутствие только парафиновых и нафтенных углеводородов. На ИК-спектре 2-ой фракции элюата помимо сильно выраженных полос поглощения метильных и метиленовых групп наблюдалась полоса присутствия ароматической группы. ИК-спектр 3-го сульфоксидного элюата характеризуется полосой поглощения при 1030 см<sup>-1</sup>, соответствующей валентным колебаниям >S=O-группы. На ИК-спектре 4-го сульфонного элюата наблюдаются сильные по интенсивности полосы поглощения в области частот 1290 см<sup>-1</sup> и 1120 см<sup>-1</sup>, отвечающие деформационным колебаниям >SO<sub>2</sub>-группы [2].

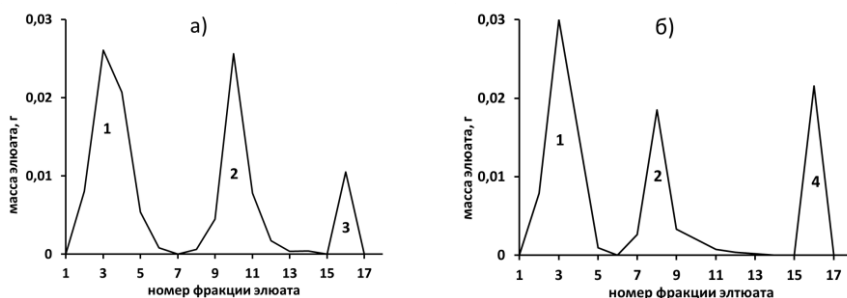


Рис. 1. Хроматограммы жидкостно-адсорбционного разделения оксидатов дизельной фракции 220-350°C: а) сульфоксидного; б) легкого сульфонного

Таблица 1

Структурно-групповой состав дизельной фракции 220-350°С ашальчинской сверхвязкой нефти и ее оксидатов

Показатели	Фракция 220-350°С	Сульфок- сидный оксидат	Сульфонный оксидат	
			легкий	тяжелый
Содержание, мас. %: общая сера	1,57	1,39	1,27	7,79
парафино-нафтеновые углев.	54,75	53,62	51,73	11,79
ароматические углеводороды	41,76	37,14	27,40	14,47
полярные соединения	3,49	9,24	20,87	73,74

#### Литература

1. Аврамович Д.Д., Ульянов Д.В., Шарифуллин А.В. и др. Получение нефтяных сульфоксидов и сульфонов как биологически активных соединений /Сборник тезисов VII Всероссийской молодежной конференции «Проблемы и достижения химии кислород- и азотсодержащих биологически активных соединений» – Уфа: РИЦ УУНиТ, 2023. – С. 6-7.
  2. Зарифянова М.З., Исламова Г.Г., Харлампиди Х.Э. и др. Получение нефтяных сульфонов из среднестиллятных фракций ашальчинской сверхвязкой нефти / Вестник технологического университета. – 2019. – Т. 22. – № 11. – С. 59-64.
- © Аврамович Д.Д., Шарифуллин А.В., Гимадетдинова Р.Ф., Зарифянова М.З., 2024

УДК 543.421:631.416

### ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВАЛОВОГО СОДЕРЖАНИЯ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ В ПОЧВАХ ПРИСУЛАКСКОЙ НИЗМЕННОСТИ АТОМНО- АБСОРБЦИОННОЙ СПЕКТРОМЕТРИЕЙ

Азиева<sup>1,2</sup> Д.С., Каспарова<sup>1</sup> М.А.

<sup>1</sup>Дагестанский государственный университет, Махачкала, Россия

<sup>2</sup>Дагестанский федеральный исследовательский центр РАН,  
Махачкала, Россия

Контроль содержания тяжелых металлов (ТМ) в почве является актуальной эколого-аналитической задачей в почвоведении. Для этой цели наиболее широко используют атомно-абсорбционную спектрометрию.

Целью данного исследования является определение содержания ТМ в основных типах почв Присулакской низменности, отобранных в 2023 году. Отбор пробы почвы и подготовку к анализу проводили согласно ГОСТ 17.4.4.02 [1].

Определение ТМ в пробах почв проводили по методике [2] с использованием высокоточного атомно-абсорбционного спектрометра contra 700 (Analytik jena, Германия).



Результаты определения валового содержания ТМ в почвах  
Присулакской низменности

Тип почвы	Содержание, г/кг						
	Mn	Co	Ni	Cu	Zn	Cd	Pb
Светло-каштановая	94±2	8.2±0.2	1.8±0.1	1.6±0.5	Не обн.	Не обн.	1.1±0.6
Лугово-каштановая	50±1	5.0±0.5	8.2±0.7	7.2±0.9	Не обн.	Не обн.	0.2±0.1
Лугово-солончаковая	167±12	0.9±0.2	2.1±0.1	2.3±0.7	Не обн.	Не обн.	1.4±0.2
Фоновое [2]	800	25	58	28	700	-	30
ПДК [2]	1500	-	85	55	100	-	30

Во всех пробах исследованных типов почв: содержание ТМ значительно ниже фонового содержания в каштановых почвах и ПДК [2]; из высокоопасных ТМ обнаружен только свинец, не обнаружены цинк и кадмий.

Проведенное исследование свидетельствует, что почвы Присулакской низменности не загрязнены ТМ.

#### Литература

- ГОСТ 17.4.4.02. Охрана природы. Почвы. Методы отбора и подготовки проб для химического. Москва: Стандартинформ, 2008. – 7 с
- Методические указания по определению тяжелых металлов в почвах сельхозугодий и продукции растениеводства (издание 2-е, переработанное и дополненное). Москва. 1992. 63 с.

© Азиева Д.С., Каспарова М.А., 2024

УДК 665.6.003.28

#### ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ФРАГМЕНТОВ МОЛЕКУЛ НЕФТЯНЫХ АСФАЛЬТЕНОВ МЕТОДОМ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ

Амангельда А.А., Турышева А.И., Ширяева Р.Н.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа,  
Россия*

Известно, что основными структурирующими компонентами в нефтяных дисперсных системах являются асфальтены. Они обладают сложным строением и способны к образованию отложений при добыче, транспортировке и переработке тяжелых нефтей. Для оптимизации добычи нефти требуется информация об их составе. Важное место в изучении строения нефтей занимает ИК-спектроскопия, которая позволяет судить о химическом составе вещества и получать информацию о структурных группах [1, 2].

Целью данной работы являлось изучение состава асфальтенов, выделенных из нефти месторождения Северные Бузачи, методом ИК-спектроскопии. Нефть характеризуется высоким содержанием парафинафтеновых углеводородов (34,4 % масс.), ароматических углеводородов (48,0 % масс.), смол (15,6 % масс.) и асфальтенов (2,0 % масс.).

ИК-спектры нефти и выделенных из нее асфальтенов SARA- методом снимали на спектрометре фирмы «Shimadzu» в диапазоне 650-4000  $\text{см}^{-1}$ . В спектре нефти наблюдаются полосы деформационных (1380  $\text{см}^{-1}$ ) и валентных (2850  $\text{см}^{-1}$ ) колебаний, характерных для метильной группы, и колебания при 1360, 2920, 2908  $\text{см}^{-1}$  - для метиленовых групп. В спектре асфальтенов уменьшается интенсивность полос: 2920, 1460, 1380  $\text{см}^{-1}$ . ИК-спектры нефти и асфальтенов содержат также полосы при 1730, 1097  $\text{см}^{-1}$ , свидетельствующие о присутствии в их структуре кислородсодержащих фрагментов. В спектре асфальтенов при 3400  $\text{см}^{-1}$  содержится широкая полоса, характерная для колебаний ОН- и NH- групп.

По стандартным методикам были определены спектральные коэффициенты для нефти и асфальтенов: ароматичности ( $A_{1600}/A_{720}$ ), окисленности ( $A_{1710}/A_{1460}$ ), разветвленности ( $A_{1380}/A_{1460}$ ), алифатичности ( $A_{720} + A_{1380}/A_{1600}$ ) и осерненности ( $A_{1030}/A_{1460}$ ). Выявлено, что для асфальтенов коэффициент ароматичности, окисленности, осерненности значительно выше, чем для нефти. Коэффициент алифатичности составляет для нефти и асфальтенов 1,85 и 1,17 соответственно. Асфальтены, выделенные гептаном, в отличие от гексановых асфальтенов являются более ароматичными и окисленными.

Таким образом, полученные с помощью ИК-спектроскопии сведения об особенностях состава нефти и асфальтенов могут быть полезными при рассмотрении технологических задач, в частности при подборе реагентов для улучшения реологических свойств нефти, а также при разработке рецептуры полимерных композиционных материалов на основе асфальтенов.

#### Литература

1. Ганеева Ю.М., Юсупова Т.Н., Романов Г.В. Асфальтеновые наноагрегаты: структура, фазовые превращения, влияние на свойства нефтяных систем // Успехи химии. 2011. №10.
2. Ширяева Р.Н., Сагитова Ч.Х., Бадикова А.Д., Цадкин М.А. Состав и структурные особенности асфальтенов тяжелой нефти. // Вестник Башкирского университета. 2020. Т.25. №1.

© Амангельда А.А., Турышева А.И., Ширяева Р.Н., 2024

УДК 544.543

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ КАРОТИНА И ЛЮТЕИНА В ТЫКВЕ МЕТОДОМ ТОНКОСЛОЙНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Андреева И.И., Гайнуллина Ю.Ю.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Каротиноиды – класс природных пигментов, синтезируемые, в основном, растениями. Они имеют высокую биологическую активность и обладают антиоксидантным действием. Класс каротиноиды насчитывает примерно 600 соединений, из которых около 40 поступают в организм человека с пищей. Для человеческого организма главными являются каротины -  $\beta$ -каротин и его изомеры, ликопин и ксантофиллы - лютеин, зеаксантин,  $\beta$ -криптоксантин. Свежие овощи содержат каротиноидов больше, чем плоды и ягоды, но обладают низкой биодоступностью. Основными источниками каротиноидов среди являются морковь, шпинат, облепиха, тыква.

Установлено, что метод тонкослойной хроматографии (ТСХ) успешно используется исследователями для определения и разделения каротиноидов в различных растительных продуктах питания, травах, настойках, сиропах и в других лекарственных препаратах (ЛП).

По литературным данным известно, что в состав тыквы входят биологически активные вещества. На содержание каротиноидов в тыкве влияют погодные и климатические условия, состав почвы, культивирование - вид и сорт тыквы, а также анализируемая часть растения. Установлено, что наиболее часто в состав тыкв входят лютеин и  $\beta$ -каротин, но также они могут содержать ликопин,  $\alpha$ -каротин, зеаксантин, виолаксантин и другие каротиноиды.

В настоящей работе объектом исследования служили образцы тыквы сорта Улыбка, относящегося к виду Крупноплодные. Процедура пробоподготовки включала в себя извлечение образцов мякоти и кожуры тыквы в хлороформе. В данной работе продемонстрированы возможности использования метода ТСХ для исследования каротиноидного состава тыквы. Для исследования были использованы готовые пластины Силуфол – алюминийевая фольга, на которую нанесён специальный силикагель. В качестве системы растворителей применяли смесь ацетон – гексан (1:10).

Анализ определил, что в тыкве сорта Улыбка вида Крупноплодные содержит  $\beta$ -каротин,  $\alpha$ -каротин, лютеин. При этом содержание каротиноидов в кожуре и мякоти примерно одинаковое.

© Андреева И.И., Гайнуллина Ю.Ю., 2024

УСТАНОВЛЕНИЕ КАРОТИНОИДНОГО СОСТАВА ТЫКВЫ  
РОССИЯНКА

Андреева И.И., Гайнуллина Ю.Ю.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Каротиноиды – класс структурно и функционально различных растительных липофильных пигментов, синтезируемых растениями, грибами и микроорганизмами. Каротиноиды подразделяются на два подкласса: каротины и ксантофиллы. Первые представляет собой чистые углеводороды – тетратерпены и являются красно-оранжевыми пигментами. К ним относятся  $\beta$ -каротин и его изомеры. Ксантофиллы - окисленные соединения. В их состав входит одна или несколько атомов кислорода. Это жёлтый пигмент. Представителями этой группы являются лютеин и виолаксантин.

Так как организм человека не способен самостоятельно вырабатывать каротиноиды, то вынужден получать их вместе с пищей. Продуктами, в содержание которых входят каротиноиды, являются морковь, шпинат, облепиха, абрикосы, помидоры и тыква. На сегодняшний день определение, разделение и извлечение каротиноидов из продуктов питания является актуальной задачей, ведь каротиноиды нашли широкое применение в медицине и фармацевтике. Каротины обладают сильными антиоксидантными свойствами, ксантофиллы же снижают риск дегенерации жёлтого пятна и спасают глаза от ультрафиолетовых и синих лучей. Использование растительного сырья позволяет изготавливать лекарственные препараты, содержащие каротиноиды, а разработка новых методов разрешает извлекать их с минимальными потерями.

Объектом исследования работы служили образцы тыквы сорта Россиянка, относящегося к виду *Cucurbita maxima*. Для извлечения каротиноидов кожуру и мякоть тыквы по отдельности растворяли в ацетоне. Анализ проводили методом тонкослойной хроматографии с использованием пластин Силуфол с подложкой из алюминиевой фольги с нанесённым на поверхность силикагелем. Элюентом служила система растворителей ацетон – гексан (1:10).

И в кожуре, и в мякоти тыквы сорта Россиянка вида *Cucurbita maxima* были обнаружены ксантофиллы (лютеин, виолаксантин) и каротин ( $\beta$ -каротин).

© Андреева И.И., Гайнуллина Ю.Ю., 2024

ИССЛЕДОВАНИЕ КАРОТИНОИДНОГО СОСТАВА ТЫКВ ВИДА  
CUCURBITA MAXIMA МЕТОДОМ ТОНКОСЛОЙНОЙ  
ХРОМАТОГРАФИИ

Андреева И.И., Гайнуллина Ю.Ю.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Каротиноиды – класс структурно и функционально различных растительных липофильных пигментов, синтезируемых высшими растениями. Класс каротиноиды насчитывает примерно 600 различных соединений. Из них наиболее распространёнными и значимыми являются β-каротин, лютеин, α-каротин, ликопин. В растениях каротиноиды выполняют следующие функции: участвуют в фотосинтезе, транспорте кислорода через клеточные мембраны, защите хлорофилла от фотоокисления.

Человек нашёл применение каротиноидам в качестве лекарственных препаратов, пищевых красителей, кормов для животных. Они также важны для поддержания здоровья человека. Ликопин, β- и α-каротины обладают сильным антиоксидантным эффектом, лютеин и зеаксантин снижают риск дегенерации жёлтого пятна и спасают глаза от ультрафиолетовых и синих лучей. Однако, в отличие от растений и некоторых микроорганизмов, человеческий организм не способен самостоятельно синтезировать каротиноиды и вынужден получать их вместе с пищей. Продуктами, наиболее богатыми этими ценными пигментами, являются морковь, шпинат, облепиха, абрикосы, помидоры и тыква. На сегодняшний день определение, разделение и извлечение каротиноидов из продуктов питания является актуальной задачей.

Все существующие тыквы подразделяются на 3 вида, самый многочисленный из которых Крупноплодные, или *Cucurbita maxima*. Объектом исследования работы служили образцы тыквы сорта Атланта, относящегося к виду *Cucurbita maxima*. Процесс извлечения мякоти и кожуры тыквы по отдельности проводили в гексане. Для определения каротиноидов использовали метод тонкослойной хроматографии. В качестве неподвижной фазы применяли готовые пластины Силуфол, состоящие из алюминиевой фольги с нанесённым на поверхность силикагелем. Была использована система растворителей ацетон – гексан (1:10).

И в кожуре, и в мякоти тыквы сорта Атланта вида *Cucurbita maxima* удалось обнаружить: β-каротин, лютеин, ликопин. Зеаксантин был выявлен только в кожуре данной тыквы.

© Андреева И.И., Гайнуллина Ю.Ю., 2024

Каротиноиды – класс растительных пигментов, насчитывающий около 600 видов соединений, среди которых  $\beta$ -каротин,  $\alpha$ -каротин, нейреспорин, лютеин, зеаксантин, ликопин, виолаксантин и другие. Они содержатся не только во многих плодах растений: в ягодах, фруктах, овощах, - но и в других их частях. Организм человека не способен самостоятельно вырабатывать каротиноиды, но потребляет вместе с пищей около 50 из них.

Каротиноиды обладают высокой антиоксидантной активностью. Лекарственные препараты на их основе применяют для борьбы с такими заболеваниями как сердечно-сосудистые, онкология, диабет, болезни печени и др. Именно поэтому многие исследователи занимаются разработкой способов извлечения каротиноидов из различных продуктов питания. Для этой цели удобным и часто применяемым методом является метод тонкослойной хроматографии, способный одновременно дать и качественное, и количественное определение.

По литературным данным известно, что состав тыквы богат биологически активными веществами. На содержание каротиноидов в тыкве влияют погодные и климатические условия, состав почвы, культивирование - вид и сорт тыквы, а также влияние оказывает исследуемый орган и часть растения.

В данной работе объектом исследования являются образцы мякоти и кожуры тыквы сорта Конфетка, относящегося к виду Крупноплодные. Известно, что крупноплодные тыквы отличаются своими большими размерами и устойчивостью к холоду. Процесс извлечения мякоти и кожуры тыквы по отдельности проводили в ацетоне. Для определения каротиноидов использовали метод тонкослойной хроматографии. В качестве неподвижной фазы применяли готовые пластины Силуфол, состоящие из алюминиевой фольги с нанесённым на поверхность силикагелем. Системой растворителей в данной работе служила смесь ацетон – гексан (1:10).

В результате анализа было выявлено, что мякоть исследуемой тыквы содержит лютеин. В кожуре же были обнаружены лютеин,  $\beta$ -каротин, зеаксантин. Таким образом, кожура тыквы сорта Конфетка вида Крупноплодные содержит большее количество каротиноидов и является более ценным источником для их извлечения.

УДК 544.543

ИССЛЕДОВАНИЕ КАРОТИНОИДНОГО СОСТАВА ТЫКВ  
ТВЁРДОКОРОГО ВИДА МЕТОДОМ ТОНКОСЛОЙНОЙ  
ХРОМАТОГРАФИИ

Андреева И.И., Гайнуллина Ю.Ю.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Каротиноиды – класс растительных пигментов, производных изопрена, синтезируемых растениями, грибами и бактериями. Они определяют цвет плодов и ягод многих растений, а также окраску листьев осенью.

Каротиноиды обладают антиоксидантной, антиканцерогенной, радиопротекторной, фотопротекторной активностью, являются источниками витамина А. Такой ряд достоинств определяет использование каротиноидов в лекарственных (ЛП) и лечебно-профилактических препаратах (ЛПП). ЛП и ЛПП, содержащие каротиноиды широко применяются в борьбе с онкологическими, сердечно-сосудистыми заболеваниями, сахарном диабете, для понижения воспаления в тканях, повышая эпителизацию поврежденной поверхности, повышают иммунитет и др. На сегодняшний день исследования каротиноидного состава ЛП, фруктов и овощей являются актуальной задачей.

Тыква является одним из основных источников каротиноидов, поступающих в организм человека с пищей. Известно, что общее содержание каротиноидов и их состав в тыкве зависят от вида и культивирования, почвенно-климатических условий, части растения (мякоти, кожуры, плаценты или семян), процедур экстракции и типа растворителя, используемого для экстракции.  $\beta$ -каротин является основным каротиноидом, входящим в состав большинства видов тыкв. В тыквах также содержатся  $\alpha$ -каротин, лютеин, зеаксантин и другие. Использование каротиноидов при разработке функциональных продуктов питания было темой многих разносторонних исследований в последние годы, поскольку они придают значительную ценность продуктам, которые обладают многочисленными полезными свойствами для здоровья.

В настоящей работе исследованы образцы тыкв твёрдокорого вида. К ним относится – сорт Кустовая оранжевая. В данной работе показаны возможности использования метода тонкослойной хроматографии для исследования каротиноидного состава тыквы Кустовая оранжевая. Мякоть и кожуру тыквы по отдельности извлекали в гексане. Для исследования были использованы пластины Силуфол – алюминиевая фольга, на которую нанесён специальный силикагель. В качестве подвижной фазы была использована система растворителей диэтиловый эфир – петролейный эфир (3:1). И в мякоти, и в кожуре тыквы твёрдокорого вида сорта Кустовая оранжевая были обнаружены  $\beta$ -каротин, лютеин, зеаксантин, виолаксантин

ликопин. Также было выявлено, что содержание каротиноидов в кожуре превышает их содержания в мякоти.

© Андреева И.И., Гайнуллина Ю.Ю., 2024

УДК 544.543

ИССЛЕДОВАНИЕ КАРОТИНОИДНОГО СОСТАВА ТЫКВ  
МУСКАТНОГО ВИДА МЕТОДОМ ТОНКОСЛОЙНОЙ  
ХРОМАТОГРАФИИ

Андреева И.И., Гайнуллина Ю.Ю.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Каротиноиды пищевых продуктов растительного происхождения – растительные пигменты. Последние обладают биологической активностью и антиоксидантными свойствами. Из 40 каротиноидов, поступающих с пищей, главными являются каротины -  $\beta$ - и  $\alpha$ -каротины, ликопин и ксантофиллы - лютеин, зеаксантин,  $\beta$ -криптоксантин. Свежие овощи содержат каротиноидов больше, чем плоды и ягоды, но обладают низкой биодоступностью. Основными источниками каротиноидов среди овощей являются морковь, плодовые и салатно-шпинатные овощи, а также тыква. Исследования показали, что с помощью метода ТСХ можно получить важную информацию о составе растительных сред. На сегодняшний день метод ТСХ является универсальным методом анализа пищевых продуктов и природного сырья.

По литературным данным установлено, что общее содержание каротиноидов и состав каротиноидов в тыкве зависят главным образом от вида и культивирования, почвенно-климатических условий, части растения (мякоти, кожуры или семян), процедур экстракции и типа растворителя, используемого для экстракции. Основными каротиноидами, обнаруженными в тыкве, были  $\beta$ -каротин,  $\alpha$ -каротин, лютеин и зеаксантин.  $\beta$ -каротин является основным каротиноидом в большинстве видов тыквы. Использование каротиноидов при разработке функциональных продуктов питания было темой многих разносторонних исследований в последние годы, поскольку они придают значительную ценность продуктам, которые обладают многочисленными полезными свойствами для здоровья. В связи с этим тыква и тыквенные субпродукты могут служить ценным источником каротиноидов.

В настоящей работе исследованы образцы тыкв мускатного вида. К ним относится – сорт Матильда. В данной работе показаны возможности использования метода тонкослойной хроматографии для исследования каротиноидного состава тыквы Матильда. Для исследования были использованы пластины Силуфол – алюминиевая фольга, на которую



нанесён специальный силикагель. В качестве подвижной фазы была использована система растворителей диэтиловый эфир – петролейный эфир (3:1). В мякоти тыквы мускатного вида сорта Матильда были обнаружены  $\beta$ -каротин,  $\alpha$ -каротин, лютеин, ликопин. В кожуре удалось выявить  $\beta$ -каротин, лютеин, ликопин.

© Андреева И.И., Гайнуллина Ю.Ю., 2024

УДК 543.5(076)

## ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДРЕВЕСНОЙ ЗОЛЫ В КАЧЕСТВЕ УДОБРЕНИЯ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ВИДОВ СУБСТРАТОВ

Аникаева О.А., Трубачева Л.В.

*Удмуртский государственный университет, Ижевск, Россия*

Субстраты – это комплексы почв, собранные из различных природных элементов и их альтернатив. Среди них – дерновая земля, перегной, торф, песок и другие. Каждый субстрат соответствует требованиям конкретного растения.

В данной исследовательской работе в качестве объектов исследования применялись разнообразные субстраты в ходе вегетационного эксперимента на пшенице: это почвы различного генезиса и их смеси с древесной золой.

Предварительно в субстратах определено содержание таких компонентов, как хлориды, сульфаты, карбонаты и гидрокарбонаты, цинк, медь, свинец и кадмий.

Если содержание тяжелых металлов не превышает  $10^{-5}$  %, они называются микроэлементами, в том числе цинк и медь. Медь входит в состав голубого белка, который переносит и хранит молекулы кислорода. В растениях она способствует фотосинтезу и углеводному обмену. Роль цинка известна благодаря цинксодержащим ферментам, без которых многие процессы в живых клетках были бы невозможны. Свинец и кадмий являются токсичными веществами и вредны для растений; повышенные концентрации этих элементов могут привести к гибели растений. Изучение загрязнения почв тяжелыми металлами (ТМ) является важной экологической проблемой.

В данном исследовании концентрацию подвижных форм ТМ (цинка, кадмия, свинца и меди) определяли методом инверсионной вольтамперометрии с помощью трехэлектродной электрохимической ячейки и амальгамного электрода в присутствии аммонийно-ацетатного буфера (рН=4,8). Показано, что начальные концентрации ТМ в субстратах не превышали ПДК (Таблица 1), а после посева пшеницы концентрации этих элементов снижались по мере поглощения ТМ растениями. Добавление древесной золы в субстраты в соотношении 1:10 немного увеличивало количество ТМ.

Исследования различных субстратов без древесной золы и с ее добавлением показали, что древесная зола улучшает качество почвы: увеличивает влагоемкость, действует как разрыхлитель и увеличивает количество зеленой массы растений.

После проведения вегетационных опытов было выполнено определение ТМ в корнях и ростках пшеницы, рассчитаны эффекты подавления, которые показали, что добавление древесной золы в субстраты на основе различных типов почв увеличивает рост пшеницы.

Таблица 1

Показатели в анализируемых субстратах

Показатель	Древесная зола	Дерново-подзолистая почва	Тепличный грунт	«Питательный грунт»**	«Торф»***
<b>pH</b>	12,0±0,2	7,2±0,20	7,9±0,2	6,6±0,2	4,4±0,2
<b>Cl, %</b>	0,53 ± 0,04	0,082 ± 0,006	0,079 ± 0,005	0,14 ± 0,01	0,18± 0,01
<b>Zn<sup>2+</sup>, мг/кг</b>	14,0 ± 3,5	8,2± 2,3 / 13±4	12,5± 3,4/ 13±4	3,05 ± 0,85/ 8,2±2,5	3,7 ± 1,0/ 5,6±1,7
<b>Cd<sup>2+</sup>, мг/кг</b>	0,76 ± 0,19	0,051 ± 0,015/ 0,069±0,021	0,095±0,026/ 0,15±0,05	0,029 ± 0,008/ 0,054±0,016	0,026±0,006/ 0,050±0,014
<b>Pb<sup>2+</sup>, мг/кг</b>	0,82 ± 0,21	0,52 ± 0,14/ 0,58±0,15	0,91± 0,24/ 0,98±0,29	0,52± 0,14/ 0,63±0,19	0,98 ± 0,27/ 1,4±0,42
<b>Cu<sup>2+</sup>, мг/кг</b>	4,7 ± 1,2	0,33 ± 0,09/ 1,1±0,3	1,04± 0,29/ 1,1±0,3	0,19 ± 0,05/ 0,26±0,08	0,096 ± 0,022/ 0,26±0,08

\* данные до добавления золы/ данные с добавлением золы

\*\* «Борские грунты» - производитель ООО «Борресурсы», г. Бор

\*\*\* «Торф кислый» - производитель ООО «ПЕРМАГРОБИЗНЕС», г. Пермь

Таблица 2

## Фитотестирование образцов субстратов

Объект	Дерново-подзолистая почва	Тепличный грунт	«Питательный грунт»	«Торф»
Росток, см	28,9	31,2	31,6	31,3
Росток после внесения древесной золы, см	29,2	32,8	32,1	35,0
Эффект торможения (по листкам), %	-1,6	-11,82	-1,0	-5,1
Корень, см	3,9	6,2	4,8	8,9
Корень после внесения древесной золы, см	4,3	7,0	5,3	9,5
Эффект торможения (по корням), %	-10,3	-12,9	-9,4	-6,7

© Аникаева О.А., Трубачева Л.В., 2024

УДК 543.062

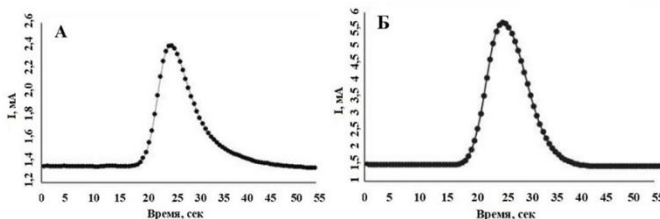
### ОКСИТЕРМОГРАФИЯ – НОВАЯ СТУПЕНЬ В РЕШЕНИИ ПРОБЛЕМЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОРБЦИОННОЙ ЁМКОСТИ ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ

Воробьева<sup>1,2</sup> М.Ю., Зуев<sup>1,3</sup>, Б.К. Философов<sup>2,3</sup> Д.В.<sup>1</sup> *Институт геохимии и аналитической химии им. В.И. Вернадского  
Российской академии наук (ГЕОХИ РАН), Москва, Россия*<sup>2</sup> *Международная межправительственная организация Объединенный  
институт ядерных исследований (ОИЯИ), Дубна, Россия*<sup>3</sup> *Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение  
высшего образования Университет «Дубна», Дубна, Россия*

Пористые материалы находят широкие области применения в различных сферах деятельности человека и научных исследованиях. При изучении их различных характеристик (удельная поверхность, объём пор) предпочтение отдается определению величины, используемой в практических целях – их сорбционной емкости. В настоящее время при исследовании поверхности пористых тел применяют методы, основанные на процессах сорбции-десорбции [1,2]. Наибольшее практическое применение получил метод на основе процессов сорбции и конденсации инертного газа в порах сорбента – метод Брунауэра Эммета-Теллера (метод БЭТ). Однако, все эти методы ставят перед исследователями множество ограничений, в частности, время и стоимость анализа единичного образца. В настоящей работе предлагается новый способ оценки сорбционной ёмкости пористых материалов с применением метода окситермографии [3]. Сущность метода окситермографии заключается в программируемом высокотемпературном

(до 750 °С) окисления органического вещества в потоке инертного газа (или атмосферного воздуха) и количественном определении молекулярного кислорода, затраченного на это окисление (поглощение). Однако, возможна также регистрация выделения кислорода в потоке газа при нагревании образца. На последнем явлении предлагается реализация настоящей идеи.

В качестве пористых материалов для апробации предлагаемого подхода использовали природные сорбенты (цеолиты) клиноптилолиты двух различных месторождений - Хонгуруу и Холинское. Реализация эксперимента осуществлялась следующим образом. Сорбент нагревался в высокотемпературной части реактора в потоке чистого инертного газа (в настоящей работе взят аргон). После чего образец остывал до комнатной температуры, при этом он непрерывно обдувался газовой смесью (чистым воздухом с известным содержанием кислорода с помощью генератора чистого воздуха) в специальном блоке для его обдувки. При остывании происходила сорбция газа исследуемым сорбентом. По достижению сорбционного равновесия образец возвращался в заданную высокотемпературную зону реактора, где происходила десорбция газа, находящегося в объеме образца. При помощи чувствительного сенсора - датчика кислорода, расположенного в потоке газа и за областью нагрева образца, регистрировали десорбируемый из исследуемого пористого материала газ. Кривые выделения кислорода с поверхности образца – окситермограммы. На окситермограмме по оси ординат – ток, количественно характеризующий содержание кислорода, десорбированного с поверхности сорбента. По оси абсцисс представлен промежуток времени,



при котором происходит выделение сорбированного газа исследуемым образцом. На окситермограммах (рис. 1) - положительные пики, интеграл которых характеризует количество десорбированного кислорода.

Рис. 1. Кривые выделения десорбированного кислорода с поверхности цеолита из месторождения Хонгуруу (А), Холинское (Б)

В результате исследований рассчитана масса кислорода, приходящаяся на 1 грамм исследуемых пористых материалов, то есть их сорбционная емкость. Для цеолита из месторождения Хонгуруу составило  $(7.70 \pm 0.3) \cdot 10^{-7}$  гО<sub>2</sub>/г образца, а для Холинского  $(31.3 \pm 1.1) \cdot 10^{-7}$  гО<sub>2</sub>/г образца, соответственно.

Кроме того, применяя метод окситермографии, представляется возможность исследования также и сорбции летучих органических веществ, присутствующих в воздухе помещений, на различного рода материалы с развитой поверхностью. При этом проводится количественная оценка содержания молекулярного кислорода, затраченного на это окисление в потоке газа, выходящего из реактора. Возможно также дополнительно проводить, например, и оценку изменения содержания углекислого газа (при условии добавления соответствующего датчика в систему).

#### Литература

1. Герг С., Синг К. Адсорбция, удельная поверхность, пористость. – М.: Мир, 1984, 306 с.
2. Brunauer S., Emmett P. H., Teller E., J. Am. Chem. Soc. 1938, Vol. 60, No 2, pp. 309-319.
3. Зуев Б.К. Патент РФ, № 2411509, 2010.

© Воробьёва М.Ю., Зуев Б.К., Философов Д.В., 2024

УДК 543.552.054.1

### СЕНСОР НА ОСНОВЕ ПАСТОВОГО ЭЛЕКТРОДА МОДИФИЦИРОВАННОГО КОМПЛЕКСНЫМ СОЕДИНЕНИЕМ НИКЕЛЯ (II) С ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫМИ ЛИГАНДАМИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ И РАСПОЗНАВАНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ АТЕНОЛОЛА

Зекиева А.Ф., Терес Ю.Б., Волкова А.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Атенолол (Atn), 4-(2-гидрокси-3-[(1-метилэтил)амино]пропокси) бензолацетамид является кардиоселективным препаратом-антагонистом адренорецепторов, который находит широкое применение при лечении гипертонии, лечении ангины для облегчения симптомов, улучшает переносимость, а также в качестве антиаритмического средства, помогающего регулировать сердцебиение.

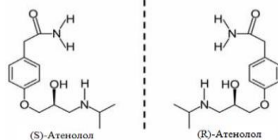


Рис. 1. Структура энантимеров атенолола

Atn существует в виде двух оптических изомеров (энантимеров), отличающихся по своей биологической активности, S-энантиомер в 50-500 раз эффективнее R-энантиомера. В связи с этим, необходимо проводить контроль энантиочистоты атенолол-содержащих препаратов. Для этих целей широко применяют хроматографические методы, однако они требуют очень дорогого оборудования и расходных материалов,

высококвалифицированных специалистов и длительной пробоподготовки [1]. Поэтому на сегодняшний день наибольшую популярность набирают электрохимические методы, в том числе, вольтамперометрия [2-5], которая позволяет довольно быстро и просто определять энантимеры *Atn* при достаточно низких затратах.

Целью нашего исследования была разработка энантиоселективного вольтамперометрического сенсора на основе пастового электрода из графитированной термической сажи Carboblack C (ГПЭ), модифицированной комплексным соединением никеля (II) с оптически активными лигандами, для определения и распознавания энантимеров атенолола и оценке его аналитических возможностей.

По результатам сканирующей электронной микроскопии установлено, что модификатор равномерно распределён на поверхности ГПЭ. Рассчитана среднеквадратичная шероховатость ( $S_q=33\text{мкм}$ ) сенсора ГПЭ/(S)-BPB-Gly-Ni(II)-4. По результатам ЦВ и СЭИ с использованием стандартной редокс-системы на основе ферроцианидов калия установлена эффективная площадь поверхности ГПЭ/(S)-BPB-Gly-Ni(II)-4  $7.51 \pm 0.53 \text{ мм}^2$ .

Изучены аналитические характеристики предложенного сенсора: линейный диапазон определяемых концентраций от  $1 \cdot 10^{-4}$  до  $1 \cdot 10^{-3}$  М, предел обнаружения  $4.51 \cdot 10^{-6}$  для R-*Atn* и  $2.76 \cdot 10^{-6}$  для S-*Atn*. Наибольшую чувствительность (11.72 мкА/мМ) сенсор проявляет к S-*Atn*. Относительное стандартное отклонение не превышает 0.7 %. Предложенный сенсор успешно апробирован для определения и распознавания энантимеров атенолола в присутствии мешающих компонентов таблетированных форм (*Sr* = 0.6–3.4 %), в смесях энантимеров, в биологических жидкостях (*Sr* мочи 1.3–3.5 %, *Sr* плазмы крови 1.1–4.1 %).

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, грант № 23-23-00340*

#### Литература

1. Майстренко, В. Н. Энантиоселективные вольтамперометрические сенсоры на основе хиральных материалов / В. Н. Майстренко, Р. А. Зильберг // Журнал аналитической химии. – 2020. – Т. 75. – № 12. – С.1080-1096.
2. Chiral selectors in voltammetric sensors based on mixed phenylalanine/alanine Cu(II) and Zn(II) complexes / R. A. Zilberg, T. V. Berestova, R. R. Gizatov [et al.] // Inorganics. – 2022. – Vol. 10. – No 8. – P. 117.
3. Контроль качества атенолола с помощью вольтамперометрических сенсоров на основе "умных" полимеров / Л. Р. Кабирова, Д. И. Дубровский, Н. А. Никонова [и др.] // Вестник Башкирского университета. – 2018. – Т. 23. – № 4. – С. 1088-1095.
4. Vakulin I. V. Homochiral zeolites as chiral modifier for voltammetry sensors with high enantioselectivity / I. V. Vakulin, R. A. Zilberg, I. I. Galimov, M. A. Sycheva // Chirality. – 2023. – Vol. 36, No. 2. – P. 23635.

5. Zilberg R. Chiral voltammetric sensor on the basis of nanosized MFI zeolite for recognition and determination of tryptophan enantiomers / R. Zilberg, Yu. Teres, M. Agliulin [et al.] // *Electroanalysis*. – 2024.–P. e202300375.

6. Zilberg R. A. A Voltammetric Sensor Based on Aluminophosphate Zeolite and a Composite of Betulinic Acid with a Chitosan Polyelectrolyte Complex for the Identification and Determination of Naproxen Enantiomers / R. A. Zilberg, V. N. Maistrenko, Yu. B. Teres [et al.] // *Journal of Analytical Chemistry*. – 2023. – Vol. 78, No. 7. – P. 933-944.

© Зекиева А.Ф., Терес Ю.Б., Волкова А., 2024

УДК 543.552.054.1

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР НА ОСНОВЕ  
ГРАФИТИРОВАННОЙ САЖИ CARBOBLACK С И НАНОРАЗМЕРНОГО  
ЦЕОЛИТА MFI ДЛЯ РАСПОЗНАВАНИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ  
ЭНАНТИОМЕРОВ ТРИПТОФАНА

Зекиева А.Ф., Сычева М.А., Терес Ю.Б.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

С каждым годом на фармацевтическом рынке появляются новые лекарственные препараты, содержащие вещества, которые могут находиться в двух оптически изомерных формах. Оптические изомеры не различаются по своим физико-химическим свойствам, однако существенно различаются по фармакологическому воздействию. В то время как один энантиомер оказывает необходимый фармакологический эффект на организм, второй может быть не эффективным либо же оказывать побочные действия. Контроль за оптической чистотой лекарственных препаратов является важным аспектом фармацевтической промышленности, поскольку он обеспечивает высокое качество лекарств и предотвращает возможные нежелательные последствия для пациентов. В связи с этим возникает необходимость в развитии новых, доступных и экспрессных методов контроля энантиочистоты фармацевтических препаратов [1-6].

Данная работа посвящена разработке нового вольтамперометрического сенсора на основе композитного пастового электрода из графитированной термической сажи Carboblack С и наноразмерного цеолита MFI для быстрого и надежного распознавания и определения энантиомеров Trp. С помощью методов циклической вольтамперометрии и импедансометрии были изучены электрохимические свойства сенсора и рассчитаны эффективная площадь поверхности электрода ПЭ/MFI ( $A=7.8\pm 0.2$  мм<sup>2</sup>) и значения эффективного сопротивления переносу электрона ( $Ret=15.5\pm 0.2$  кОм). По линейной зависимости высоты тока пика от квадрата скорости сканирования потенциала было установлено, что электродный процесс окисления энантиомеров Trp на ПЭ/MFI

контролируется диффузией электроактивного вещества к поверхности электрода. Изучены аналитические характеристики предложенного сенсора: линейный диапазон определяемых концентраций диапазоне от  $5 \cdot 10^{-5}$  до  $1 \cdot 10^{-3}$  М, с пределами обнаружения  $4.98 \cdot 10^{-7}$  и  $3.20 \cdot 10^{-7}$  и нижними границами определяемых концентраций  $1.66 \cdot 10^{-6}$  и  $1.07 \cdot 10^{-6}$  для L- и для D-Trp соответственно. Данный сенсор был апробирован для определения энантиомеров триптофана в моче и плазме крови человека. Относительное стандартное отклонение во всех случаях не превышает 1.9%. Показана возможность определения энантиомеров триптофана без выделения действующих веществ из таблетированных биологически активных добавок. При этом относительное стандартное отклонение не превышает 5.1 %, а правильность определения не ниже 92.7 %

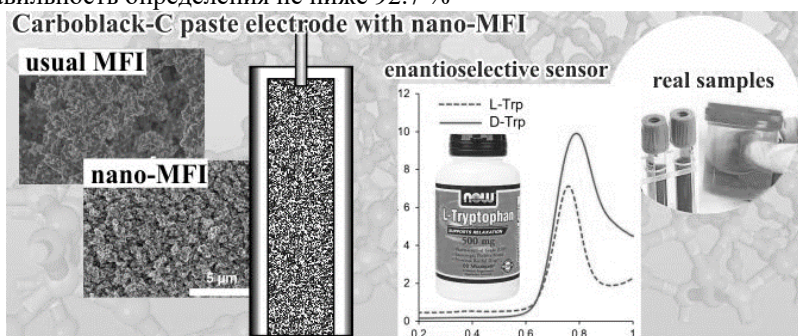


Рис. 1. Схема композитного сенсора

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, грант № 23-73-00119*

#### Литература

1. Майстренко, В. Н. Энантиоселективные вольтамперометрические сенсоры на основе хиральных материалов / В. Н. Майстренко, Р. А. Зильберг // Журнал аналитической химии. – 2020. – Т. 75. – № 12. – С.1080-1096
2. Zilberg R. A. Rational design of highly Enantioselective composite voltametric sensor using a Computationally predicted Chiral modifier/ R. A. Zilberg, I. V. Vakulin, Y. B. Teres [et al.]/Chirality. – 2022. – Vol. 34, No 11. – P. 1472-1488.
3. Зильберг Р. А. Вольтамперометрический сенсор на основе аминокислотного комплекса меди (II) для определения энантиомеров триптофана / Р. А. Зильберг, Ю. Б. Терес, Л. Р. Загитова, Ю. А. Яркаяева, Т. В. Берестова//Аналитика и контроль. – 2021. – Т. 25, №3. – С. 193-204.
4. Zilberg R. A. A Voltammetric Sensor Based on Aluminophosphate Zeolite and a Composite of Betulinic Acid with a Chitosan Polyelectrolyte Complex for the Identification and Determination of Naproxen Enantiomers / R. A. Zilberg, V. N. Maistrenko, Yu. B. Teres [et al.] // Journal of Analytical Chemistry. – 2023. – Vol. 78, No. 7. – P. 933-944



5. Vakulin I. V. Homochiral zeolites as chiral modifier for voltammetry sensors with high enantioselectivity / I. V. Vakulin, R. A. Zilberg, I. I. Galimov, M. A. Sycheva // Chirality. – 2023. – Vol. 36, No. 2. – P. 23635.

6. Zilberg R. Chiral voltammetric sensor on the basis of nanosized MFI zeolite for recognition and determination of tryptophan enantiomers / R. Zilberg, Yu. Teres, M. Agliulin [et al.] // Electroanalysis. – 2024.–P. e202300375.

© Зекиева А.Ф., Сычева М.А., Терес Ю.Б., 2024

УДК 543.544.5.068.7

### ТРЕБОВАНИЯ К ПРИГОДНОСТИ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ (РАЗРЕШЕНИЕ) ПРИ КОНТРОЛЕ КАЧЕСТВА ЛЕКАРСТВЕННОГО ПРЕПАРАТА МНН ФАВИПИРАВИР

Зотова М.А., Ускова Е.Н., Долганов А.В.

*Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва, Саранск, Россия*

Проверка пригодности хроматографической системы (ППХС) является обязательной частью современных методов контроля качества активных фармацевтических субстанций и лекарственных препаратов, в частности при использовании высокоэффективной жидкостной хроматографии. Целью ППХС при количественном анализе является проверка разделяющей способности (разрешение) и воспроизводимости площадей и времен удерживания пиков основного вещества на выходной хроматограмме. При проведении оценки содержания родственных примесей дополнительным испытанием является контроль чувствительности хроматографической системы.

Оценка ППХС осуществляется как при разработке аналитических методик, так и при проведении текущих анализов. В действующих изданиях Российской Фармакопеи для оценки пригодности системы рекомендуется учитывать: требования к параметрам, характеризующим форму пика (эффективность хроматографической системы  $N$  и фактор асимметрии,  $A_s$ ); требования к разделительной способности (разрешение между пиками  $R_s$  или отношение «пик/долина»  $p/v$  (при неполном разделении пиков)); требования к повторяемости (относительное стандартное отклонение,  $RSD$ ) значений площади или высоты пиков, а также времен удерживания пиков в случае оценки подлинности соединений; требования к чувствительности при проведении испытания на примеси (минимально определяемая концентрация, нижний предел количественного определения примеси (ПКО)).

В качестве объекта настоящего исследования нами было использовано лекарственное средство МНН Фавипиравир (5-фтор-2-оксо-1*H*-пиразин-3-карбоксамид, или Т-705).

В современных реалиях, связанных с труднодоступностью стандартных образцов основного вещества и примесей, нами было принято решение провести ряд стрессовых испытаний АФС МНН Фавипиравир, аттестованной по фармакопейной методике, с целью получения продуктов деградации и выявления критических пар. Для проведения определения использовали ВЭЖХ в обращеннофазовом варианте хроматографирования со спектрофотометрической детекцией сигнала на  $\lambda = 323$  нм на колонке Agilent ZORBAX Bonus-RP, 250 мм  $\times$  4,6 мм, с размерами частиц 5 мкм, в изократическом режиме при скорости потока подвижной фазы 1,6 мл/мин, при температуре колонки 30 °С.

В результате подбора условий проведения стрессовых испытаний и систематизации полученных данных были получены следующие данные (рис. 1).

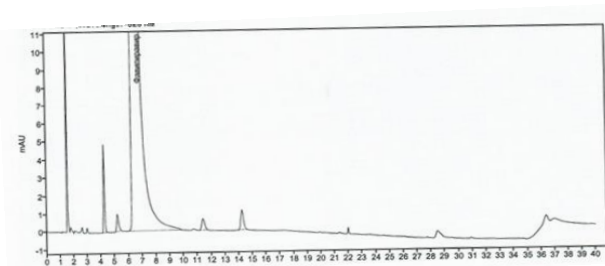


Рис. 1. Хроматограмма раствора для определения разрешения в условиях перекисного воздействия при температуре 90 °С.

Пик МНН Фавипиравир регистрировался при времени удерживания (ВУ) = 6,4 мин, пик примеси ВУ = 5,2 мин (ОВУ = 0,8). Разрешение данных хроматографических пиков в условиях эксперимента составило  $R_s = 4,4$ .

Таким образом, выявлена критическая пара с основным пиком с относительным временем удерживания около 0,8, разрешение в условиях эксперимента составило 4,4. При неоднократном воспроизведении анализа результаты были стабильны и хорошо воспроизводимы.

Согласно требованиям Фармакопеи США, рекомендуемые значения  $R_s$  для хроматографических пиков сильно отличающихся по высоте и имеющих «хвост» более или равно двум. Следовательно, для ППХС мы можем ввести требования для разрешения  $R_s \geq 2,0$  [1].

Таким образом, после проведения окислительной деструкции основного компонента были получены продукты разложения определяемого вещества.

Проведенная проверка разделительной способности хроматографической системы позволила сделать вывод, что при отказе от дорогостоящих стандартных образцов, ППХС, в частности разрешение, может быть определено с использованием растворов, полученных путем специальной обработки.

Литература

1. United States Pharmacopoeia (2011).

© Зотова М.А., Ускова Е.Н., Долганов А.В., 2024

УДК 543.063

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ УРАНА (VI) С  
ПРИМЕНЕНИЕМ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИ АКТИВИРОВАННЫХ  
SCREEN PRINTED ЭЛЕКТРОДОВ

Исакова Д.Т., Аронбаев Д.М., Аронбаев С.Д.

*Самаркандский государственный университет, Самарканд, Республика  
Узбекистан*

Мониторинг содержания урана в водной среде имеет большое значение ввиду его химической и радиологической токсичности [1], и многие регулирующие органы, в том числе Всемирная организация здравоохранения (ВОЗ), установили руководящие значения для максимальных уровней концентрации урана в пробах природной воды (для питьевой воды – концентрация ниже 30 мкг/л). Хотя уран может существовать в различных степенях окисления (таких как +3, +4, +5 или +6), U(VI) является наиболее распространенной степенью окисления в природных водах [2].

Для определения содержания урана в образцах окружающей среды были разработаны аналитические процедуры, основанные на использовании различных инструментальных методов: спектрометрия, жидкостная хроматография и нейтроноактивационный анализ [3]. По сравнению с этими методами электроанализ характеризуется своей простотой, портативностью приборов и низкой стоимостью.

К настоящему времени разработан ряд вольтамперометрических методик определения остаточных количеств урана [4]. В большинстве этих работ в качестве рабочих используются ртутные электроды, не относящиеся к экологически чистым.

В качестве альтернативы токсичным электродам на основе ртути было предложено несколько новых электродных материалов и/или процедур модификации, таких как пленочный электрод на основе висмута [5], химически модифицированный  $\omega$ -меркапто-ундецилфосфоновой кислотой золотой электрод [6], свинцовый пленочный электрод [7]. Некоторые из этих сенсоров, как показывают авторы, имеют предел обнаружения U(VI),

равный  $1,1 \times 10^{-11}$  моль/л. В качестве веществ-модификаторов предложен широкий ряд комплексообразующих агентов и буферных систем растворителей с высокой сольватирующей способностью [8]. Однако большинство этих методик трудоемки, редко отвечают требованиям «зеленой» химии. Применение углерод-содержащих screen printed электродов (SPCE) позволяет улучшить это положение.

Целью исследования является разработка вольтамперометрического метода определения урана (VI) с применением электрохимически активированного SPCE.

Активацию поверхности SPCE проводили гальваностатической обработкой в 0,1 М  $\text{H}_2\text{SO}_4$  в течение 5-6 минут при токе 3-5 А. Предполагалось, что такая предобработка нативного SPCE способна активировать его поверхность за счет окисления частиц графита, входящих в состав чернил для трафаретной печати, так как анодная активация графита в кислой среде приводит к увеличению концевых карбоксильных групп на его поверхности, что усиливает сродство к  $\text{UO}_2^{2+}$ -ионам, обладающих высокой оксофильностью [9]. После проведения электрохимической стимуляции SPCE выдерживали в стандартных или анализируемом растворах, содержащих уранил-ионы в бидистиллированной воде, подкисленной уксусной кислотой до pH 4,5 в течение 10-30 минут. Подготовленный сенсор переносили в электрохимическую ячейку с аналитом в 0,1М натрий-ацетатном буфере и осуществляли дифференциально-импульсное сканирование потенциала в катодной области в диапазоне 0,1÷ -0,3 В относительно Ag/AgCl электрода сравнения со скоростью от 20 до 50 мВ/сек. При этом на электроде протекают последовательно несколько электрохимических реакций:



Эффект применения электрохимической обработки SPCE показан на рис. 1.

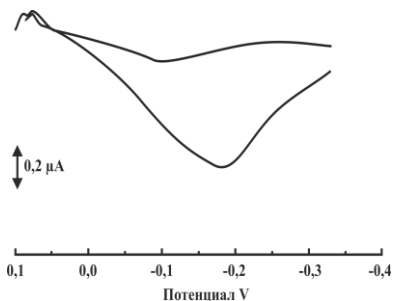


Рис. 1. Эффект электрохимической активации поверхности SPCE

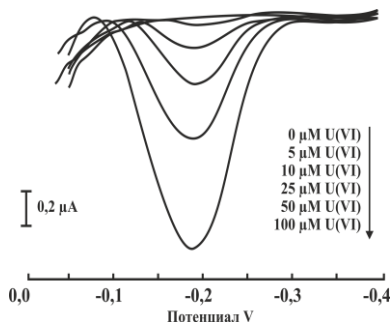


Рис. 2. Зависимость аналитического сигнала от концентрации  $\text{UO}_2^{2+}$ -ионов в растворе.

Пик катодного тока приходится на  $-0,16$  В и смещается в более катодную область с увеличением скорости сканирования потенциала. На рисунке 2 приводятся вольтамперограммы стандартных растворов с различным содержанием U(VI).

Результаты демонстрируют эффективность общего подхода модификации углеродсодержащих электродов для придания им определенных аналитических характеристик. Электрохимическая обработка (5 А в течение 6 мин) в 0,1 М  $\text{H}_2\text{SO}_4$  немодифицированных screen printed электродов привела к созданию хемосенсоров для U(VI).

#### Литература

1. S.C. Sheppard, et al. Derivation of ecotoxicity thresholds for uranium, J. Environ. Radioact., 2005
2. Аналитическая химия урана. – М.: Изд. АН СССР, 1962
3. Марков В.К., и др. Уран, методы его определения. – М.: Атомиздат, 1964
4. A. K. Satpati, et.al. Stripping Voltammetric Determination of Uranium Traces in Sea Water Samples: Effect of Surfactants on the Measurements, Analytical Letters, Vol. 43, No. 4, pp. 1-14 (2010). doi:10.1080/00032710903406904
5. L. Lin, et.al. Adsorptive stripping voltammetric measurements of trace uranium at the bismuth film electrode, Analytica Chimica Acta 535, 9-13, 2005.
6. D. Merli, et al. A  $\omega$ -mercaptoundecylphosphonic acid chemically modified gold electrode for uranium determination in waters in presence of organic matter, Talanta, 2016.
7. M. Korolczuk, et al. Determination of uranium by adsorptive stripping voltammetry at a lead film Electrode, Talanta, 2007.
8. А.В.Трубачев, Е.А. Суханов. Вольтамперометрическое поведение ионов урана в кислых водно-органических растворах, Хим. физика и мезоскопия. Т. 10, №1. – С. 83-90, 2005.
- 9.Тарасевич М.Р. Электрохимия углеродных материалов.-М.: Наука,1984. – 253с.

© Исакова Д.Т., Аронбаев Д.М., Аронбаев С.Д., 2024

КИНЕТИКА СОРБЦИИ СТЕРОИДНОГО САПОНИНА *TRIBULUS TERRESTRIS* НА ХИТОЗАНЕ

Ищенко У.С., Мироненко Н.В., Селеменев В.Ф.

*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

Биополимеры являются многообещающим материалом для доставки лекарственных веществ благодаря их биосовместимости, характеристикам разложения и нетоксичной природе. Включение ЛС в носитель помогает защитить его от разложения, повысить терапевтический эффект, продлить биологическую активность. К настоящему времени известно большое количество публикаций, посвященных исследованию сорбции биологически активных веществ на природных сорбентах [1]. Работ по исследованию кинетики и равновесия протекания сорбционного процесса с участием веществ гликозидной структуры крайне мало. Целью настоящего исследования являлось изучение особенностей кинетики поглощения стероидных сапонинов *Tribulus Terrestris* хитозаном.

На рис. 1 представлены кинетические кривые сорбции сапонины на хитозане из водных растворов.

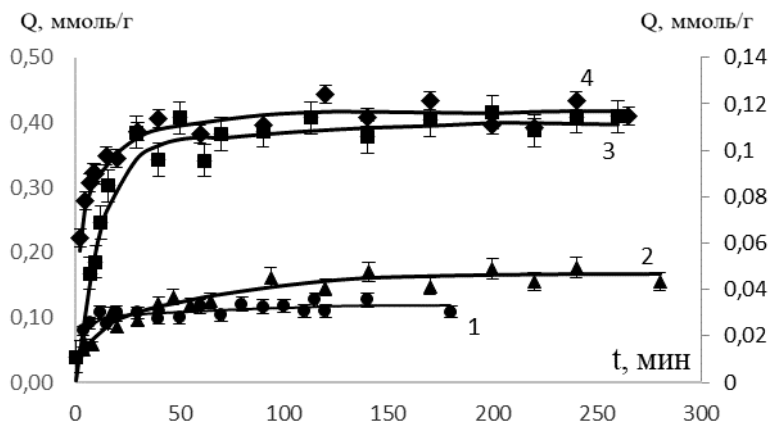


Рис. 1. Кинетические кривые сорбции сапонины на хитозане из растворов с концентрациями: 1-  $2,06 \cdot 10^{-2}$  ммоль/дм<sup>3</sup> (правая ось); 2-  $5,13 \cdot 10^{-2}$  ммоль/дм<sup>3</sup> (правая ось); 3-  $1,07 \cdot 10^{-1}$  ммоль/дм<sup>3</sup> (правая ось); 4-  $4,05 \cdot 10^{-1}$  ммоль/дм<sup>3</sup>.

Из рис. 1 видно, что при концентрации сапонины  $2,06 \cdot 10^{-2}$  ммоль/дм<sup>3</sup> время достижения равновесия меньше, чем при остальных концентрациях. При этом сорбция с увеличением концентрации сапонины в растворе

возрастает с одинаковой скоростью и время выхода кривых на плато, равное 70 минутам, не изменяется.

Анализ линейных зависимостей, представленных в координатах  $F$  от  $\sqrt{t}$  и  $-\ln(1-F)$  от  $t$  (значения  $R^2$  кривых, представленных в координатах  $F$  от  $\sqrt{t}$  больше) позволил отметить, что изучаемом диапазоне концентраций сапонина лимитирующей стадией является внутренняя диффузия, что вполне закономерно при поглощении сорбентом крупных органических молекул [2].

Для расчета коэффициентов внутренней диффузии использовали простое аппроксимационное выражение:

$$Vt_i = -2F_i \lg(1-F_i), V = \pi^2 \bar{D} / r^2,$$

где  $t$  – время, с,  $r$  – радиус частицы, см. Данные уравнения наиболее часто используются при расчете коэффициента диффузии для каждого значения  $F$  с высокой точностью при  $F=0,05-0,95$ , ошибка усреднения по всей кривой при этом не превышает 10-18%.

Таблица 1

Величины коэффициентов внутренней диффузии	
Концентрация сапонина, ммоль/дм <sup>3</sup>	$D_{\text{расч}}$ , см <sup>2</sup> /сек
$2,06 \cdot 10^{-2}$	$1,21 \cdot 10^{-10}$
$5,13 \cdot 10^{-2}$	$1,18 \cdot 10^{-10}$
$1,07 \cdot 10^{-1}$	$2,15 \cdot 10^{-10}$
$4,05 \cdot 10^{-1}$	$4,30 \cdot 10^{-10}$

Порядок получаемых величин ( $10^{-10}$  см<sup>2</sup>/сек) ниже, чем на полимерных сорбентах, что обусловлено жесткостью матрицы и диаметром пор [3]. Можно полагать, что, вследствие периодических процессов сжатия-набухания хитозана в ходе сорбции сапонина, разброс величин коэффициентов диффузии будет достаточно широким и может только качественно характеризовать кинетику процесса в данной системе.

*Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования РФ в рамках государственного задания ВУЗам в сфере научной деятельности на 2023-2025 годы, проект FZGU-2023-0009.*

#### Литература

1. Мироненко Н. В. Кинетика сорбции сапонина и олеаноловой кислоты на анионите АВ-17-2П / Н. В. Мироненко, Т. А. Брежнева, И. А. Михина, В. Ф. Селеменев // Сорбционные и хроматографические процессы. – 2008. – Т.8. вып.3. – С. 513-520.
2. Мироненко Н. В. Кинетика сорбции тритерпенового сапонина сверхсшитым полистиролом / Н. В. Мироненко, Т. А. Брежнева, В. Ф. Селеменев // Журнал физической химии. – 2013. – Т.87, № 3. – С. 387-390.
3. Мироненко Н. В. Особенности кинетики сорбции сапонина *Quillaja Saponaria molina* хитозаном / Мироненко Н. В., Смушева С. О., Брежнева Т. А., Селеменев

УДК 543.552

**ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЖЕЛЕЗА (III) И  
ВАНАДИЯ (V) В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ПРИ СОВМЕСТНОМ  
ПРИСУТСТВИИ НА ЗОЛОТОУГЛЕРОДСОДЕРЖАЮЩЕМ ЭЛЕКТРОДЕ**

Ковалева Ю.Н., Фомина А.Э., Нипрук О.В.

*ФГБОУ ВО МГУ им. Н.П. Огарева, Саранск, Россия*

*ФГАОУ «ННГУ им. Н.И. Лобачевского», Нижний Новгород, Россия*

В данной работе предложена вольтамперометрическая методика определения железа (III) и ванадия (V) в водных растворах при совместном присутствии. Актуальность исследования обусловлена необходимостью аналитического контроля водных растворов в процессе синтеза уранилванадата железа, как возможной формы связывания урана (VI) в окружающей среде и на различных стадиях ядерного топливного цикла.

В известных методиках вольтамперометрическое определение железа (III) и ванадия (V) в водных растворах проводится по току восстановления до железа (II) и ванадия (IV) в области положительных потенциалов. При этом потенциалы восстановления обоих аналитов близки, что затрудняет их раздельное определение при совместном присутствии. В разработанной методике для раздельного определения железа (III) и ванадия (V) предложено использовать комплексон III. Добавление этого реагента в фоновый электролит приводит к образованию устойчивого комплексоната железа (III), что существенно смещает потенциал его восстановления в область меньших значений. Поскольку ванадий (V) находится в растворе в виде аниона и не реагирует с комплексоном III, то потенциал восстановления остается неизменным.

Вольтамперограммы регистрировали с помощью вольтамперометрического анализатора Та-Lab с трехэлектродной ячейкой: в качестве рабочего электрода использовали углеродсодержащий электрод, модифицированный раствором золота 100 мг/л при потенциале 0,1 В в течение 45 с. Хлорсеребряные электроды, заполненные 1М KCl, использовали в качестве вспомогательного электрода и электрода сравнения.

В процессе работы были изучены и подобраны оптимальные условия определения железа (III) и ванадия (V), такие как природа и концентрация фонового электролита, кислотность среды, концентрация комплексона III, потенциал и время восстановления аналитов, способ модификации рабочего электрода золотом и очистки электродов между измерениями. Определение



проводили методом градуировочного графика. На основании проведенных исследований была сформулирована методика анализа.

В электрохимическую ячейку помещали 10 мл фонового электролита, содержащего 0,1 моль/л HCl и 0,014 моль/л комплексона III, измеряли зависимость силы тока от потенциала при скорости развертки 20 мВ/с в интервале потенциалов от 0,7 В до 0,2 В в режиме дифференцирования. Затем в ячейку с помощью дозатора вносили 0,05 мл анализируемого раствора и повторяли измерение. Аналитический сигнал рассчитывали как разность силы тока раствора с пробой и раствора фона. Для каждого значения силы тока вводили поправку на величину остаточного тока. Определение железа проводили при потенциале 0,43 В, а ванадия – при потенциале 0,66 В. Концентрацию аналитов в пробе рассчитывали по градуировочным графикам, полученным по аналогичной методике с использованием стандартных растворов. Очистку электродов после каждого измерения проводили в бидистиллированной воде в течение 30 секунд при потенциале 0,7 В в режиме вибрации.

Исходные растворы Fe (III), V (V) и комплексона (III) с концентрацией 10<sup>-2</sup> моль/л готовили растворением навески NH<sub>4</sub>Fe(SO<sub>4</sub>)<sub>2</sub>·12H<sub>2</sub>O в 0,1 М H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>, NaVO<sub>3</sub> и комплексона III в деионизированной воде (электропроводность не более 0,18 мкСм) соответственно. Полученные растворы последовательно разбавляли до требуемых концентраций.

Разработанная методика позволяет проводить определение железа (III) и ванадия (V) в водном растворе при совместном присутствии на уровне концентраций 10<sup>-4</sup> моль/л и выше с погрешностью 10-15%. Методика отработана на модельных растворах. Правильность результатов, получаемых по данной методике, подтверждена методом добавок.

© Ковалева Ю.Н., Фомина А.Э., Нипрук О.В., 2024

УДК 543.422.3-76

## РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ АНТИБИОТИКОВ ТЕТРАЦИКЛИНОВОГО РЯДА В ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМАХ

Лобанова Е.Е., Ускова Е.Н.

*ФГБОУ ВО МГУ им. Н.П. Огарёва, Саранск, Россия*

Тетрациклины относятся к антибиотикам, активно применяемым в медицине и ветеринарии для лечения широкого спектра заболеваний. Они вызывают гибель как грамположительных, так и грамотрицательных бактерий, оказывают бактериостатическое действие, связанное с нарушением образования белка в клетках патогенных микроорганизмов.

При спектрофотометрическом определении тетрациклиновых антибиотиков, образующих характерные хромофорные группы,

используется способность данных соединений поглощать свет определенных длин волн. Это позволяет определить содержание антибиотиков в препаратах путем сравнения их поглощения со стандартными растворами [1].

В настоящем исследовании в качестве стандарта использована активная фармацевтическая субстанция (АФС) Тетрациклина гидрохлорид, представляющая собой желтый кристаллический порошок, с содержанием действующего вещества в пересчете на сухое вещество 99,89 %. Субстанция была стандартизована согласно требованиям фармакопейной статьи [2]. Структурная формула лекарственного вещества приведена на рисунке 1. В качестве объектов исследования были использованы 3 образца лекарственных форм (таблетки):

1. Тетрациклин Реневал 100 мг, производитель «Обновление ПФК АО»;
2. Тетрациклин 100 мг ГК «Promomed», производитель АО «Биохимик»;
3. Тетрациклин 100 мг, производитель «ПАО Биосинтез».

Исследование проводилось методом спектрофотометрии в УФ- и видимой области, для чего использовали спектрофотометр «Shimadzu UV-1800». Для приготовления растворов использованы реактивы квалификации «х.ч.» и «ч.д.а.».

Для приготовления серии стандартных растворов методом разбавления раствора с концентрацией  $C = 10^{-3}$  моль/л.

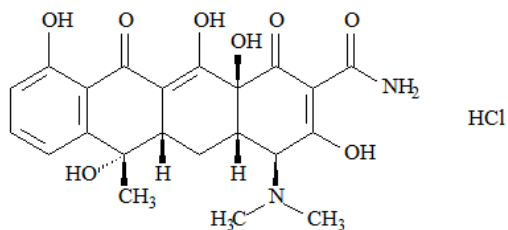


Рис. 1. Структурная формула тетрациклина гидрохлорида

Далее разбавлением в 10 раз каждого последующего раствора, получали стандартные растворы с концентрациями  $C = 10^{-4}$  моль/л,  $C = 10^{-5}$  моль/л,  $C = 10^{-6}$  моль/л. Меняя кратность разбавления приготавливали растворы с  $C = 2 \cdot 10^{-5}$  моль/л,  $C = 2 \cdot 10^{-6}$  моль/л,  $4 \cdot 10^{-5}$  моль/л,  $8 \cdot 10^{-5}$  моль/л,  $6 \cdot 10^{-5}$  моль/л, что охватывало весь спектр ожидаемых содержаний тетрациклина в растворах проб.

В качестве рабочей длины волны использовали  $\lambda = 356$  нм, на которой и определяли оптическую плотность каждого из стандартных растворов. Градуировочный график зависимости концентрации стандартных растворов от оптической плотности приведен на рисунке 2.

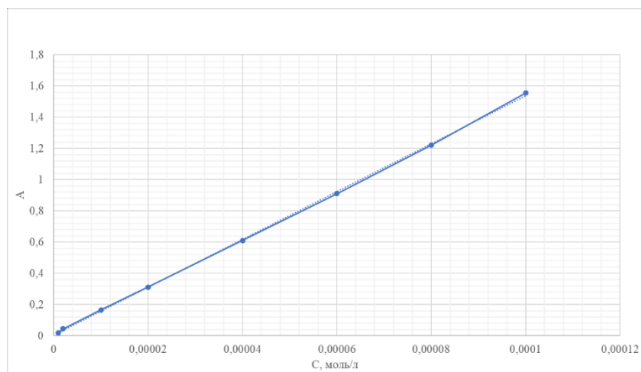


Рис. 2. График зависимости концентрации стандартных растворов (C, моль/л) от оптической плотности (A) ( $R = 0,9998$ )

В данной области концентраций график имел линейный характер. Уравнение графика выражалось как  $A = 15302C + 0,0062$ . Коэффициент корреляции составил 0,9998, что позволяет использовать данную методику для расчета количественного содержания тетрациклина гидрохлорида в лекарственных препаратах.

Для анализа были использованы навески порошка растертых таблеток трёх образцов. Точную навеску исследуемого образца (в диапазоне 0,15 – 0,25 г) переносили в мерную колбу вместимостью 50,0 мл и приливали 25,0 мл 0,01М раствора HCl. Механическое перемешивание растворов проводили в течение одного часа. После полного растворения действующего вещества таблеток и отделения вспомогательных веществ, доводили объем растворов до метки. Перед фотометрированием полученные растворы разбавляли в 50 раз.

Определение оптической плотности лекарственных препаратов проводилось 3 раза, для повышения достоверности полученных результатов. После определения содержания тетрациклина гидрохлорида в анализируемых растворах проводили пересчет на массу действующего вещества в пересчете на 1 таблетку. Содержание тетрациклина гидрохлорида в образцах исследованных лекарственных форм составило:  $95 \pm 0,05$  мг,  $0,101 \pm 0,02$  мг и  $0,075 \pm 0,01$  мг.

Таким образом, содержание тетрациклина гидрохлорида в первом и втором образце соответствует заявленному описанию лекарственного препарата (100 мг). В 3 образце наблюдается отклонение значения (100 мг), связано с влиянием трудноудаляемой оболочки.

## Литература

1. Agwuh, K. N. Pharmacokinetics and pharmacodynamics of the tetracyclines including glycylicyclines / K.N. Agwuh, A. MacGowan // J. Antimicrob. Chemother. – 2006. – V. 58. – № 2. – P. 256–265.
2. Тетрациклина гидрохлорид ФС. 2.1.0186.18 ( Взамен ФС 42-2519-97) [Электронный ресурс]. – Режим доступа: [https://static-0.minzdrav.gov.ru/system/attachments/attaches/000/061/074/original/ФС\\_Тетрациклина\\_гидрохлорид.doc?1667387927](https://static-0.minzdrav.gov.ru/system/attachments/attaches/000/061/074/original/ФС_Тетрациклина_гидрохлорид.doc?1667387927)

© Лобанова Е.Е., Ускова Е.Н., 2024

УДК 543.422.3-76

## ВЛИЯНИЕ УФ-ИЗЛУЧЕНИЯ НА СТАБИЛЬНОСТЬ ЛЕКАРСТВЕННОГО ПРЕПАРАТА МНН ФАВИПИРАВИР

Минькин В.С., Зотова М.А., Ускова Е.Н.

*ФГБОУ ВО МГУ им. Н.П. Огарёва, Саранск, Россия*

Одним из эффективных противовирусных препаратов направленного действия является фавипиравир - 6-фтор-3-гидрокси-2-пиазинкарбоксамид (рис. 1), представляющий собой пролекарство, образующее активную форму *in vivo* рибофуранозил-5В-трифосфат, которая получается путем фосфорилирования внутри клетки.

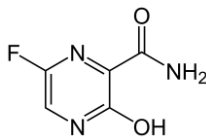


Рис. 1. Структурная формула фавипиравира

Процессы деградации лекарственных напрямую влияют на их стабильность. При деградации активного действующего вещества могут образоваться продукты, которые имеют значительно более низкую фармакологическую активность, не имеют её вовсе или образуют токсичные примеси. Такие процессы как: гидролиз, дегидратация, изомеризация, декарбоксилирование, окисление и фотохимическое разложение относятся к химической деградации и нередко протекают совместно. Одним из стандартных испытаний стабильности лекарственных препаратов является фотодеструкция под действием УФ-излучения. В качестве основной характеристики, выбранной для оценки влияния на стабильность лекарственного препарата МНН Фавипиравир является его поглощающая способность в УФ-диапазоне оптического спектра, так как структура вещества будет обуславливать характер поглощения, УФ-спектрофотометрию целесообразно применить для оценки качества фавипиравира, сравнивая спектры исследуемого образца и стандартного раствора фавипиравира.

В качестве объекта исследования использовали активную фармацевтическую субстанцию МНН Фавипиравир с аттестованным содержанием действующего вещества 99,2 масс. %. Эксперимент проводился с применением спектрофотометра «Shimadzu UV-1800» в УФ-диапазоне 190 – 400 нм. Для подготовки растворов использовались реактивы квалификации «х. ч.» и «ч. д. а.».

Для приготовления фотометрической системы навеску действующего вещества массой 0,02 г помещали в сухую колбу вместимостью 25,0 мл, и проводили растворение субстанции фавипиравира в 25 мл воды. Для полного растворения, раствор в механическом встряхивателе в течение 1 часа. По истечению 1 часа, раствор лекарственного средства восьмикратно разбавили в колбе на 25,0 мл, доведя раствор до метки в результате получая раствор с концентрацией 0,1 мг/мл. Растворы фавипиравира меньшей концентрации готовили разбавлением исходного стандартного раствора дистиллированной водой в 2,5, 5, 10 раз.

Спектр каждого раствора снимали в диапазоне  $\lambda$  от 200 до 600 нм. В УФ-спектре водного раствора фавипиравира наблюдались три выраженных максимума при  $\lambda$  226 нм, 322 нм, 361 нм. Приготовленные растворы серии последовательно облучали с помощью УФ-камеры 5, 10, 15 и 25 минут, фиксируя спектры растворов каждый раз после облучения (рис. 2, 3).

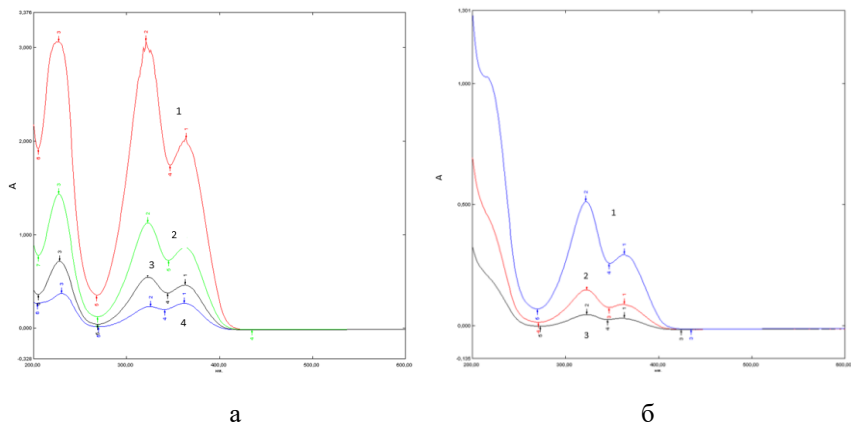


Рис. 2. Спектры фавипиравира до обработки УФ-излучением (а – исходный раствор: 1 –  $C_M = 10$  мкг/мл, 2 –  $C_M = 4$  мкг/мл, 3 –  $C_M = 2$  мкг/мл, 4 –  $C_M = 1$  мкг/мл; б – после выдержки 25 мин)

Установлено, что при УФ-облучении наблюдается уменьшение оптической плотности на всех длинах волн, соответствующих максимумам поглощения и значительное изменение формы полосы поглощения на  $\lambda = 226$  нм.

ВОЛЬТАМПЕРАМЕТРИЧЕСКАЯ СЕНСОРНАЯ ПЛАТФОРМА НА  
ОСНОВЕ ЗОЛОТОГО ЭЛЕКТРОДА, МОДИФИЦИРОВАННОГО  
ПОЛИАНИЛИНОМ С МОЛЕКУЛЯРНЫМИ ОТПЕЧАТКАМИ, ДЛЯ  
ОПРЕДЕЛЕНИЯ АНТИБИОТИКОВ

Мухамедьянова А.А., Попова А.А., Перфилова Ю.А.  
*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Антибиотики являются одним из важнейших классов лекарственных соединений, используемых для лечения и профилактики бактериальных инфекций человека и животных. В связи с распространением антибиотиков и соответствующих метаболитов в экосистемах и продуктах питания неотложной задачей аналитической химии стал контроль содержания антибиотиков не только в объектах окружающей среды и пищевых продуктах, но и в биологических образцах, что позволяет оптимизировать клиническое использование антибиотиков. В данной работе для определения антибиотиков хлорамфеникола (ХАМ) и цефтриаксона (ЦЕФ) разработан вольтамперометрический сенсор на основе золотого электрода, модифицированного полианилином с молекулярными отпечатками. Молекулярно-импринтированный полианилин был получен электрополимеризацией из раствора, содержащего 20 мМ анилина, 1 мМ молекулы-шаблона (ХАМ или ЦЕФ) и 1 М  $H_2SO_4$  [1]. Затем молекулы шаблона удаляли электрохимически в 1 М растворе  $H_2SO_4$  для образования полостей в полианилиновой матрице, которые позволяют специфично распознать соответствующие антибиотики. Определение ХАМ и ЦЕФ проводили методом дифференциально-импульсной вольтамперометрии с предварительным инкубированием соответствующего антибиотика. С помощью сканирующей электронной микроскопии и электрохимической импедансной спектроскопии изучены морфология и электрохимические свойства модифицированной поверхности золотого электрода. Получены аналитические характеристики, показатели воспроизводимости и стабильности полученного сенсора. Показано, что наличие молекулярных отпечатков значительно повышает чувствительность разработанного сенсора по сравнению с неимпринтированным полимером.

Литература

1. Yarkaeva Yu. A. Polyaniline and poly(2-methoxyaniline) based molecular imprinted polymer sensors for amoxicillin voltammetric determination / Yarkaeva Yu. A., Maistrenko V. N., Dymova D.A., Zagitova L. R., Nazyrov M. I. // *Electrochimica Acta* – 2022. – Vol. 433. –141222.

© Мухамедьянова А.А.; Попова А.А., Перфилова Ю.А., 2024

УДК 543.552.054.1

## НОВЫЕ ХИРАЛЬНЫЕ МОДИФИКАТОРЫ ДЛЯ СЕЛЕКТИВНОГО РАСПОЗНАВАНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ ТРИПТОФАНА

Мухаметдинов Ч.Р., Терес Ю.Б.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

В последних исследованиях в области асимметрического катализа комплексы кобальта показали высокую эффективность, что позволило выдвинуть гипотезу о эффективности описываемых соединений и в области электрохимического анализа. Таким образом в данном исследовании были изучены комплексы кобальта на предмет селективного распознавания энантиомеров.

Предметом исследования являлись хиральные модификаторы [1-3] – комплексы Co(III):  $\Lambda$ (R,R)-Co-Cl,  $\Lambda$ (R,R)-Co-PF<sub>6</sub>,  $\Delta$ (S,S)-Co-Cl, а также циклические диамины, входящие в состав структур комплексов кобальта: (1R,2R)-диаминоциклогексан, (1S,2S)-диаминоциклогексан (рис.1).

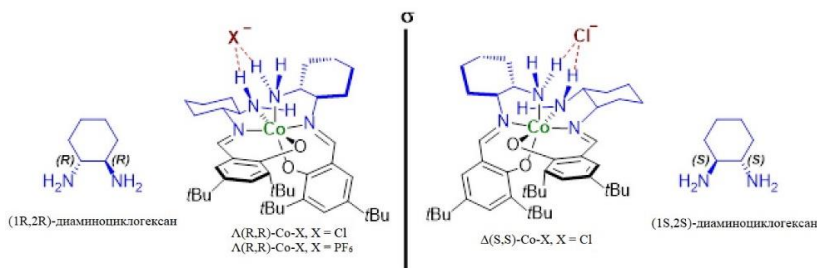


Рис. 1. Строение молекул модификаторов\*

*\*Кафедра аналитической химии Уфимского университета науки и технологий выражает благодарность Институту элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН, Лаборатории асимметрического катализа за предоставленные образцы*

В исследовании применялся угольно-пастовый электрод в качестве рабочего электрода, хлоридсеребряный электрод в качестве электрода сравнения и платиновый электрод в качестве вспомогательного электрода. Комбинация описанных выше трех электродов образует классическую трёх-электродную ячейку, с помощью которой проводился анализ. Для повышения воспроизводимости рабочая ячейка была помещена в клетку фарадея, тем самым исключая влияние внешних электромагнитных полей.

Выбор тест-аналита для новых хиральных модификаторов проводился среди ряда биологически активных соединений: триптофан, тирозин, пропранолол, атенолол, напроксен (рис. 2).

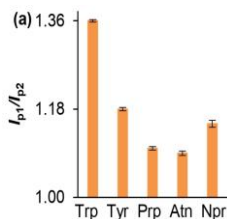


Рис. 2. Сравнение коэффициентов энантиоселективности различных биологически активных соединений на исследуемом сенсоре

Из рисунка 2 видно, что из представленных биологически активных соединений выделяется триптофан с наибольшим значением отношения высоты пиков энантиомеров, а именно – 1.36, таким образом триптофан представляется самым эффективным тест-аналитом из представленных выше. Все дальнейшие измерения проводись на энантиомерах триптофана.

Важным преимуществом исследуемого сенсора является возможность анализа смеси энантиомеров, так как существует разница в потенциалах окисления (35 мВ) между энантиомерами триптофана при измерении на данном сенсоре.

Линейность функции отношения токов пиков к концентрации триптофана сохранялась в интервале от  $1.0 \cdot 10^{-6}$  до  $5.0 \cdot 10^{-4}$  М. Сенсор более чувствителен к D-триптофану, что следует из представленных ниже данных: предел обнаружения L-Trp –  $2.73 \cdot 10^{-7}$  М, D-Trp –  $1.99 \cdot 10^{-7}$  М; нижние границы определяемых концентраций –  $9.09 \cdot 10^{-7}$  М, R-Trp –  $6.65 \cdot 10^{-7}$  М.

Таблица 1

Количественные характеристики исследуемого сенсора на объектах содержащих энантиомеры триптофана

Анализируемый объект	Введено количество вещества (мкМ)		Найдено количество вещества (мкМ)		Относительное стандартное отклонение ( $S_r$ , %)		Относительная погрешность ( $\delta$ , %)	
	L-Trp	D-Trp	L-Trp	D-Trp	L-Trp	D-Trp	L-Trp	D-Trp
Модельный раствор	300	300	308±17	310±19	4.4	5.0	2.7	3.3
Урина	300	300	297±1	298±2	3.2	5.1	0.8	0.8
Плазма	300	300	316±14	297±20	3.5	5.4	5.4	1.1
Таблетка 1	80	-*	84±2	-*	2.1	-*	5.4	-*
Таблетка 2	80	-*	83±6	-*	4.2	-*	3.9	-*

\*D-Trp не производится в качестве биологически активной добавки



В таблице 1 приедены результаты исследования различных объектов с содержанием энантиомеров триптофана. Концентрация определяемого триптофана во всех анализируемых объектах равное.

Данные, приведенные в литературе [4-7], позволяют определить преимущества разработанного сенсора: сенсор не только не уступает по своим характеристикам, но в отдельных случаях и превосходит сенсоры, описанные в литературе. Отличительной характеристикой исследованного сенсора является стабильность: если сравнить способность сенсоров распознавать энантиомеры в течении продолжительного времени, то данный сенсор эффективен в течении 12 дней, в то время как описанные в литературе эффективны от 5 до 7 дней.

*Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда (РНФ номер гранта. 23-23-00340; <https://rscf.ru/project/23-23-00340/>)*

#### Литература

1. Майстренко В. Н., Евтюгин Г. А., Зильберг Р. А. Энантиоселективные вольтамперометрические сенсоры. – 189 с.
2. Maistrenko V. N., Zil'berg R. A. Enantioselective Voltammetric Sensors on the Basis of Chiral Materials. – Journal of Analytical Chemistry, 2020. – Vol. 75, No. 12. – P. 1514-1526.
3. Зильберг Р. А., Майстренко В. Н., Терес Ю. Б. [и др.] Вольтамперометрический сенсор на основе алюмофосфатного цеолита и композита бетулиновой кислоты с полиэлектролитным комплексом хитозана для распознавания и определения энантиомеров напроксена. – Журнал аналитической химии, 2023. – Т. 78, № 7. – С. 648-661.
4. Zagitova L. R., Maistrenko V. N., Yarkaeva Y. A. [et al.] Novel chiral voltammetric sensor for tryptophan enantiomers based on 3-neomenthylindene as recognition element. – Journal of Electroanalytical Chemistry, 2021. – Vol. 880. – P. 114939.
5. Зильберг Р. А., Загитова Л. Р., Вакулин И. В. [и др.] Энантиоселективные вольтамперометрические сенсоры на основе аминокислотных комплексов Cu(II), Co(III), Zn(II). – Журнал аналитической химии, 2021. – Т. 76, № 12. – С. 1111-1122.
6. Zilberg R. A., Vakulin I. V., Teres Yu. B. [et al.] Rational design of highly enantioselective composite voltammetric sensors using a computationally predicted chiral modifier. – Chirality, 2022. – Vol. 34, No. 11. – P. 1472-1488.
7. Яркаева Ю. А., Исламурагова Е. Н., Загитова Л. Р. [и др.] Сенсор для распознавания и определения энантиомеров триптофана на основе модифицированного энантиоморфными кристаллами бромтрифенилметана угольно-пастового электрода. – Журнал аналитической химии. – 2021. – Т. 76, № 11. – С. 1038-1048.

© Мухаметдинов Ч.Р., Терес Ю.Б., 2024

УДК 543.552

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНО  
ИМПРИНТИРОВАННОГО ПОЛИ-3,4-ЭТИЛЕНДИОКСИТИОФЕНА ДЛЯ  
ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ ТРИПТОФАНА

Назыров М.И., Умутбаев Н.С., Абдуллин Я.Р.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Определение биологически активных веществ является ключевой задачей в области аналитической химии и медицины. Одним из методов их обнаружения является использование вольтамперометрических сенсоров, полученных методом молекулярного импринтинга полимеров (МИП) [1,2].

Поли-3,4-этилендиокситиофен (PEDOT) представляет собой проводящий полимер с уникальными электрохимическими свойствами, такими как высокая емкость, гибкость, механическая стабильность и проводимость. Именно эти характеристики делают его прекрасным материалом для создания МИП. Процесс формирования "шаблонов" молекул в МИП-сенсорах включает в себя создание комплексов между молекулой-шаблоном и мономерами, за которым следует полимеризация. Удаление молекулы-шаблона оставляет пустоты, специфичные для целевой молекулы, что обеспечивает высокую специфичность и чувствительность МИП-сенсоров.

В данной работе мы разработали вольтамперометрический сенсор на основе молекулярно импринтированного поли-3,4-этилендиокситиофена. Электроосаждение пленки PEDOT производилось на стеклоуглеродном электроде с использованием циклической вольтамперометрии в диапазоне потенциалов от 0.0 В до 1.5 В в 10 мл ацетонитрила, содержащего 0.1 М LiClO<sub>4</sub>, 0.001 М мономера 3,4-этилендиокситиофена и 0.1 М молекулы аналита. Мы изучили морфологию полученного сенсора, его электрохимические и аналитические характеристики. Методика создания МИПа была протестирована на молекуле триптофана в качестве "шаблона" и аналита. Разработанный сенсор показал высокую селективность и точность определения триптофана, а также продемонстрировал стабильность при анализе образцов, содержащих мешающие компоненты, такие как плазма крови и моча.

Литература

1. Yarkaeva Yu.A., Dymova D.A., Nazyrov M.I., Zagitova L.R. [et al.] Voltammetric sensor based on molecular imprinted polymer for lincomycin detection. –Chim. Tecno Acta, 2023. – V.10., No. 202310210. DOI: 10.15826/chimtech.2023.10.2.10.
2. Yarkaeva Yu. A, Nazyrov M.I., Abdullin Ya. R. [et al.] Enantioselective voltammetric sensor based on mesoporous graphitized carbon black Carboxack X and fulvene derivative. – Chirality, 2023. – Vol. 1, P. 11. DOI: 10.1002/chir.23563.

© Назыров М.И., Умутбаев Н.С., Абдуллин Я.Р., 2024

УДК 543.06:543.063

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОФЕИНА С ПОМОЩЬЮ ЭЛЕКТРОДА  
МОДИФИЦИРОВАННОГО ЛИГНОСУЛЬФОНАТОМ

Речкалов А.С., Агеенко Е.И.

*Челябинский Государственный университет, Челябинск, Россия*

Проблема модификации электродов в настоящее время очень обширна, ведь модификация позволяет увеличить чувствительность и селективность электрода к анализируемым компонентам, позволяя определять их в достаточно малых концентрациях. Цель данной работы состоит в создании модифицированного электрода, покрытого лигносульфонатом для количественного определения кофеина.

Модификацию электрода начинали с активации поверхности электрода в фосфатном буфере с рН 7,0, в режиме циклической развертки со скоростью 100 мВ/с от потенциала -200 мВ до +1200 мВ. Далее электрод помещали в раствор лигносульфоната (20 г/л), покрытие осуществляется при постоянном потенциале + 900 мВ в течении 20 минут. После, электрод стабилизировали в фосфатном буфере с рН 7,0, при проведении циклической развертки со скоростью 100 мВ/с от потенциала -200 мВ до +1000 мВ. Регистрацию вольтамперограмм производили в трехэлектродной ячейке, состоящей из рабочего стеклоуглеродного электрода, электрода сравнения (хлоридсеребрянного) и вспомогательного платинового электрода. Покрытый лигносульфонатом электрод помещали в 0,1 М раствор фосфорной кислоты и прибавляли кофеин. Развертку производили в диапазоне потенциалов от +1200 мВ до +1600 мВ при скорости развертки 50 мВ/с.

Изучали влияние рН на поведение модифицированного электрода. рН варьировался в диапазоне от 1,65 до 7,0. Было установлено, что наиболее оптимальные условия были при рН 1,65. Дальнейшие измерения проводили при этом значении рН.

В ходе работы удалось получить электрод, покрытый лигносульфонатом для количественного определения кофеина. Образование пленки на поверхности стеклоуглеродного электрода приводит к увеличению коэффициента чувствительности с  $1,09 \cdot 10^6$  до  $1,22 \cdot 10^6$  мкА·мВ·л/моль и снижению предела обнаружения. Полученный электрод можно использовать для анализа кофеин содержащих объектов.

© Речкалов А.С., Агеенко Е.И., 2024

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ  
АМИНОКИСЛОТНЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕДИ И ЦИНКА ДЛЯ  
РАСПОЗНАВАНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ НАПРОКСЕНА

Сычева М.А.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Напроксен (Nap) является одним из эффективных нестероидных противовоспалительных препаратов и оказывает противовоспалительное и жаропонижающее действие. Nap существует в двух формах: R- и S-энантиомеров, которые имеют различие в фармацевтической активности – S-Nap в 28 раз активнее. Таким образом, актуальной является разработка эффективных и надежных способов распознавания энантиомеров Nap [1-3].

В данном исследовании были разработаны новые вольтамперометрические сенсоры на основе аминокислотных комплексов меди  $[\text{Cu}(\text{S-Ala})_2] - [\text{Cu}(\text{S-Phe})_2]$  и цинка  $[\text{Zn}(\text{S-Ala})_2(\text{H}_2\text{O})] - [\text{Zn}(\text{S-Phe})_2(\text{H}_2\text{O})]$  для распознавания и определения энантиомеров напроксена. Сравнивая дифференциально-импульсные вольтамперометрические кривые энантиомеров Nap, установлено, что наилучший результат был продемонстрирован сенсором СУЭ/ПЭК- $[\text{Cu}(\text{L-Ala})_2] - [\text{Cu}(\text{S-Phe})_2]$ . Коэффициент его энантиоселективности  $i_{pS}/i_{pR} = 1,27$  и  $\Delta E_p = 30$  мВ. В качестве аналитического сигнала Nap рассматривали первый пик окисления, так как коэффициент селективности  $i_{p1S}/i_{p1R} > i_{p2R}/i_{p2S}$ . Из концентрационной зависимости определили линейный диапазон, который составляет от 0.25 мкМ до 1 мМ для сенсора СУЭ/ПЭК- $[\text{Cu}(\text{L-Ala})_2] - [\text{Cu}(\text{S-Phe})_2]$  и 0.5 мкМ до 1 мМ для сенсора СУЭ/ПЭК $[\text{Zn}(\text{S-Ala})_2(\text{H}_2\text{O})] - [\text{Zn}(\text{S-Phe})_2(\text{H}_2\text{O})]$ . Также были рассчитаны пределы обнаружения и нижние границы определяемых концентраций. Оба сенсора более чувствительны к S-энантиомеру.

Изученные в работе хелатные комплексы стабильны в условиях эксперимента и обеспечивают большую энантиоселективность по сравнению с аминокислотами при определении хиральных аналитов напроксена.

## Литература

1. Майстренко В. Н., Евтюгин Г. А., Зильберг Р. А. Энантиоселективные вольтамперометрические сенсоры. – Уфа: Башкирский государственный университет, 2018. – 189 с.
2. A Voltammetric Sensor Based on Aluminophosphate Zeolite and a Composite of Betulinic Acid with a Chitosan Polyelectrolyte Complex for the Identification and Determination of Naproxen Enantiomers / R. A. Zilberg, V. N. Maistrenko, Yu. B. Teres [et al.] // Journal of Analytical Chemistry. – 2023. – Vol. 78, No. 7. – P. 933-944. EDN PUAUAY.

3. Chiral selectors in voltammetric sensors based on mixed phenylalanine/alanine Cu(II) and Zn(II) complexes / R. A. Zilberg, T. V. Berestova, R. R. Gizatov [et al.] // *Inorganics*. – 2022. – Vol. 10, No. 8. – P. 117. – EDN CLFIKF.

© Сычева М.А., 2024

УДК 543.83/832

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОФЕИНА С ПОМОЩЬЮ ЭЛЕКТРОДА,  
МОДИФИЦИРОВАННОГО КОМПЛЕКСОМ Cu (II) С 8-  
ОКСИХИНОЛИНОМ

Толстых С.А., Агеенко Е.И.

*Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия*

Кофеин биологически активный компонент, широко потребляемый человеком, вследствие чего возникает необходимость его контроля в товарах широкого потребления.

Цель работы заключается в разработке методики определения кофеина методом вольтамперометрии с использованием угольно-пастового электрода (УПЭ) модифицированного комплексом Cu(II) с 8-оксихинолином.

Провели синтез комплекса, для этого к спиртовому 0,2 М раствору 8-оксихинолина прибавили раствор 0,1 М сульфата меди (II) в ацетатном буфере pH=5,5. После чего отфильтровали выпавший осадок, высушили при температуре 160 °С в течение 2 часов и измельчили. После чего к вазелиновому маслу добавили графитовый порошок и комплекс в соотношении 30:65:5% соответственно, довели до однородной массы и поместили в полипропиленовую трубку, снабженную токоотводом, получив УПЭ, который в дальнейшем выдерживался 2 дня. Определение проводили в трехэлектродной ячейке в качестве электрода сравнения использовали хлоридсеребрянный, а вспомогательный платиновый электрод. Регистрацию вольтамперной кривой проводили в потенциодинамическом режиме в диапазоне потенциалов от 1200–1800 мВ, со скоростью 50 мВ/с; модуляция 25 мВ 25 Гц.

Для изучения влияния pH использовали 0,1 М фосфатные буферы в широком диапазоне pH. Для этого вводили в ячейку 30 мл фонового раствора и 2 мл стандартного 0,01 М раствора кофеина и сравнивали площади пиков. Максимальный аналитический сигнал наблюдался в 0,1 М буфере фосфорной кислоты с pH=1,5.

Построили градуировочный график диапазоном от 32,5 мг/л до 324,7 мг/л. Величина достоверности аппроксимации 0,9994. Рассчитали предел обнаружения и линейный диапазон: 16,0 мг/л; 23,6 мг/л – 324,7 мг/л.

Провели анализ образцов газированной воды, содержащей кофеин:

Образец	Заявленный не более, мг/л	Обнаруженный, мг/л
“Добрый кола”	150	86±5
Энергетик “Volt”	330	220±30

© Толстых С.А., Агеев Е.И., 2024

УДК 543.552

### ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЖЕЛЕЗА (III) И ХРОМА (VI) В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ МЕТОДОМ ДОБАВОК НА МОДИФИЦИРОВАННОМ УГЛЕРОДСОДЕРЖАЮЩЕМ ЭЛЕКТРОДЕ

Фомина А.Э., Ковалева Ю.Н., Нипрук О.В.

*ФГАОУ ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия*

*ФГБОУ ВО МГУ им. Н.П. Огарева, Саранск, Россия*

Хром (VI) является токсичным и канцерогенным элементом, который может нанести вред здоровью человека и животных, в связи с чем следует контролировать его содержание, поскольку он может попадать в окружающую среду из нескольких источников (вода, почва, горные породы, вулканическая пыль и газы) [1]. Железо — широко распространенный элемент в окружающей среде, который играет важную роль в экологических и биологических системах: он содержится в небольших количествах в почве и в грунтовых водах, играет важную роль в системе транспорта кислорода и электронов, присутствующих в различных ферментах и т. д. [2]. Широкое распространение для электрохимического определения хрома (VI) и железа (III) получили методы адсорбционной и инверсионной вольтамперометрии. Предлагаемые в данной работе методики позволяют проводить определение этих элементов без применения трудоемкой стадии накопления.

Для исследования электрохимического поведения  $Fe^{+3}$  и  $Cr^{+6}$  готовили рабочие растворы Fe (III) и Cr (VI) концентрации 10 мг/л последовательным разбавлением в 10 раз из исходного раствора ГСО солей данных элементов с концентрацией 1000 мг/л с применением деионизированной воды (электропроводность не более 0,18 мкСм). Для регистрации вольтамперограмм использовали вольтамперометрический анализатор Та-Lab с трехэлектродной ячейкой. Углеродсодержащий электрод со свежесрезанной поверхностью модифицировали следующим образом: смешивали 0,5 мл раствора Au (III) концентрации 10 г/л и 4,5 мл 0,05 М хлористоводородной кислоты, в полученный раствор погружали электрод и наносили пленку золота при потенциале -0,1В в течение 40 с при вибрации 2 [1]. Затем поверхность электрода ополаскивали деионизированной водой и активировали ее в растворе 0,05 М серной кислоты в диапазоне потенциалов

от 1,5 В до 0 В в течение 5 циклов при скорости развертки 100 мВ/с. В качестве вспомогательных электродов и электродов сравнения использовали хлорсеребряные электроды, заполненные 3М КСl. Для определения  $Fe^{+3}$  потенциал линейно изменяли от 0,7 В до 0,2 В со скоростью развертки 20 мВ/с, а для  $Cr^{+6}$  потенциал линейно изменяли от 0,8 В до 0 В со скоростью развертки 50 мВ/с.

Определение железа (III) и хрома (VI) проводили методом добавок по следующей методике. К 10 мл деионизированной воды добавляли 0,1 мл раствора HCl 1:10 для определения Fe (III) или 0,3 моль/л  $HNO_3$  для определения Cr (VI) и регистрировали дифференциальную вольтамперограмму фона. Затем к полученному раствору добавляли 0,05 мл анализируемого раствора и записывали вольтамперограмму пробы. Далее последовательно делали по три добавки объемом 0,05 мл стандартного раствора железа (III) или хрома (VI) с концентрацией 10 мг/л. После каждой добавки записывали вольтамперограмму. Аналитический сигнал рассчитывали как разность силы тока раствора с пробой или добавкой и раствора фона при 0,55 В для железа (III) и 0,4 В для хрома (VI). Для каждого значения силы тока вводили поправку на величину остаточного тока.

Расчеты концентрации элементов проводили графическим методом с помощью программы Excel. С этой целью строили зависимость величины аналитического сигнала  $A$  от концентрации добавки  $C_d$ , рассчитывали уравнение полученной зависимости  $A = kC_d + b$ . Концентрацию аналита вычисляли как  $b/k$ . Разработанная методика позволяет определять концентрации железа (III) и хрома (VI) более 1 мг/л.

#### Литература

1. Kachoosangi R.T., Compton R.G. / Sensors and Actuators B: Chemical, 2013, Vol. 178, p. 555–562
  2. Kusum G. A. et al./ Research Journal of Chemistry and Environment, 2022, Vol. 26 (6)
- © Фомина А.Э., Ковалева Ю.Н., Нипрук О.В., 2024

УДК 543.552

### ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПЕНИЦИЛЛАМИНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СЕНСОРА НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА

Хайретдинова А.А., Перфилова Ю.А.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Определение биологически активных веществ является важной задачей в области аналитической химии и медицины [1]. Один из способов обнаружения таких веществ – использование вольтамперометрических сенсоров на основе наночастиц. В данной исследовательской работе для

определения пеницилламина (Пен) использовали стеклоуглеродный электрод (СУЭ), модифицированный наночастицами золота (Au-НЧ). Au-НЧ получали из водного раствора, содержащего 0.1 М  $\text{KNO}_3$ , 0.1 мМ  $\text{HAuCl}_4$ , электроосаждением в потенциостатическом режиме при  $E = -0.2$  В в течении 180 с. Вольтамперометрическое определение Пен проводили в универсальном буферном растворе с pH 4.0 методом дифференциально-импульсной вольтамперометрии (ДИВ) в диапазоне потенциалов от 0 до 1.1 В. При использовании сенсора СУЭ/Au-НЧ на вольтамперограмме наблюдаются два пика (рис. 1), соответствующие окислению Пен с участием тиольной группы, тогда как на СУЭ пики окисления Пен отсутствуют. Морфологические и электрохимические характеристики полученной сенсорной платформы исследованы с помощью методов сканирующей электронной микроскопии, спектроскопии электрохимического импеданса и циклической вольтамперометрии. Сенсор на основе наночастиц золота показал высокую селективность и точность определения Пен, в том числе в реальных образцах.

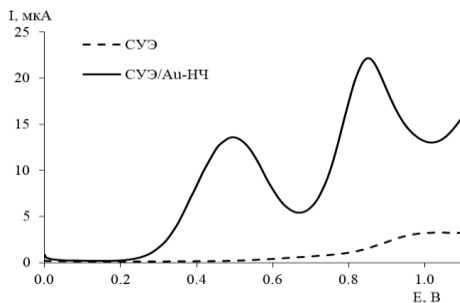


Рис. 1. ДИВ 0.25 мМ раствора Пен на СУЭ и СУЭ/Au-НЧ.

#### Литература

1. Yarkaeva Yu. A, Nazyrov M.I., Abdullin Ya. R. [et al.] Enantioselective voltammetric sensor based on mesoporous graphitized carbon black Carboxack X and fulvene derivative. – *Chirality*, 2023. – Vol. 1, P. 11. DOI: 10.1002/chir.23563.

© Хайретдинова А.А, Перфилова Ю.А., 2024

УДК 543.544.5.068.7

#### ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ ЛП МНН ФАВИПИРАВИР В УСЛОВИЯХ СТРЕСС-ИСПЫТАНИЙ МЕТОДОМ ВЭЖХ

Щукина Ю.Н., Зотова М.А., Ускова Е.Н.

ФГБОУ ВО МГУ им. Н. П. Огарёва, Саранск, Республика Мордовия

Фавипиравир, 6-фтор-3-гидрокси-2-пиазинкарбоксамид, представляет собой противовирусный препарат с широким спектром действия, который



эффективен против РНК-вирусов [1]. Фавипиравир не подвергается метаболизму с участием фермента СYP450, вместо этого он метаболизируется альдегидоксидазой и ксантиноксидазой. Этот препарат способен ингибировать альдегидоксидазу и изофермент СYP2C8, однако он не индуцирует цитохром СYP450 [1]. Он обладает выраженной противовирусной активностью против лабораторных штаммов вирусов гриппа А и В, а также выявлена его противовирусная активность *in vitro* относительно вируса SARS-CoV-2, вызывающего новую коронавирную инфекцию (COVID-19), поскольку целевой биомаркером активного РТФ-метаболита фавипиравира является РНК-зависимая РНК-полимераза (RdRp) вируса [2].

Проблемой трансформации лекарственных препаратов при хранении является образование продуктов деградации, которые могут снижать фармакологический эффект лекарственного средства, усиливать его побочное или токсическое действие. Моделирование процессов деструкции лекарственных препаратов при хранении проводят в ходе стресс-испытаний, которые проводятся для оценки воздействия более неблагоприятных условий, чем условия, используемые в ускоренных испытаниях хранения, в том числе, окисление вещества (например, перекисью водорода), кислотный и щелочной гидролиз, реакция вещества на повышение или понижение температуры, обработка объекта исследований ультразвуком, УФ-излучением, действие воды или её паров.

В настоящем исследовании проводили стресс-испытания Фавипиравира при воздействии кислоты разной концентрации, за счёт чего определялась его устойчивость в данной среде. В качестве основного аналитического метода, позволяющего объективно оценить изменения в испытываемой системе, применяли метод ВЭЖХ, условия хроматографирования выбирали в соответствии с требованиями соответствующей частной фармакопейной статьи [3]. В настоящем исследовании оценивалась стабильность ЛП МНН Фавипиравир в условиях протекания кислотного гидролиза. При проведении данного испытания использовали хлороводородную кислоту (1 моль/л).

Для приготовления анализируемого раствора использовали аттестованную фармацевтическую субстанцию МНН Фавипиравир с содержанием действующего вещества 99,20 масс. %. Испытания проводили с водным раствором с концентрацией МНН Фавипиравир 1,0 мг/мл. Для приготовления испытываемой системы отбирали 10,0 мл исходного раствора и добавляли к нему 1,0 мл свежеприготовленного 1 М раствора HCl. Температура экспозиции составляла  $24 \pm 1$  °С. Перед проведением хроматографирования испытываемый раствор нейтрализовали щелочью до pH 6,8 -7,0 с потенциометрическим контролем pH. Результаты ВЭЖХ-определения представлены ниже в таблицах 1 и 2.

Таблица 1

Фавипиравир 1 мг/мл + 1 М НСl (воздействие 1 час) при комнатной температуре

Название	Время удерживания, мин	Относительное время уд-я	Площадь пика, отн. ед.	Площадь пика, %	Высота пика	Чистота
Примесь X	3,033	0,196	1,5346	0,0074	0,2165	985,2
Примесь Y	4,452	0,288	4,6894	0,0227	0,3049	433,2
Примесь Z	5,703	0,369	1,3114	0,0063	0,1613	455,1
Фавипиравир	15,461	1,000	20664,5144	99,9635	1010,3363	998,3
		Сумма	20672,0498			

Таблица 2

Фавипиравир 1 мг/мл + 1М НСl (воздействие 4 часа) при комнатной температуре

Название	Время удерживания, мин	Относительное время уд-я	Площадь пика, отн. ед.	Площадь пика, %	Высота пика	Чистота
Примесь X	3,031	0,197	1,8750	0,0091	0,2461	996,2
Примесь Y	4,457	0,289	6,0084	0,0291	0,3590	451,9
Примесь Z	5,697	0,370	1,8289	0,0089	0,2071	317,4
Фавипиравир	15,407	1,000	20635,5476	99,9530	1010,3446	998,5
		Сумма	20645,2599			

Проведённые испытания показали высокую стабильность ЛП МНН Фавипиравир в условиях кислотного гидролиза при воздействии 1М НСl при комнатной температуре.

Литература

1. /Электронный ресурс/ <https://pubmed.ncbi.nlm.nih.gov/34040117/> The efficacy and safety of Favipiravir in treatment of COVID-19: a systematic review and meta-analysis of clinical trials.
2. Tam D.H., Qarawi A.,Luu M., Turnage M., Tran L., Tawfik G., et al. Favipiravir and its potential in COVID-19 pandemic: an update. // Asian Pacific Journal of Tropical Medicine. – 2021. – 14. – 443-9.
3. ФС 2.1.0478 Фавипиравир// <https://pharmacopoeia.regmed.ru/pharmacopoeia/izdanie-15/2/21/favipiravir/>

© Щукина Ю.Н., Зотова М.А., Ускова Е.Н., 2024

**СЕКЦИЯ**  
**«ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»**

УДК 543.42

СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ  
МЕТАЛЛОВ С МЕРКАПТОПУРИНОМ

Абдуллина А.З.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Меркаптопурин является цитотоксическим лекарственным средством. Содержащиеся в составе молекулы пуриновые основания аденина и гипоксантина влияют на биосинтез нуклеиновых кислот и, как было обнаружено, активны в отношении лейкозов человека. Меркаптопурин обладает противоопухолевыми и иммунодепрессивными свойствами. Структура меркаптопурина включает донорные участки серы и азота, которые преобразуются в соответствующие рибозиды. Координация этих участков с другими ионами, в частности, с ионами переходных металлов, повышает противоопухолевые свойства молекулы [1].

В работе [2] изучено комплексообразование меркаптопурина с ионами переходных металлов и установлено, что подобные металлокомплексы проявляют более высокую биологическую активность по сравнению с исходным лигандом, однако, структурные характеристики [3-5] полученных соединений остаются малоизученными.

С целью изучения структурной организации металлокомплексов с меркаптопурином, в представленной работе изучено взаимодействие меркаптопурина с ионами переходных металлов (Cu(II), Ni(II), Zn(II), Co(II)) в соотношении 1:1 и 2:1 [3-5] в водных растворах. Найдены условия проведения комплексообразования. Показано, что растворение меркаптопурина в водной среде осуществляется только при повышении температуры реакционной среды до 70°C. Добавление этанола практически не влияет на повышение растворимости соединения. Комплексные соединения выделены и изучены методами ИК- и УФ-спектроскопии, а также элементным анализом.

Литература

1. Marquez E., Mora J, Flores-Morales V., Insuasty D., Calle L. // *Molecules* 2020, 25, 24.
2. A.A. Sharfalddin, A-H. Emwas, M. Jaremko, M.A. Hussien, *Journal Applied Organometallic Chemistry* 35,1, 2021
3. Zilberg R.A., Berestova T.V., Gizatov R.R., Teres Y.B., Galimov M.N., Bulysheva E.O. // *Inorganics*. 2022. 10(8). P. 117
4. Berestova T.V., Gizatov R.R., Galimov M.N., Mustafin A.G. // *J. Mol. Struct.* 2021. 1236. 130303.
5. Berestova T.V., Khursan S.L., Mustafin A.G. // *J. Spectrochim. Acta, Part A.* 2020. 229. 117950

© Абдуллина А.З., 2024

ВЛИЯНИЕ НЕИОНОГЕННОГО И АНИОННОГО ФЛОКУЛЯНТОВ НА  
ЦЕМЕНТАЦИЮ КАДМИЯ ПОРОШКОМ ЦИНКА

Агеенко Е.И., Колесников А.В.

*Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия*

Высокомолекулярные поверхностно-активные вещества (флокулянты), используемые в гидрометаллургическом производстве цинка, могут загрязнять растворы, подаваемые на цементацию. В настоящее время известные флокулянты анионной и неионогенной природы с близкими молекулярными массами. Цель работы заключается в сравнении влияния полиакриламида и анионного полиакриламида на цементацию кадмия порошком цинка.

Добавление флокулянтов приводит к изменению формы кинетической кривых, происходит исчезновение третьего участка на последних. К тому же наблюдается снижение степени цементации кадмия  $\alpha$ , достигаемой через 10 минут после начала проведения процесса при 50 °С и увеличению кажущихся энергий активации  $E_a$  (см. таблицу).

В присутствии флокулянтов происходит смена режима протекания цементации со смешенного на кинетический. Наибольшее влияние на  $E_a$  на втором участке кривых наблюдается в случае анионного флокулянта, что связано с адсорбцией добавки на катодных участках короткозамкнутого гальванического элемента  $Zn | Cd$ , возникающего при протекании цементации. Добавление неионогенного флокулянта приводит к большему снижению степени цементации кадмия через 10 минут после начала процесса. Анализ твердых продуктов цементации показал, что добавление неионогенного флокулянта повышает расход порошка цинка за счет увеличения интенсивности протекания побочной реакции выделения водорода. Напротив, присутствие анионного флокулянта снижает расход цинка на протекание побочных реакций.

Таким образом, наличие флокулянтов в растворах, поступающих на цементационную очистку, приводит к увеличению продолжительности цементации с целью достижения допустимых степеней цементации и может увеличивать расход порошка цинка.

Флокулянт	$\alpha$ , %	$E_a$ , кДж/моль		
		Участок кинетической кривой		
		Первый	Второй	Третий
Без добавки флокулянта	73	46±5	33±3	13±2
Неионогенный	24	46±4	37±2	–
Анионный	44	45±5	45±5	–

© Агеенко Е.И., Колесников А.В., 2024

УДК 543.544

СОРБЦИЯ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОТРИАЗОЛА И 1,2,4-ТРИАЗОЛА В УСЛОВИЯХ ОФ ВЭЖХ

Алексеев Н., Курбатова С.В.

*Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия*

Постоянный интерес к химии азотсодержащих ароматических гетероциклов обусловлен, прежде всего, их высокой биологической активностью, а также другими важными практическими свойствами, благодаря которым эти вещества используют при создании лекарственных препаратов широкого спектра действия, ингибиторов коррозии, автомобильных антифризов, полировочных материалов и т.д.

Целью нашей работы явилась сравнительная характеристика сорбции производных бензотриазола и 1,2,4-триазола на октадецилсиликагеле (ОДС) и пористом графитированном углероде (ПГУ) из водноацетонитрильных растворов в условиях обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии (ОФ ВЭЖХ). Эксперимент проводили в условиях, описанных в [1]. Удерживание веществ характеризовали величиной фактора удерживания, рассчитанного известным способом [2].

Из полученных данных следует, что производные бензотриазола в условиях ОФ ВЭЖХ удерживаются значительно дольше по сравнению с производными 1,2,4-триазола как на модифицированном силикагеле, так и на ПГУ, что обусловлено строением молекул соответствующих анализов. Развитая ароматическая система производных бензотриазола способствует усилению взаимодействия его производных с поверхностью ПГУ, однако, присутствие нескольких гетероатомов и наличие функциональных групп в молекулах сорбатов усиливают их взаимодействие с компонентами подвижной фазы. Таким образом, при сорбции на ПГУ преобладают взаимодействия молекул сорбатов с поверхностью сорбента, а при сорбции на ОДС решающую роль в хроматографическом процессе играют взаимодействия с компонентами элюента. Тем не менее, в целом характеристики удерживания всех исследованных веществ изменяются симбатно физико-химическим параметрам, ответственным за межмолекулярные взаимодействия в ОФ ВЭЖХ (объем, липофильность, поляризуемость).

Для описания зависимости удерживания от состава подвижной фазы нами использована модель Снайдера - Сочевинского, аппроксимирующая эту зависимость уравнением вида  $lg k = a - n'lg x_m$ . В целом практически для всех исследованных соединений (за некоторыми исключениями) наблюдается удовлетворительная корреляция между значениями  $lg k$  и концентрацией ацетонитрила со значениями коэффициента аппроксимации

в диапазон 0.91-0.99 для сорбции на ПГУ и в диапазоне 0.80 – 0.99 для сорбции на ОДС, что является косвенным подтверждением различного влияния взаимодействия аналитов с использованными сорбентами и компонентами элюента.

Из полученных данных и в соответствии с трактовкой коэффициента  $n'$  в уравнении Снайдера – Сочевинского следует, что в среднем одна молекула сорбата вытесняет с поверхности ОДС 1 молекулу ацетонитрила, с поверхности ПГУ – 1-3 молекулы ацетонитрила, при этом 2-3 молекулы ацетонитрила вытесняют сорбаты, определение стереохимии которых показало максимальное уплощение этих молекул.

Максимальные отклонения от линейной зависимости для сорбции на ПГУ наблюдаются для производных 1,2,4-триазола, содержащих в структуре молекулы гидроксильные группы, способные к образованию водородных связей с компонентами подвижной фазы (4-(1H-триазол-1-илметил) фенол и 2-(1H-триазол-1-илметил) фенол). При сорбции на ОДС максимальные отклонения от модели Снайдера – Сочевинского характерны для производных бензотриазола с большими значениями дипольного момента, причем существенное увеличение значений фактора удерживания наблюдается при уменьшении концентрации ацетонитрила до 25% вплоть до необратимой сорбции некоторых соединений. Возрастание концентрации ацетонитрила в элюенте до 80% существенно уменьшает удерживание, при этом величина фактора удерживания производных триазола на ОДС оказывается меньше единицы.

На основании полученных данных сделан вывод о том, что при варьировании состава подвижной фазы ПГУ оказывается весьма чувствительным к строению производных бензотриазола и 1,2,4- триазола, что позволит использовать это сорбент для разделения соответствующих смесей соединений.

#### Литература

1. Джабиева С.А., Курбатова С.В., Белоусова З.П. Журнал физической химии. 2016. - Т. 90, № 2. С. 264–271.
2. Шатц В.Д., Сахартова О.В. Высокоэффективная жидкостная хроматография. Рига: Зинатне, 1988. 390 с.

© Алексеев Н., Курбатова С.В., 2024

## DFT ИССЛЕДОВАНИЕ РЕГИОИЗОМЕРОВ ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ ГАЛОГЕНМЕТИЛКЕТОНОВ К ФУЛЛЕРЕНУ

Алексеева О.Л., Саттарова А.Ф.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

В настоящее время модификации фуллера органическими заместителями с обеспечением большого выхода целевых продуктов остается важной задачей, стоящей перед химиками-синтетиками. Одним из наиболее распространенных способов направленного синтеза новых функциональных производных  $C_{60}$  является реакция Бингеля, относящаяся к реакциям нуклеофильного циклопропанирования со стабилизированными карбанионами [1]. Вследствие высокой реакционной способности  $C_{60}$  в ходе реакции образуется большое количество побочных аддуктов, появление которых необходимо контролировать. Так, последующее присоединение второго заместителя сопровождается образованием девяти региоизомеров диприсуоединения [2].

В настоящей работе в программном пакете Gaussian'09 с применением метода B3LYP/6-31G(d) проводилось исследование термодинамической стабильности всех возможных продуктов взаимодействия галогенметилкетонров (Hal – Cl, Br, I) с  $C_{60}$  в присутствии сильного основания DBU [3] (рис. 1).

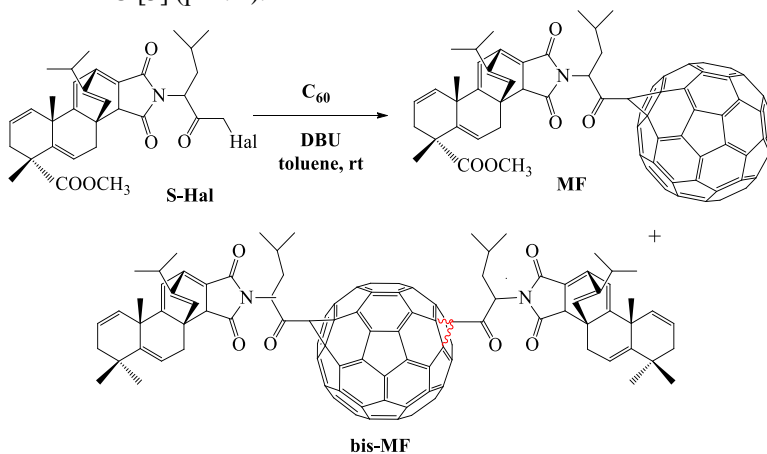


Рис.1. Схема получения продуктов функционализации фуллера по методике Бингеля: метил 2-(1-(1f, 2f-метанофуллерен-5'-ил)-4-метил-1-оксопентан-2-ил)-12-изопропил-6, 9-диметил-1, 3-диоксогексадекагидро-3, 11-этенафто [2, 1-е] изоиндол-6-карбоксилат (MF) и диметил 2, 2'-[1, 1'-(диметанофуллерен-3, 3'-ил) бис (4-метил-1-оксо-1, 2-пентандиил)] бис [6, 9-



диметил-12-(1-метилэтил)-1,3-диоксогексадекагидро-3,11-этенонфто [2,1-*e*] изоиндол-6-карбоксилат] (**bis-MF**).

В качестве термодимического параметра использовалась свободная энергия Гиббса. Сравнение осуществлялось по свободной энергии Гиббса самого термодинамически выгодного *e''* – региоизомера обладающего минимальной энергией относительно остальных (рис. 2).

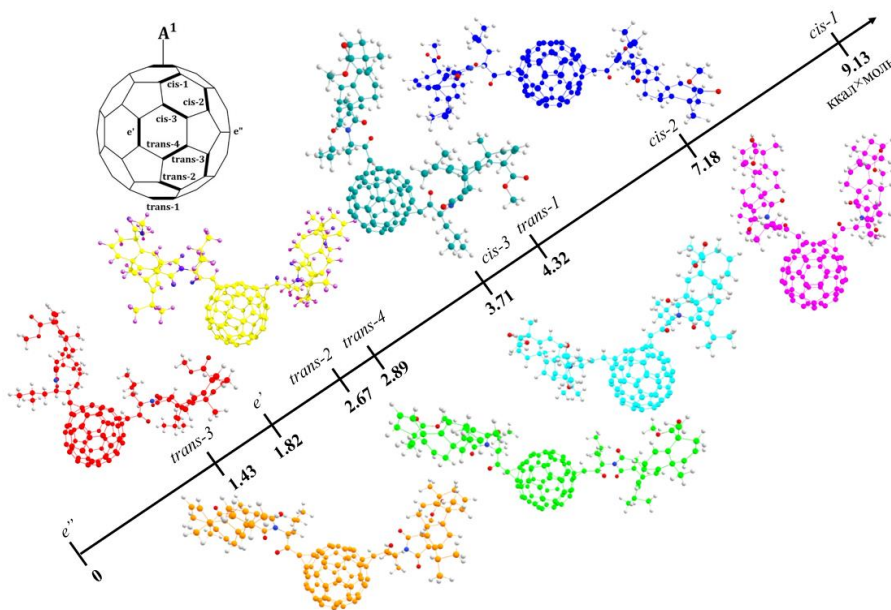


Рис. 2. Позиционное расположение региоизомеров ди – циклопропанирования по методике Бингеля.

По результатам исследования установлено, что наиболее термодинамически устойчивыми региоизомерами являются экваториальные (*e'*, *e''*) и *trans-3* изомеры, обладающие наименьшей энергией, что согласуется с эмпирически установленным рядом фундаментальных принципов касаемых региохимии полиприсоединения [2].

#### Литература

1. Bingel C. Cyclopropanierung von Fullerenen // Chemische Berichte. 1993. V. 126. P. 1957 – 1959
2. Djojo F., Herzog A., Lamparth I., Hampel F., Hirsch A. Regiochemistry of twofold additions to [6,6] bonds in C<sub>60</sub>: influence of the addend-independent cage distortion in 1,2-monoadducts//Chemistry – A European Journal. 1996. V. 2. P. 1537-1547
3. Sakhautdinov I.M., Malikova R.N., Nugumanov T.R., Biglova Yu.N., Atangulov A.B., Yunusov M.S. Bingel cycloaddition of N-maleopimarimide-substituted amino-acid

УДК: 542.61:546,72:542

## ИССЛЕДОВАНИЕ ЭКСТРАКЦИИ ЦИНКА ИЗ РАСТВОРОВ СОЛЯНОЙ КИСЛОТЫ ДИГЕКСИЛСУЛЬФОКСИДОМ

Афзалетдинова Н.Г., Цыкалова М.М., Гайнуллина Ю.Ю.

*Уфимский Институт химии Уфимского федерального исследовательского центра РАН, Уфа, Россия*

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Изучена экстракция цинка(II) из 4.0 моль/л раствора соляной кислоты дигексилсульфоксидом в толуоле. Найдены оптимальные условия извлечения: время контакта фаз, концентрация соляной кислоты. Определено сольватное число. Предположено, что цинк(II) при времени контакта фаз 10 мин экстрагируются по анионообменному механизму при концентрации соляной кислоты 4.0 моль/л с образованием экстрагируемого соединения состава  $[HL]^+[ZnCl_3(H_2O)]^-$ . Сольватное число, определенное методом сдвига равновесия, оказалось равным единице при времени контакта фаз, равном 10 минут. Среднее значение концентрационной константы экстракции цинка(II) оказалось равным  $95.1 \pm 0.5$ . Изотермы экстракции цинка(II), построенные в логарифмических координатах подтверждают переход цинка(II) из водной фазы в органическую в форме мономерного соединения. Тангенс угла наклона прямой равен единице. Кондуктометрические измерения молярной электропроводности экстрактов цинка с дигексилсульфоксидом, выделенных при экстракции из раствора с концентрацией соляной кислоты 4.0 моль/л, показали, что они являются электролитами.

При увеличении времени контакта фаз до 30 мин. цинк(II) из раствора с  $C_{HCl} = 4.0$  моль/л извлекается в форме нейтрального комплекса состава  $[ZnCl_2 \cdot L_2]$ . Методом сдвига равновесия из наклона прямой, построенной в координатах  $lgD_{Zn(II)} - f(lgScv)$ , определено количество молекул экстрагента, входящих в состав извлекаемого соединения ( $q=2$ ). Кондуктометрические измерения молярной электропроводности экстрактов цинка(II) с дигексилсульфоксидом в ацетоне, выделенных при экстракции из растворов с концентрацией соляной кислоты 4.0 моль/л показали, что они не являются электролитами. Экстрагируемые хлорокомплексы цинка(II), выделенные при времени контакта фаз 10 и 30 минут охарактеризованы методом ИК спектроскопии и элементного анализа. Изучена реэкстракция цинка(II) водой при извлечении его из раствора соляной кислоты с концентрацией 4.0 моль/л.

Литература

1. Gallardo V., Navarro R., Saucedo I., Avila M., Guibal E. Zinc(II) extraction from hydrochloric acid solutions using amberlite XAD-7 Impregnated with Cyphos IL 101 // Separation Science and Technology. 2008. V. 43. P. 2434-2439.

© Афзалетдинова Н.Г., Цыкалова М.М., Гайнуллина Ю.Ю., 2024

УДК 542.943-92:547.85

КИНЕТИКА ОЗОНИРОВАННОГО ОКИСЛЕНИЯ ОРОТОВОЙ  
КИСЛОТЫ В ВОДНОЙ СРЕДЕ

Бадретдинова Ю.И., Борисова Н.С., Зимин Ю.С.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Действие многочисленных физических и химических факторов окружающей среды приводит к образованию повреждений в молекулах ДНК и РНК. К таким факторам относятся ультрафиолетовое и ионизирующее излучение; температура; природные изотопы; химически активные соединения, например, озон, являющийся сильнейшим окислителем. Согласно литературным данным, значительную долю эндогенных повреждений нуклеиновых кислот составляют именно окислительные превращения азотистых оснований.

Ранее в работах [1, 2] были изучены кинетические закономерности озонированного окисления пиримидиновых оснований (тимина, цитозина и урацила). Известно, что данные соединения синтезируются во всех клетках организма из аспарагиновой кислоты, глутамина и углекислого газа под воздействием ферментов. Предшественником тимина, цитозина и урацила в реакциях синтеза является оротовая кислота (ОрК). Поэтому немалый интерес представляет изучение окислительной способности озона по отношению к ОрК.

Кинетику реакции озона с оротовой кислотой в водной среде изучали спектрофотометрическим методом. Исследования проводили при равенстве начальных концентраций реагирующих веществ. Установлено, что реакция протекает по кинетическому уравнению второго порядка (первого – по озону и первого – по оротовой кислоте). В интервале 281–309 К изучена температурная зависимость константы скорости второго порядка. Обработав полученные данные в координатах уравнения Аррениуса, были вычислены значения логарифма предэкспоненциального множителя  $\lg A$  и энергии активации  $E$ . Обнаружено, что значения активационных параметров, найденные в настоящей работе и взятые из литературы [1, 2], удовлетворительно линеаризуются в координатах  $E = f(\lg A)$ . Данная

линеаризация свидетельствует, скорее всего, о едином механизме лимитирующей стадии озонированного окисления изученных производных пиримидина.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.*

#### Литература

1. Максютова А.А., Хайнасова Э.Р., Зимин Ю.С. Кинетика реакций озона с аденином и цитозином в водных растворах // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. 2020. Т. 63. № 10. С. 17-22.
2. Максютова А.А., Зимин Ю.С., Гимадиева А.Р., Мустафин А.Г. Кинетика окисления урацила и его производных озонем в водных растворах // Журнал физической химии. 2019. Т. 93. № 9. С. 1322-1327.

© Бадретдинова Ю.И., Борисова Н.С., Зимин Ю.С., 2024

УДК 620.91:544.018.2

### ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПОДГОТОВКИ АЛЮМИНИЕВОЙ ФОЛЬГИ НА СИНТЕЗ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК НА ЕЁ ПОВЕРХНОСТИ

Барков<sup>1,2</sup>А.Г., Мишинкин<sup>1</sup> В.Ю., Кузьмина<sup>1</sup> Е.В., Колосницын<sup>1</sup> В.С.

<sup>1</sup>Уфимский институт химии Уфимского федерального исследовательского центра  
Российской академии наук, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россия

Углеродные нанотрубки (УНТ) как аллотропная форма углерода обладают огромным потенциалом применения, благодаря своим тепло- и электропроводным свойствам, а также механической прочности и развитой поверхности. Так, при использовании их в качестве активных компонентов электродов суперконденсаторов можно повысить величину накапливаемого заряда и скорость ее высвобождения, так как используется развитая удельная поверхность нанотрубок. Большая площадь поверхности и исключительная электронная проводимость УНТ делают их главными кандидатами для высокопроизводительных и высокоскоростных электрохимических применений [1].

Обычно при изготовлении электродов используют метод отливки суспензии на токовый коллектор (металлическую фольгу). Это метод имеет ряд недостатков, таких как сложность технологического исполнения, связанного с необходимостью использования органических растворителей (например улавливание паров растворителя в процессе сушки электродных полотен), необходимость использования полимерного связующего, приводящего к частичной блокировке поверхности углеродных нанотрубок и увеличению удельного сопротивления электродов. В случае синтеза

нанотрубок непосредственно на поверхности фольги – озвученные проблемы будут устранены.

Целью работы было изучение влияния условий предварительной обработки алюминиевой фольги на синтез на её поверхности углеродных нанотрубок методом газофазного осаждения углеводородов.

В исследованиях мы использовали алюминиевую фольгу техническую толщиной 16 мкм. Нанесение катализатора осуществляли на алюминиевую фольгу, обработанное ацетоном, выдержанную в 1М NaOH 1 и 3 минут. Предварительно, алюминиевую фольгу обезжиривали ацетоном для снятия масляной пленки, образующейся при ее производстве, затем ее помещали на 1-5 минуты в водный раствор щелочи 1М NaOH для снятия пассивированного слоя алюминиевой фольги и на 30 минут в 20% водный раствор нитрата никеля при температуре 90°C. Значения полученных масс УНТ и катализатора, а также толщина фольги при различных воздействиях на фольгу указаны в таблице. Синтез углеродных нанотрубок на поверхности алюминиевой фольги производили путем газофазного осаждения паров этанола в аргоне при температуре 600°C в течение 90 минут.

Выявлено, что обработка алюминиевой фольги ацетоном не влияет на свойства и равномерность распределения углеродного слоя. На алюминиевой фольге, без предварительной обработки и выдержанной в ацетоне, после синтеза углеродных материалов из парогазовой фазы наблюдаются начальные участки алюминиевой фольги без углеродного слоя.

При обработке алюминиевой фольги раствором 1М NaOH снимается пассивированный слой фольги, чтобы обеспечивать равномерное покрытие никелем, в качестве катализатора роста углеродных нанотрубок на поверхности фольги.

Таблица

Влияние условий обработки алюминиевой фольги на синтез нанотрубок при 600 °С газофазного осаждения из паров этанола

Параметры	Ацетон	1 мин в 1М растворе NaOH	3 мин в 1М растворе NaOH
Потеря массы при про травливании щелочью, г	-	0,0195	0,0517
Масса нанесенного катализатора	0,0016	0,0060	0,0069
Масса УНТ на алюминиевой фольге	0,0195	0,0281	0,296
Толщина после обработки щелочи, мкм	-	16	12
Толщина после нанесения никеля, мкм	18	18	15
Толщина после синтеза УНТ, мкм	18	20	20
Однородность покрытия нанотрубками	<50% покрытия	>90% покрытие поверхности	100 %

*Работа выполнена в рамках государственного задания № 124032600061-3.*

Литература

1. ACS Appl. Mater. Interfaces 2022, 14, 49, 54981–54991 Publication Date: November 30, 2022.

© Барков А.Г., Мишинкин В.Ю., Кузьмина Е.В., Колосницын В.С., 2024

УДК 546.26:544.576:544.126.3

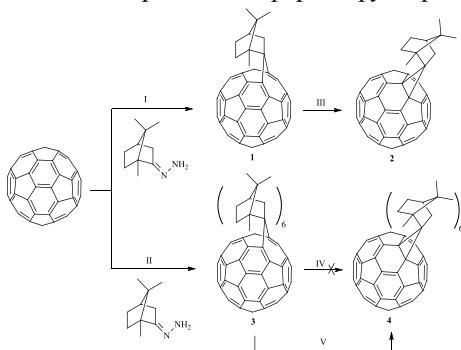
**СТРУКТУРНАЯ ИЗОМЕРИЗАЦИЯ ГЕКСААДДУКТА НА ОСНОВЕ ФУЛЛЕРЕНА C<sub>60</sub> И КАМФОРЫ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАЗВУКА**

Боровик<sup>1</sup> Е.В., Кинзябаева<sup>2</sup> З.С., Ахметов<sup>2</sup> А.Р., Алехина<sup>1</sup> И.Е.

<sup>1</sup> Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

<sup>2</sup> Институт нефтехимии и катализа Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, Уфа, Россия

При взаимодействии фуллерена C<sub>60</sub> с диазосоединениями в термических условиях образуется смесь метанофуллеренов (6,6-закрытый изомер) и гомофуллеренов (5,6-открытый изомер). В условиях металлокомплексного катализа удаётся селективно получить либо 5,6-открытые, либо 6,6-закрытые изомеры фуллерена C<sub>60</sub> [1-3]. Ранее [3] при взаимодействии гидразона D-(+)-камфоры с фуллереном C<sub>60</sub> был получен спиро-гомофуллерен **1** (схема).

Взаимодействие гидразона камфоры с фуллереном C<sub>60</sub>

Реагенты и условия: I) соотношение 1:1, MnO<sub>2</sub>, 20°C, 1.5 ч, Pd(acac)<sub>2</sub>:2PPh<sub>3</sub>:4Et<sub>3</sub>Al; II) соотношение 1:10; III) 15 ч, 110°C, толуол; IV) 100 ч, 180°C, о-дихлорбензол; V) ультразвук, 1ч, 20°C.

Термическая изомеризация соединения **1** протекала в мягких условиях с образованием соответствующего 6,6-закрытого аддукта **2** [3]. В данной работе по ранее разработанной методике [3] был получен гексааддукт спиро-гомофуллерена, содержащий структурный фрагмент камфоры **3**. Полученный полиаддукт **3**, в отличие от моноаддукта **1**, не подвергается термической изомеризации даже при кипячении в одихлорбензоле (180°C) в течение 100 часов. Однако, применение ультразвука (22 КГц, 20 Вт) в течение 1 часа при 20 °С позволил с количественным выходом получить 6,6-закрытый изомер **4** (схема). Идентификация полиаддуктов **3** и **4** была проведена с использованием одномерных и двумерных методик ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C и ИК-спектроскопии.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (№ 23-23-00007).*

## Литература

1. Tuktarov, A. R.; Khuzin, A. A.; Korolev, V. V.; Dzhemilev, U. M. Catalytic cycloaddition of diazoalkanes with heterocyclic substituents to fullerene C<sub>60</sub>. Russ. J. Org. Chem. 2012, 48, 99–103.
2. Tuktarov, A. R.; Korolev, V. V.; Tulyabaev, A. R.; Yanybin, V. M.; Khalilov, L. M.; Dzhemilev, U. M. Cycloaddition of diazocycloalkanes to [60]fullerene in the presence of Pd-containing complex catalyst. Russ. Chem. Bull. 2010, 59, 977–983.
3. Dzhemilev, U. M.; Tuktarov, A. R.; Korolev, V. V.; Khalilov, L. M. Cycloaddition of cage and polycyclic diazo compounds to C60 fullerene catalyzed by Pd(acac)<sub>2</sub>-2PPh<sub>3</sub>-4Et<sub>3</sub>Al. Pet. Chem. 2011, 51, 123–127.

© Боровик Е.В., Кинзябаева З.С., Алехина И.Е., Ахметов А.Р., 2024

НОВЫЙ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЙ КОМПЛЕКС ДВУХВАЛЕНТНОГО  
ЕВРОПИЯ С КОРИЧНОЙ КИСЛОТОЙ

Василюк К.С., Якупова С.М.

*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

В настоящее время большой интерес к люминесцентным соединениям двухвалентного европия вызван возможностью их применения в качестве контрастных реагентов визуализации физических и биологических процессов, фотокатализаторов, люминесцентных термометров и др. [1]. В связи с этим, получение новых люминесцирующих соединений двухвалентного европия с применением эффективных и малозатратных методов является актуальной задачей физикохимии РЗЭ. В настоящей работе впервые показана возможность синтеза в мягких условиях нового люминесцирующего комплекса двухвалентного европия  $\text{Eu}(\text{L})_2(\text{THF})_4$  ( $\text{L} =$  лиганд-анион кислоты  $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}=\text{CHCOO}^-$ ) [2].

Комплекс  $\text{Eu}(\text{L})_2(\text{THF})_4$  был синтезирован путем взаимодействия суспензии кристаллогидрата циннамата европия(III)  $\text{Eu}(\text{L})_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  с  $^i\text{Bu}_2\text{AlH}$  в ТГФ в атмосфере аргона при комнатной температуре и атмосферном давлении. Под действием избытка алюминийалкила в реакционной системе последовательно протекают реакции дегидратации  $\text{Eu}(\text{L})_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$  и восстановления  $\text{Eu}^{3+}$  до  $\text{Eu}^{2+}$ , что хорошо видно по изменению спектров фотолюминесценции (ФЛ) и цвета реакционной взвеси. Полученный комплекс  $\text{Eu}(\text{II})$  был выделен в твердом виде и охарактеризован с применением комплексонометрического титрования ( $\text{Eu}^{2+}$ ), ИК-спектроскопии, элементного анализа (С, Н, О). Состав полученного соединения соответствует брутто-формуле  $\text{Eu}(\text{L})_2(\text{THF})_4$ , а его выход составил 68 %.

С целью изучения спектрально-люминесцентных свойств комплекса  $\text{Eu}(\text{L})_2(\text{THF})_4$  были измерены спектры ФЛ ( $\lambda_{\text{ФЛ}} = 515$  нм), возбуждения ФЛ, время жизни  $\text{Eu}^{2+*}$  ( $\tau = 377$  нс) и квантовый выход ФЛ (5 %). Установлено, что полученный комплекс  $\text{Eu}(\text{L})_2(\text{THF})_4$  обладает яркой видимой глазом ФЛ, что делает перспективным его использование в качестве допанта при создании новых люминофоров зеленого цвета.

## Литература

1. Acharjya A., Corbin B.A., Prasad E., Allen M.J., Maity S. Solvation-controlled emission of divalent europium salts. – J. Photochem. Photobiol. A. – 2022. – V. 429. – P. 113892–113899.
2. Галимов Д.И., Якупова С.М., Василюк К.С., Булгаков Р.Г., Синтез и люминесцентные свойства нового комплекса двухвалентного европия с коричной кислотой  $\text{Eu}(\text{L})_2(\text{THF})_4$  ( $\text{L} =$  лиганд-анион  $\text{C}_6\text{H}_5\text{CH}=\text{CHCOO}^-$ ). – Башкирский химический журнал. – 2024. – Т. 31. – № 1. – С. 12-17.

© Василюк К.С., Якупова С.М., Галимов Д.И., 2024



КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ 5-ФТОРУРАЦИЛА И ОРОТОВОЙ  
КИСЛОТЫ С  $\alpha$ -,  $\beta$ - И  $\gamma$ -ЦИКЛОДЕКСТРИНАМИ

Гадиева Э.А., Фатхулова А.М.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Повышение растворимости, уменьшение токсичности, регуляция скорости и направленности действия, степени высвобождения лекарственных средств из различных носителей – это самые важные и актуальные задачи современной фармацевтической химии. Существуют различные способы их решения, одним из которых является комплексообразование лекарственных препаратов с циклодекстринами (ЦД) по типу «хозяин–гость». Циклодекстрины уже давно используются учеными в технологии создания множества лекарственных форм – таблеток, мазей, глазных капель. В связи с изложенным интерес вызывает комплексообразование ЦД с оротовой кислотой (ОК) и 5-фторурацилом (5-FУ) с целью снижения токсичности лекарств, улучшения эффективности препаратов и лучшей растворимости веществ.

Изучение комплексообразования разных биологически активных веществ с полимерными и олигомерными субстратами давно ведется на базе кафедры ФХ и ХЭ УУНИТ [1, 2]. Взаимодействие  $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ -ЦД с ОК и 5-FУ изучали на УФ-спектрофотометре Shimadzu UV-2406. Сдвиг в коротковолновую область и увеличение интенсивностей сигналов, наблюдаемых при введении в водные растворы ОК и 5-FУ циклодекстринов, свидетельствуют об образовании комплексных соединений. Применение метода изомолярных серий позволило рассчитать состав комплексных соединений – он оказался равным 1:1 для всех изучаемых систем. Методом молярных отношений определены константы устойчивости полученных комплексов ( $T = 291 \div 316$  К). Отрицательные значения термодинамических параметров, рассчитанные на основе температурных зависимостей констант устойчивости комплексов, указывают на следующие выводы: взаимодействия  $\alpha$ -,  $\beta$ -,  $\gamma$ -ЦД с ОК и 5-FУ протекают с выделением тепла и уменьшением вращательных и колебательных движений молекул.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.*

## Литература

1. Зимин Ю.С., Кутлугильдина Г.Г., Рамазанова З.Ф., Мустафин А.Г. Взаимодействие окисленной фракции поливинилового спирта с производными урацила в водных растворах / Журнал физической химии. 2022. Т. 96. № 8. С. 1159-1164.

2. Ibrakova, N.F., Kutlugildina, G.G., Zimin, Y.S. Complexation of praziquantel with  $\alpha$ -,  $\beta$ - and  $\gamma$ -cyclodextrins in aqueous-alcoholic solutions // Periodico tche quimica. 2020. Vol. 17. No. 36. Pp. 302-314.

© Гадиева Э.А., Фатхулова А.М., 2024

УДК 544.654.076.324.2

МОДИФИКАЦИЯ АНОДОВ НА ОСНОВЕ ОКСИДОВ МАРГАНЦА И  
КОБАЛЬТА ОКСИДАМИ ВОЛЬФРАМА И МОЛИБДЕНА ДЛЯ  
ЭЛЕКТРОЛИЗА РАЗБАВЛЕННЫХ ХЛОРИДНЫХ РАСТВОРОВ

Ганган<sup>1</sup> Ю.В, Щитовская<sup>1,2</sup> Е.В.

<sup>1</sup>Департамент химии и материалов ИТПМ ДВФУ, Владивосток, Россия

<sup>2</sup>Институт химии ДВО РАН, Владивосток, Россия

В настоящее время Мировой океан рассматривается как источник возобновляемых энергетических ресурсов. Наибольшее внимание уделяется тепловым энергетическим ресурсам вследствие их большой мощности, наибольшей плотности извлечения энергии и лучших технико-энергетических характеристик энергостанций [1].

Среди известных методов получения водорода из воды, приоритет принадлежит прямому электролизу морской воды, учитывая ее доступность и возможность получать электрическую энергию непосредственно в океане (на плавучих платформах или у берега) [2]. Одной из проблем является поиск композиций каталитических покрытий анодов, используемых при электролизе разбавленных хлоридных растворов и морской воды.

Активное покрытие электродов получали методом термического разложения нитратов Со и Мп или их смеси на подложке титана ВТ 1-0. В качестве модифицирующих добавок использовали  $\text{Na}_2\text{MoO}_4$  и  $\text{Na}_2\text{WO}_4$ . Покрытия подвергали термообработке при температуре 400 °С в течение 40 минут. Селективность полученных анодов к реакции выделения хлора изучали при электролизе раствора хлорида натрия с концентрацией 30 г/л. Концентрацию активного хлора определяли методом йодометрического титрования и рассчитывали выход по току активного хлора ( $\text{ВГак}$ ) в процессе электролиза (рисунки 1, 2).

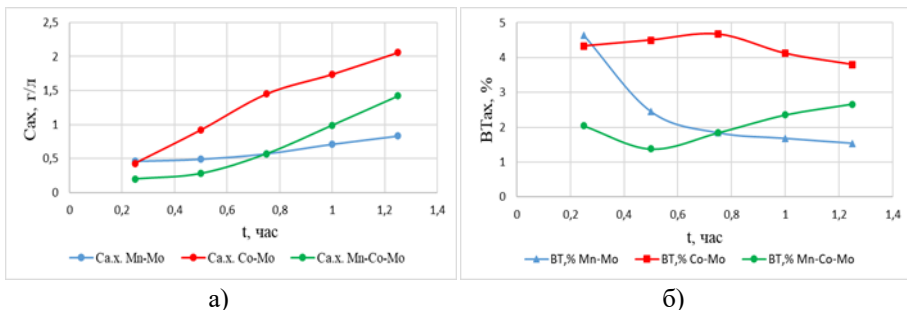


Рис. 1. Зависимость концентрации (а) и выхода по току (б) активного хлора от времени электролиза для анодов с добавлением молибдена в растворе хлорида натрия 30 г/л.

Из рисунка 1 видно, что концентрация и выход по току активного хлора для анода Ti/Co-Mo более высоки, тогда как для анода Ti/Mn-Mo они не превышают 0,63 г/л и 4,6% соответственно.

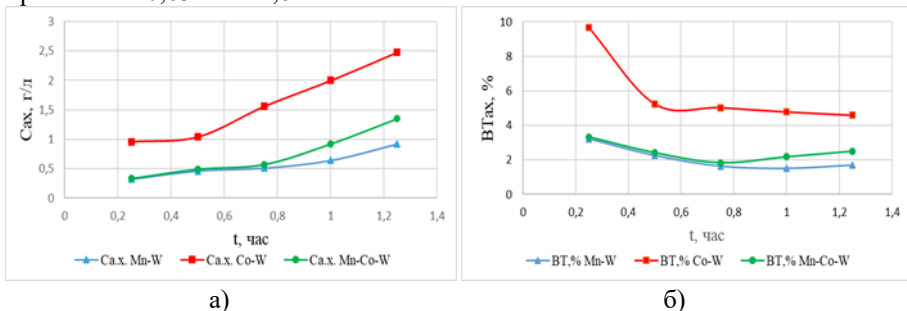


Рис. 2. Зависимость концентрации (а) и выхода по току (б) активного хлора от времени электролиза для анодов с добавлением вольфрама в растворе хлорида натрия 30 г/л.

Как видно из рисунка 2, для всех анодов, модифицированных вольфрамом, выход по току активного хлора почти на 2% ниже, чем для анодов, модифицированных молибденом.

Из полученных данных, видно, что наибольшую селективность к РВХ проявляют аноды со смешанным диоксидномарганцево-кобальтовым покрытием, не зависимо от модифицирующей добавки. Наименьший ВТак наблюдается для диоксидномарганцевых анодов, модифицированных вольфрамом и молибденом.

Таким образом, можно сделать вывод, что применение диоксидномарганцевых анодов и анодов со смешанным диоксидномарганцевым и кобальтовым покрытием, модифицированных соединениями вольфрама или молибдена, наиболее перспективно для

прямого электролиза хлоридных растворов и морской воды с целью решения экологических проблем, а также снижением затрат на утилизацию хлоропродуктов.

#### Литература

1. Введение в водородную энергетику / Э. Э. Шпильрайн, С. П. Малышенко, Г. Г. Кулешов. – М. : Энергatom, 1984. – 264 с.
2. Direct Electrolytic Splitting of Seawater: Activity, Selectivity, Degradation, and Recovery Studied from the Molecular Catalyst Structure to the Electrolyzer Cell Level / S. Dresp, F. Dionigi, J. Ferreira de Araujo, C. Spöri, M. Glicch, P. Strasser // *Advanced Energy Materials* – 2018. – 1800338. – P. 1-11.

© Ганган Ю.В., Щитовская Е.В., 2024

УДК 544.6.018.47: 661.248

### ПРИМЕНЕНИЕ СЕРНИСТОГО АНГИДРИДА В КАЧЕСТВЕ РАСТВОРИТЕЛЯ В СОСТАВЕ ЛИТИЕВЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ

Гарипов Д.Р., Мишинкин В.Ю., Голубятникова Л.Г., Кузьмина Е.В.

*Уфимский Институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

На сегодняшний день техногенная сера, выступающая в качестве побочного продукта в процессах обессеривания нефти и газов, не является востребованной [1]. Необходимость в поиске и освоении применений ее соединений только подтверждается ежегодным ростом производительности процессов обессеривания (объем ежегодно образующейся серы составляет более 30 миллионов тонн [2]), а также повышением требований к содержанию соединений серы в конечных продуктах.

Химически чистая сера, находящаяся в твердом состоянии при нормальных условиях, является безвредной, чего нельзя сказать о продуктах ее эмиссии в атмосферный воздух с поверхности серохранилищ, объемы которых, пропорционально росту производительности, растут ежегодно. Описываемая проблема подкрепляется еще и фактом того, что серосодержащие соединения, хранящиеся на серохранилищах, зачастую могут располагаться на открытом воздухе, что лишь усугубляет складывающуюся ситуацию.

В результате эмиссии серы с поверхности хранилищ образуются сероводород, дисперсионные серные аэрозоли, пары серной кислоты, а также сернистый ангидрид, играющий значительную роль в оказании негативного влияния на окружающую среду [3, 4]. Таким образом, актуализируется поиск новых и эффективных способов применения серосодержащих соединений, в частности сернистого ангидрида, с серохранилищ, располагаемых на территории Российской Федерации.

В литературе [5] описывается применение сернистого ангидрида в качестве растворителя для проводящих солей лития, что может зарекомендовать себя как один из возможных вариантов повышения взрыво- и пожаробезопасности литий-ионных аккумуляторов вследствие замены органических растворителей на негорючий сернистый ангидрид.

Нами была разработана лабораторная методика синтеза и исследованы физико-химические свойства электролита (в интервале температур 25-55 °С), представляющего собой моносольватный комплекс тетрахлоралюмината лития с сернистым ангидридом ( $\text{LiAlCl}_4 \cdot \text{SO}_2$ ). Сравнительная характеристика удельной электропроводности и динамической вязкости исследуемого моносольвата, а также коммерческого электролита (одномолярного раствора гексафторфосфата лития в смеси этиленкарбоната (ЭК) и диметилкарбоната (ДМК) [6]) приведены на рисунке 1.

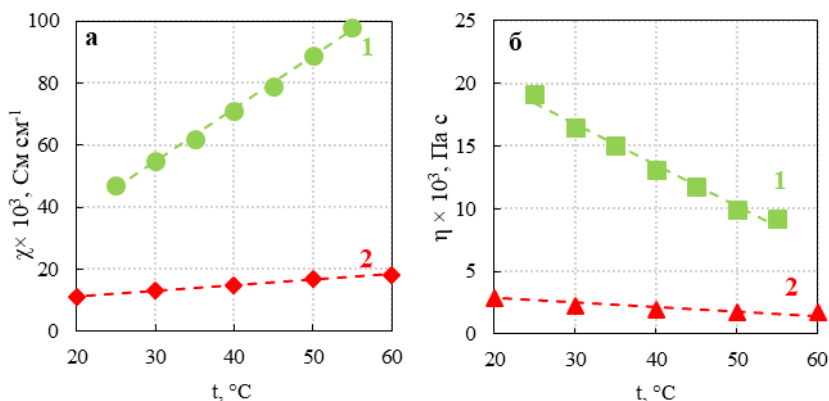


Рис. 1. Температурные зависимости скорректированной электропроводности (а), динамической вязкости (б) для  $\text{LiAlCl}_4 \cdot \text{SO}_2$  (1) и 1М  $\text{LiPF}_6$  в ЭК:ДМК (30:70) (2)

*Работа выполнена в рамках государственного задания № 124032600061-3.*

#### Литература

1. Колосницын, Д. В., Кузьмина, Е. В., Карасева, Е. В., Колосницын, В. С. Моделирование характеристик литий-серных аккумуляторов на основе экспериментальной оценки электрохимических свойств электродных материалов [Текст] / Д. В. Колосницын, Е. В. Кузьмина, Е. В. Карасева, В. С. Колосницын // Электрохимическая энергетика. 2019. Т. 19, № 1. С. 48-59.
2. Шагиева, Д.Р., Храмов, Ю.В. Оценка экологического воздействия серохранилищ [Текст] / Д.Р. Шагиева, Ю.В. Храмов // Вестник технологического университета. 2015. Т. 18, № 9. С. 269-271.

3. Акимов, В.С. Диоксид серы и основные источники загрязнения атмосферы диоксидом серы [Текст] / В.С. Акимов // Научный журнал. 2017. № 6—1 (19).
  4. Ветрова, Е.Ю., Щекин, В.К., Курс, М.Г. Сравнительная оценка методов определения коррозионной агрессивности атмосферы [Текст] Е.Ю. Ветрова, В.К. Щекин, М.Г. Курс / Авиационные материалы и технологии. 2019. Т. 54, № 1. С. 74-81.
  5. Пат. 2772790 Российская Федерация, МПК H01M 10/0563. Электролит на основе SO<sub>2</sub> для элемента аккумуляторной батареи и элемент аккумуляторной батареи / Л. Зинк, Х. Пезолла, Р. Буц; заявитель и патентообладатель ИННОЛИТ ТЕКНОЛОДЖИ АГ. – № 2021132997; заявл. 30.07.2020; опублик. 25.05.2022, Бюл. № 15. – 42 с.
  6. Logan E.R. // Journal of The Electrochemical Society, 2018.
- © Гарипов Д.Р., Мишинкин В.Ю., Голубятникова Л.Г., Кузьмина Е.В., 2024

УДК 544.032.52, 544.169

## РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ ЗАРЯДОВ НА АТОМАХ БОР-НИТРИДНЫХ НАНОТРУБОК (5,0) И (3,3) В ПОСТОЯННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ

Томилин О.Б., Родионова Е.В., Родин Е.А., Голякова Е.А.

*Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева, Саранск, Россия*

Бор-нитридные нанотрубки (BN-НТ) обладают превосходными механическими свойствами, высокой стойкостью к окислению и высоким отрицательным сродством к электрону, что делает их перспективным материалом для создания полевых эмиттеров [1]. Необходимым условием полевой эмиссии является накопление отрицательного заряда в концевой области эмиттера, и таким образом, величину эффективного заряда на концевых атомах BN-НТ можно использовать для оценки эмиссионных свойств материала.

Рассмотрены BN-НТ хиральности (5,0) и (3,3). Протяженность цилиндрической части BN-НТ составляла 11,5 и 13,5 Å. Свободные валентности концевых атомов бора и азота насыщались атомами водорода. Оптимизация геометрии, расчеты электронных характеристик BN-НТ, моделирование действия постоянного электрического поля (напряженностью  $0 < E < 2,1 \text{ В/Å}$ ) проводились в рамках метода методом DFT/B3LYP/6-31G из пакета прикладных программ FireFly.

Атомный каркас BN-НТ можно представить в виде взаимодействующих циклических транс- или цис- BN фрагментов. Для каждого циклического фрагмента вычислялась суммарная величина эффективных зарядов:

$$q(k)_{\text{eff}} = \sum q(k)_{\text{at}} \quad (I)$$

где  $q(k)_{\text{at}}$  – величина заряда по Малликену на  $k$ -ом атоме в  $k$ -ой цепочке.

Приложенное электрическое поле вызывает накопление отрицательного заряда в концевой области BN-НТ. Для BN-НТ (3,3) 96% заряда электрона генерируется в области первого бор-нитридного циклического фрагмента ( $\sim 2\text{\AA}$ ). Для BN-НТ (5,0) величина накопленного отрицательного заряда на первом BN циклическом фрагменте нанотрубки зависит от направления вектора напряженности электрического поля (62% заряда на  $\sim 1,5\text{\AA}$ ; 54% заряда на  $\sim 1,5\text{\AA}$ ). Таким образом, BN-НТ (3,3) по эмиссионным свойствам превосходят эмиссионные свойства нанотрубки (5,0).

#### Литература

1. Yun, K. N., Sun, Y., Han, J. S., Song, Y.-H., & Lee, C. J. High-Performance Field-Emission Properties of Boron Nitride Nanotube Field Emitters. *Applied Materials & Interfaces*, 2017, 9(2), 1562–1568. doi:10.1021/acsami.6b10713

© Томилин О.Б., Родионова Е.В., Родин Е.А., Голякова Е.А., 2024

УДК 669.017

### ВЛИЯНИЕ СЕРЕБРА НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ СФЕРИЧЕСКОГО ПОРОШКА ИЗ СТАЛИ 03X17H10M2

Горбенко А.Д., Каплан М.А.

*Институт металлургии и материаловедения им. А.А. Байкова Российской академии наук, Москва, Россия*

Одним из ключевых преимуществ использования аддитивного производства для изготовления имплантатов является возможность легко настраивать размер и компоненты имплантатов. Такая гибкость позволяет быстро вносить коррективы в соответствии с индивидуальными потребностями пациента. Эта технология позволяет создавать сложные формы, например, имплантаты, с использованием нержавеющей стали [1-3]. При этом, если говорить о протезировании, после подобных операций всегда присутствует вероятность бактериального заражения ткани вокруг имплантата [4]. Чтобы снизить риск таких осложнений, можно включать серебро в материал имплантата, что даст его поверхности бактерицидные свойства [5].

Однако, перед применением модифицированного серебром порошка, следует определить влияние микролегирования на него. По этой причине, было проведено исследование фазового состава сферических порошков из стали 03X17H10M2 с добавлением серебра до 0,5% по массе. Результаты исследования фазового состава представлены в таблице 1.

Таблица 1. – Фазовый состав и параметр кристаллической решетки порошков образцов №1 (03X17H10M2), №2 (03X17H10M2+0,2% Ag), №3 (03X17H10M2+0,5% Ag).

Соста в	Состояние	Параметр кристаллической решетки	Фазовый состав	Объемная доля, %
№1	После распыления	$A^* = 3,59564 \pm 0,00002 \text{ \AA}$	$\gamma$ - Fe	89,7 $\pm$ 0,2
		$A^* = 2,87621 \pm 0,00012 \text{ \AA}$	$\alpha$ - Fe	4,6 $\pm$ 0,0
		$A^* = 8,43767 \pm 0,00166 \text{ \AA}$	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	5,7 $\pm$ 0,2
№2	После распыления	$A^* = 3,59521 \pm 0,00002 \text{ \AA}$	$\gamma$ - Fe	86,3 $\pm$ 0,2
		$A^* = 2,87393 \pm 0,00010 \text{ \AA}$	$\alpha$ - Fe	4,4 $\pm$ 0,1
		$A^* = 8,43871 \pm 0,00158 \text{ \AA}$	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	9,4 $\pm$ 0,2

№3	После распыления	$A^* = 3,59495 \pm 0,00002 \text{ \AA}$	$\gamma$ - Fe	92,5 $\pm$ 0,2
		$A^* = 2,87435 \pm 0,00012 \text{ \AA}$	$\alpha$ - Fe	4,7 $\pm$ 0,0
		$A^* = 8,43300 \text{ \AA}$	Fe <sub>3</sub> O <sub>4</sub>	2,8 $\pm$ 0,2

\*A – параметр кристаллической решетки

По результатам исследований фазового состава наблюдается наличие многих фаз, таких как  $\gamma$ -Fe,  $\alpha$ -Fe, Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub>-магнетит. Основа состоит из аустенита и феррита, Fe<sub>3</sub>O<sub>4</sub> определяется окислением порошка во время процесса получения. При условии использования полученного порошка необходимо очистить его поверхность, например, электролитически. При этом можно отметить, что 0,2% серебра показали уменьшение  $\gamma$ -Fe, в то время как добавление 0,5% Ag наоборот увеличило содержание этой фазы.

*Исследование выполнено в рамках Госзадания № 075-01176-23-00 и стипендии Президента СП-4955.2022.4*

#### Литература

1. Kaplan M.A., Gorbenko A.D., Ivannikov Y A., Konushkin S.V., Kirsankin A.A., Baikin A.S., Sergienko K.V., Nasakina E.O., Mikhailova A.V., Rumyantsev B.A., Gorudko I. V., Kolmakov A. G., Simakin A. V., Gudkov S. V., Oshkukov S. A., Sevostyanov M. A. Preparation and Investigation of Spherical Powder Made from Corrosion-Resistant 316L Steel with the Addition of 0.2% and 0.5% Ag // Materials, 2022, 15, 7887. DOI: 10.3390/ma15227887
2. Горбенко А.Д., Каплан М.А., Коношкин С.В., Насакина Е.О., Баикин А.С., Сергиенко К.В., Иванников А.Ю., Морозова Я.А., Ошкуков С.А., Колмаков А.Г., Севостьянов М.А. Влияние серебра и термической обработки на свойства проволоки



из аустенитной стали 03X17H10M2. Известия высших учебных заведений. Черная Металлургия. 2023;66(5):544-553. <https://doi.org/10.17073/0368-0797-2023-5-544-553>

3. Калайда Т.А., Кирсанкин А.А., Каплан М.А., Смирнов М.А., Севостьянов М.А. Сферические порошки коррозионностойких сталей, полученных методом газовой атомизации // Успехи в химии и химической технологии 2019, т. 33, №3 с. 31-33

4. В.А. Rogers, N.J. Little, Surgical site infection with methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* after primary total hip replacement, *J. Bone & Joint Surgery—British 90* (2008) 1537–1538.

5. Каплан М. А., Иванников А. Ю., Конушкин С. В., Насакина Е. О., Баикин А. С., Картабаева Б. Б., Горбенко А. Д., Колмаков А. Г., Севостьянов М. А. Исследование структуры, механических и антибактериальных свойств коррозионностойкой стали, легированной серебром и титаном // Доклады Российской академии наук. Химия, науки о материалах, 2022, Том 502, с. 41–49. DOI: 10.31857/S268695352201006X

© Горбенко А.Д., Каплан М.А., 2024

УДК 547.9:543.429.22:544.43

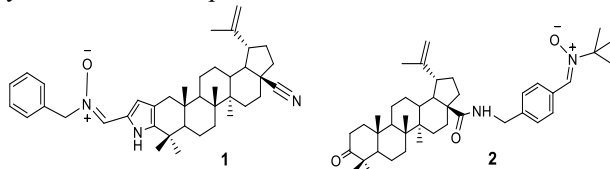
## ИССЛЕДОВАНИЕ ТРИТЕРПЕНОВЫХ ЛУПАНОВЫХ НИТРОНОВ МЕТОДОМ ЭПР.

Гумеров<sup>1</sup> Э.И., Садыков<sup>2</sup> Р.А., Орлов<sup>2</sup> А.В., Комиссарова<sup>2</sup> Н.Г.,  
Алехина<sup>1</sup> И.Е.

<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский Институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Тритерпеноиды лупанового ряда обладают широким спектром фармакологической активности, включая в том числе, и антиоксидантную активность, которая приводит к снижению уровня окислительного стресса, провоцирующего многие патологические состояния организма [1]. Высоким потенциалом в качестве терапевтических антиоксидантов обладают нитроны [2]. Это обусловлено их способностью к захвату активных форм кислорода и азота, что понижает окислительный стресс. Однако конкретный механизм биологической активности нитронов не установлен, и не ограничивается представлением об их действии только как о спиновых ловушках. Можно предположить, что введение нитронной функции в структуру тритерпеноида может стать одним из подходов к созданию эффективных антиоксидантов на основе доступного класса вторичных метаболитов.



Представленные нитроны (1) [3], (2) впервые синтезированы в лаборатории биоорганической химии и катализа Уфимского Института

химии УФИЦ РАН. Данная работа является первой попыткой выявления способности представленных тритерпеновых нитронов взаимодействовать с радикальными частицами методом ЭПР.

Для этого выбрана классическая модель взаимодействия нитронов (1) и (2) с 2,2-дифенил-1-пикрилгидразилом (DPPH) [4]. Исследования проводились на ЭПР-спектрометре SPINSCAN X (Вильнюс) и сопутствующего программного обеспечения при комнатной температуре в растворе толуола. ЭПР-спектр DPPH в растворе толуола приведен на рис.2. Соотношения нитронов к DPPH составляло 1:2. Проведена серия измерений для построения зависимости амплитуды сигнала ЭПР от времени. Полученная линейная зависимость логарифма амплитуды сигнала ЭПР от времени отражает первый порядок реакции по DPPH. Константа скорости гибели радикала DPPH для нитронов (1) и (2) составляет  $k_1 = -1,6 \times 10^{-3} \text{ с}^{-1}$  и  $k_2 = -2,0 \times 10^{-3} \text{ с}^{-1}$ , соответственно. Результаты эксперимента показали способность нитронов взаимодействовать с DPPH, в ходе процессов протекающих в исследуемой системе DPPH-радикал расходуется.

На основании полученных данных можно уверенно заявить, что исследуемые нитроны обладают способностью к взаимодействию с DPPH-радикалами, что, безусловно, свидетельствует о необходимости проведения дальнейших исследований свойств соединений этого класса.

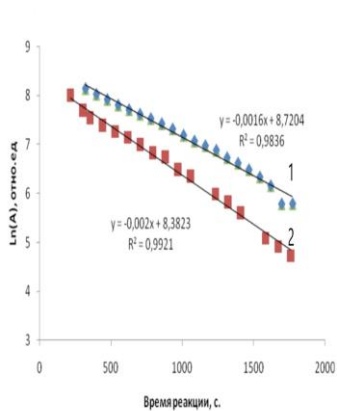


Рис.1. Зависимость амплитуды сигнала ЭПР DPPH от времени при взаимодействии DPPH с нитронами (1) и (2)..

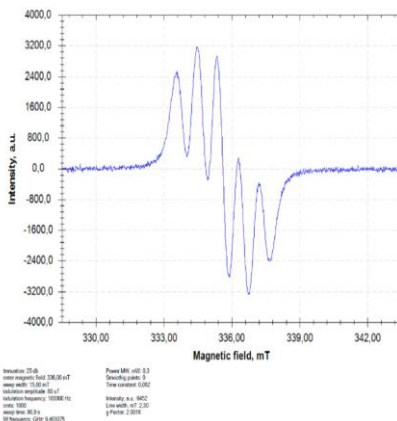


Рис. 2. Спектр ЭПР раствора DPPH в толуоле ( $1,7 \cdot 10^{-3} \text{ M}$ ).

*Работа выполнена по темам гос. заданий УФИХ УФИЦ РАН №122032400282-9 и №122031400260-7 на оборудовании ЦКП "Химия" УФИХ УФИЦ РАН.*

#### Литература

1. Li W., Sun K., Hu F., et al. // J. Biochem. Mol. Toxicol. - 2021. – Т. 35. – №. 3. – С. e22658.
2. Oliveira C., Benfeito S., Fernandes C. et al. // Med. Res. Rev. - 2018. – V. 38. – No.4. - P.1159.
3. Комиссарова Н.Г., Орлов А.В., Шитикова О.В., Юнусов М.С. // Вест. БашГУ. – 2022. 27. №3. – С. 633.
4. Marano S., Minnelli C., Mobbili G., et al. // Med. Sci. Forum. - 2021. – V. 2. No.1. – P. 17.

© Гумеров Э.И., Садыков Р.А., Орлов А.В., Комиссарова Н.Г., Алехина И.Е., 2024

УДК 544-971.2

### ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АЦЕТИЛСАЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ С ОКИСЛЕННОЙ ФРАКЦИЕЙ АРАБИНОГАЛАКТАНА

Давлетшина Д.Т., Васильева Ю.А.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Арабиногалактан сибирской лиственницы – природный биополимер, обладающий большим количеством ценных свойств. Являясь мощным сорбентом с антиоксидантным действием, он способен выводить токсины и соли тяжелых металлов из организма человека. В настоящей работе предлагается использовать окисленную фракцию арабиногалактана (ОФАГ) в качестве полимерной подложки для ацетилсалициловой кислоты (АСК) с целью снижения ее токсичности и раздражающего действия на ЖКТ. ОФАГ, благодаря появлению дополнительных функциональных (-COOH) групп, может оказаться более предпочтительной для комплексообразования с фармакологически активными веществами.

Арабиногалактан окисляли озон-кислородной смесью (скорость подачи  $O_3-O_2$  смеси составила 6 л/час,  $T = 363$  К). Окисление проводили в течение 2-х часов в стеклянном термостатируемом сосуде. По окончании окисления ОФАГ выделяли ацетоном при соотношении объемов ацетона и реакционной смеси 3 : 1. Количество образованных карбоксильных групп определяли потенциометрическим титрованием ( $[ -COOH ] = 3 \cdot 10^{-3}$  моль/л).

Следующим этапом работы явилось изучение комплексообразования АСК с ОФАГ в разбавленных водных растворах. Исследования проводили спектрофотометрическим методом. Методики проведения экспериментов описаны в работах [1, 2]. Методом молярных отношений определены состав комплексов (1 : 1) и их константы устойчивости в диапазоне температур 291-316 К. Экспериментально установлено, что с ростом температуры устойчивость комплексного соединения снижается. Проведена оценка термодинамических параметров комплексообразования. Полученные

результаты послужили основой для разработки методики синтеза исследуемого комплексного соединения.

*Исследование выполнено за счет гранта Российскойского научного фонда № 19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.*

#### Литература

1. Зимин Ю.С., Кутлугильдина Г.Г., Рамазанова З.Ф., Мустафин А.Г. Взаимодействие окисленной фракции поливинилового спирта с производными урацила в водных растворах // Журнал физической химии. 2022. Т. 96. № 8. С. 1159-1164.
2. Ibrakova, N.F., Kutlugildina, G.G., Zimin, Y.S. Complexation of praziquantel with  $\alpha$ -,  $\beta$ - and  $\gamma$ -cyclodextrins in aqueous-alcoholic solutions // Periodico tche quimica. 2020. Vol. 17. No. 36. Pp. 302-314.

© Давлетшина Д.Т., Васильева Ю.А., 2024

УДК 543.544

### ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ АРОМАТИЧЕСКИХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ

Брылева Е.А., Дудукин А.А., Колосова Е.А.

*Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия*

Одним из методов решения проблемы «структура – свойство» является топологический подход, характеризующийся значительной информативностью и обширными аналитическими и прогностическими возможностями. Для оценки влияния структуры веществ на их физико-химические параметры чаще всего применяют топологические индексы (ТИ), учитывающие электронные и геометрические особенности химической структуры, при этом главное преимущество ТИ заключается в их быстром и простом расчете, основанном на структурной формуле вещества.

В нашей работе для оценки влияния структуры молекул на их сорбционные свойства использованы индексы связанности (ИС), как правило, хорошо коррелирующие со многими параметрами молекул и физико-химическими свойствами различных соединений. С этой целью нами рассчитаны ИС пяти порядков для 47 ароматических гетероциклов - производных триазола, бензотриазола и хинолина, при этом диагональные элементы матрицы расстояний для вершинно-реберно взвешенных графов рассчитывали с учетом числа всех электронов (валентные и электроны внутренних оболочек) атомов в соответствии с методом, предложенным М. Баришем и Н. Тринайстичем [1].

Из полученных данных следует, что значения ИС исследованных гетероциклов изменяются в достаточно широких пределах и определяются строением молекул аналитов и порядком ИС. Установлено при этом, что вне зависимости от строения молекул исследованных соединений изменение

индексов носит закономерный характер, монотонно уменьшаясь от ИС нулевого порядка к индексам более высоких порядков, при этом вне зависимости от строения гетероцикла, увеличение числа атомов в молекуле приводит к росту значений ИС, а увеличение степени разветвленности, ненасыщенности и замена атомов углерода на гетероатомы – к уменьшению их значений. Кроме того, индексы оказываются чувствительными к положению заместителей, благодаря чему они способны различать многие изомерные соединения. В то же время для некоторых изомерных соединений внутри конкретных классов гетероциклов возможно вырождение ИС.

На основании анализа взаимосвязи между топологическими и физико-химическими характеристиками производных гетероциклов установлено, что зависимость между ИС, объемом и поляризуемостью молекул оказывается близкой к линейной практически для всех исследованных гетероциклов, что иллюстрируют данные, приведенные в таблице 1. Меньшие значения коэффициента аппроксимации для некоторых соединений обусловлены, вероятно, тем фактом, что ИС не являются строго аддитивными величинами и диапазон их изменения связан с взаимным влиянием атомов в молекулах гетероциклов различного строения, таким образом, отклонения от линейной зависимости могут иметь место для соединений с возможными внутримолекулярными взаимодействиями, приводящими к нарушению аддитивности вкладов в ИС отдельных фрагментов.

Таблица 1  
Характеристики зависимости вида  $y = ax + b$  между ИС и физико-химическими параметрами

Физико-химические характеристики	ИС	R <sup>2</sup>	a	-b
Поляризуемость, α	1χ	0.99	0.214	0.269
	2χ	0.99	0.158	0.371
	3χ	0.94	0.098	0.041
	4χ	0.94	0.077	0.222
Объем молекулы, V	1χ	0.99	0.009	1.097
	2χ	0.99	0.007	1.980
	3χ	0.91	0.004	0.364
	4χ	0.93	0.003	0.507

Уровень корреляций ИС и фактора удерживания, определенного для условий обращенно-фазового варианта высокоэффективной жидкостной хроматографии (ОФ ВЭЖХ), оказался существенно ниже, вероятно, в связи

с влиянием полярного элюента, взаимодействие с которым снижает влияние топологии на сорбцию соединений.

Однако, в целом на основании полученных данных можно заключить, что для широкой таксономической группы выбранных нами для анализа азотистых ароматических гетероциклов закономерности изменения ИС оказываются практически неизменными вне зависимости от диапазона использованной выборки соединений

#### Литература

1. Бариш М., Яшари Дж., Лалл Р., Шривастава В., Тринайстич Н. Матрица расстояний для молекул, содержащих гетероатомы. В кн. Химические приложения топологии и теории графов. М.: Мир. 1987. С.259-265.

© Дудукин А.А., Брылева Е.А., Колосова Е.А., 2024

УДК 535.376

### ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПОЛИМЕРОВ, ДОПИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫМИ ТОЧКАМИ

Заворотько А.Э., Арменков К.В., Крупин А.С., Галеева А.И.,  
Галяметдинов Ю.Г.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,  
Казань, Россия*

В последние годы одними из наиболее изучаемых люминесцентных материалов являются углеродные точки (С-точки), обладающие рядом преимуществ над традиционными люминесцентными материалами: низкая токсичность, биосовместимость, высокие квантовые выходы, а также дешевизна и простота синтеза. Благодаря данным характеристикам, С-точки находят свое применение в биомедицине и тераностике, как хемо- и термосенсоры, в производстве оптических материалов, LED [1]. Однако, получение пленочных материалов на основе углеродных точек зачастую затруднено, ввиду их агломерации и агрегации. Одним из решением данной проблемы является внедрение С-точек в оптически прозрачные полимеры, на основе которых возможно получать пленочные материалы с равномерным распределением частиц люминофора и высокой интенсивностью люминесценции [2].

Целью данной работы было изучение возможности формирования люминесцентных материалов на основе синих углеродных точек и водорастворимых полимеров. Углеродные точки были получены в ходе гидротермального синтеза, что является дополнительным преимуществом, за счет простоты исполнения и отсутствия токсичных растворителей, с

использованием в качестве прекурсоров о-фенилендиамина и лимонной кислоты в соотношении 1:1. Синтез проводился в течение 9 часов при температуре 180 °С (рис.1) с последующей очисткой с помощью фильтрования и диализа.

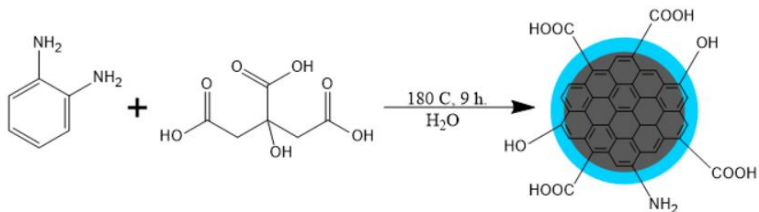


Рис.1. Схема синтеза синих С-точек

Синтезированные С-точки обладают интенсивной люминесценцией в синей области спектра. На основе данных С-точек (bCD) и водорастворимых полимеров – поливинилового спирта (PVA) и поливинилпирролидона с различной молекулярной массой (PVP10 и PVP90) были получены плёночные композитные материалы методом испарения из растворов.

Полученные пленки являются прозрачными во всем видимом диапазоне и обладают характерными для синих С-точек пиками интенсивности люминесценции на 430 нм, при этом максимальная интенсивность излучения наблюдается для пленок на основе поливинилового спирта (рис. 2). Положение пика люминесценции композитов при этом практически не изменяется при варьировании полимера, в связи с чем возможно подобрать полимер под конкретные задачи.

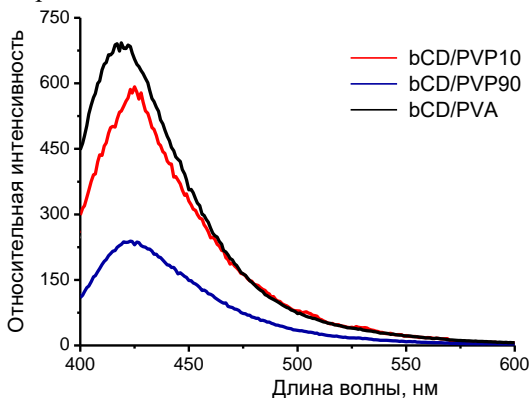


Рис. 2. Спектры излучения полученных пленок

Таким образом, в работе показана возможность получения композитов на основе С-точек (bCD) и водорастворимых полимеров с равномерным

распределение частиц люминофора в матрице полимеров с целью получения пленочных люминесцентных материалов.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №20-73-10091).*

#### Литература

1. Yue J. et al. A review of fluorescent carbon dots: synthesis, photoluminescence mechanism, solid-state photoluminescence and applications in white light-emitting diodes // *New Carbon Materials*. – 2023. – Т. 38. – №. 3. – С. 478-492.
2. Kwan M.N.H. et al. Carbon-dot dispersal in PVA thin film for food colorant sensing // *Journal of Environmental Chemical Engineering*. – 2020. – Т. 8. – №. 3. – С. 103187.

© Заворотько А.Э., Арменков К.В., Крупин А.С., Галеева А.И., Галяметдинов Ю.Г.,  
2024

УДК 541.49:533.375

### РАТИОМЕТРИЧЕСКИЙ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЙ ТЕРМОСЕНСОР НА ОСНОВЕ АНИЗОМЕТРИЧНОГО КОМПЛЕКСА ЕВРОПИЯ(III) И КВАНТОВЫХ ТОЧЕК

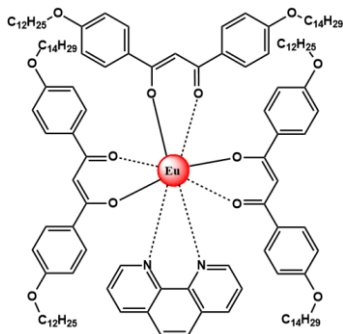
Зиятдинова Р.М., Сагдеев Д.О., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.  
*ФГБОУ ВО «КНИТУ», Казань, Россия*

Возникновение новых областей исследований, в которых неприменимы традиционные термометры, привело к бурному развитию бесконтактной оптической термометрии. При этом всё большую популярность завоевывает люминесцентная термометрия благодаря возможности дистанционного зондирования распределения температуры поверхности с микро- и нанометровым пространственным разрешением, быстрому отклику и точности измерений, и устойчивостью к электромагнитным помехам. Среди большого разнообразия люминофоров, используемых в люминесцентной термометрии, хорошо зарекомендовали себя координационные соединения Ln(III) и квантовые точки (КТ). Наибольший интерес представляют  $\beta$ -дикетонатные соединения Ln(III), характеризующиеся высоким квантовым выходом, продолжительным временем жизни и температурно-зависимой люминесценцией. Люминесценция квантовых точек также зависит от температуры, однако с её ростом изменяется намного медленнее, чем  $\beta$ -дикетонатных комплексов Ln(III), что позволяет использовать их в широком диапазоне температур. В целях повышения точности измерения без дополнительной калибровки прибора, можно сочетать эти люминофоры и определять температуру ратиометрическим способом путем соотношения наиболее интенсивных полос люминесценции. Несмотря на

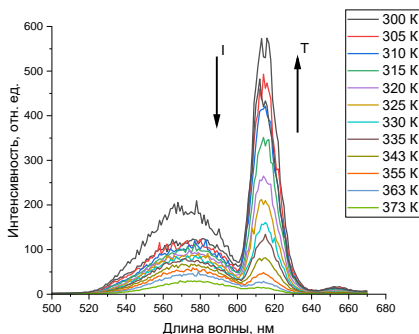


вышеупомянутые преимущества, основными недостатками, затрудняющими их прикладное использование, являются проблемы фотостабильности под действием облучения УФ-светом, кристаллизуемость и агрегация, которые препятствуют получению плёночных материалов. Поэтому создание новых фото- и термостабильных материалов с высокой чувствительностью люминесценции в широком интервале температур является актуальной задачей. Предлагаемое решение основано на использовании в качестве матрицы для равномерного распределения КТ, комплексов Ln(III) анизотропной структуры, которые в отличие от известных аналогов, имеют низкие температуры размягчения и способны образовывать прозрачные однородные пленки с высокой чувствительностью люминесценции к температуре [1].

В работе впервые показана возможность применения анизометричного комплекса Eu(III) и квантовых точек CdSe/ZnS, стабилизированных стеариновой кислотой в качестве материала для люминесцентного термометра, термочувствительного в области 300–373 К. Материал представляет собой плёнку смеси комплекса Eu(III) (рис. 1а) и CdSe/ZnS, полученную путем стеклования из расплава между двумя кварцевыми подложками. Предлагаемый способ позволяет изолировать пленку от содержащего в атмосфере кислорода и тем самым повысить фотостабильность. Изучено влияние температуры на люминесцентные свойства пленки. Спектр люминесценции (при регистрации на длине волны возбуждения 320 нм) состоит из двух максимумов на длине волны 565 и 613 нм, отнесенные к КТ и Eu(III), соответственно (рис. 1). Пленка является оптически прозрачной во всем видимом диапазоне, обладает высокой чувствительностью излучения к температуре  $-13,2 \text{ мкс} \cdot \text{К}^{-1}$  и способен обратимо изменять интенсивность и время жизни люминесценции в области температур 300–373 К, что позволяет ее использовать в качестве рабочего элемента многоцветных люминесцентных термосенсоров.



а



б

Рис. 1. Структурная формула комплекса Eu(III) (а); Температурная зависимость интенсивности люминесценции застеклованной пленки на основе КТ и комплекса Eu(III) (б)

*Работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда, проект № 23-73-01030.*

#### Литература

1. Knyazev A. A., Krupin A. S., Galyametdinov Y. G. // *Inorganics*. – 2022. – V. 10. – №. 12. – P. 232.

© Зиятдинова Р.М., Сагдеев Д.О., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г., 2024

УДК 541.49:533.376

### ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЙ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЙ МАТЕРИАЛ НА ОСНОВЕ ПОЛИСТИРОЛА, ДОПИРОВАННОГО АНИЗОМЕТРИЧНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ $\text{Eu}^{3+}$ И $\text{Tb}^{3+}$

Зиятдинова Р.М., Крупин А.С., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.  
ФГБОУ ВО «КНИТУ», Казань, Россия

Люминесцентная термометрия (ЛТ) благодаря быстрому отклику, высокой чувствительности, превосходному пространственному и временному разрешению обладает неоспоримым преимуществом перед другими видами определения температуры [1]. Особую привлекательность имеют материалы на основе соединений Ln(III), характерные узкие полосы и длительные времена жизни люминесценции которых позволяют измерять температуру с высокой точностью. Несмотря на вышеперечисленные преимущества, довольно низкая фотостабильность этих соединений при продолжительном УФ-облучении является основным недостатком, не позволяющим их использовать в качестве люминесцентных термометров. Из литературы известно, что внедрение в матрицу полимера комплексов Ln(III) приводит

к улучшению фотолюминесцентных свойств, повышению термостабильности и механической прочности, что позволяет сделать процессы создания материалов на их основе более технологичными. Один из подходов ЛТ основан на использовании температурной зависимости соотношения двух полос эмиссии, что может быть достигнуто либо путем комбинирования двух люминофоров, либо с использованием одного люминофора, проявляющего две полосы эмиссии, это позволяет измерять температуру с высокой точностью без дополнительной калибровки прибора.

В работе на основе анизометричных комплексов Eu(III) и Tb(III), распределенных в матрице полистирола методом spin-coating получены фотостабильные люминесцентные термосенсорные пленки, прозрачными во всем видимом диапазоне и эффективно поглощающие излучение в области 385-405 нм. Изучено влияние температуры на оптические свойства плёнок. Пленки обладают высокой чувствительностью времени жизни люминесценции  $5,44 \text{ мкс} \cdot \text{K}^{-1}$  в диапазоне температур 298-363 К, что позволяет в перспективе использовать данные материалы в качестве рабочих элементов люминесцентных термосенсоров.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания на оказание государственных услуг (выполнение работ) от 29.12.2022 г. № 075-01508-23-00. Тема исследования «Создание научных основ получения новых мультифункциональных материалов широкого спектра применения».

#### Литература

1. Лапаев D.V., Nikiforov V.G., Lobkov V.S., Knyazev A.A., Ziyatdinova R.M., Galyametdinov Y.G. // Journal of Materials Chemistry C. 2020. V. 8. P. 6273-6280

© Зиятдинова Р.М., Сагдеев Д.О., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г., 2024

УДК 544.02:547.7

#### ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ 1-БЕНЗИЛ-4-ОКТИЛ-1,2,3-ТРИАЗОЛА С ХЛОРИДОМ МЕДИ(II) В АЦЕТОНЕ

Иванов<sup>1</sup> К.С., Алехина<sup>1</sup> И.Е., Пышкин<sup>2</sup> А.А., Лобов<sup>2</sup> А.Н., Хамитов<sup>2</sup> Э.М., Иванов<sup>2</sup> С.П.

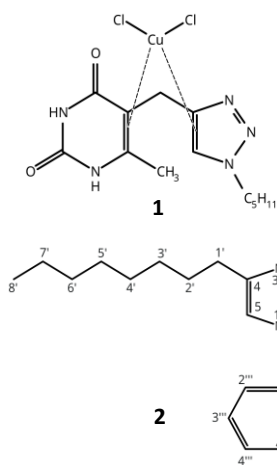
<sup>1</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский Институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Ранее было показано, что при реакции 5-(1-пентил-4-метил-1,2,3-триазол-4-ил)-6-метилурацила с хлоридом меди(II) в мольном соотношении 1:1 в ацетоне образуется осадок, который по данным ЯМР спектроскопии является  $\pi$ -комплексом  $\text{TМУ} \times \text{CuCl}_2$  (**1**).

Целью данной работы являлось изучение взаимодействия 1-бензил-4-октил-1,2,3-триазола (**2**) с хлоридом меди(II) в ацетоне. В ходе взаимодействия выпадал осадок зеленого цвета. Осадок был выделен и проанализирован методом ЯМР спектроскопии.

Наиболее значительные изменения химических сдвигов в ЯМР  $^{13}\text{C}$  спектре представлены в таблице.



Атом	Химический сдвиг, м.д.		
	2	2+CuCl <sub>2</sub> ·2H <sub>2</sub> O	Δδ
C(4)	147.34	–	–
C(5)	121.92	–	–
C(1')	25.02	25.01	-0.01
C(2')	28.95	28.09	-0.86
C(1'')	52.67	52.76	-0.09
C(1''')	136.32	135.36	-0.96
C(2''')	127.77	127.23	-0.54
C(3''')	128.69	128.10	-0.59
C(4''')	128.00	127.48	-0.52

Максимальные изменения наблюдаются в области сигналов атомов C(4), C(5), C(2'), C(1''), C(2'''), C(3''') и C(4'''), что может свидетельствовать о взаимодействии меди с π-системой триазольного и бензольного колец.

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования № 123011300044-5. ЯМР спектры зарегистрированы на оборудовании ЦКП «Химия» УФИХ УФИЦ РАН и РЦКП «Агидель» УФИЦ РАН.

© Иванов К.С., Алехина И.Е., Пышкин А.А., Лобов А.Н., Хамитов Э.М., Иванов С.П., 2024

УДК 547.022

## КОМПЛЕКСЫ ДИГИДРОКВЕРЦЕТИНА С ИОНАМИ ДВУХВАЛЕНТНЫХ БИОГЕННЫХ МЕТАЛЛОВ Исмагилова И.И.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Дигидрокверцетин (дигидро-2-3,5,7-тригидрокси-4Н-1-бензопиран-4-он) – активный антиоксидант, уникальный природный акцептор свободных радикалов кислорода, вещество, обладающее противовоспалительными, обезболивающими, иммунокорректирующими свойствами. За счет высоких комплексообразующих свойств он выводит из организма тяжелые металлы, в том числе радионуклиды, способствует восстановлению тонуса кровеносных сосудов и нормализации липидного спектра крови.

В данной работе изучено взаимодействие ионов металлов Mg(II), Cu(II), Ni(II), Co(II) и Zn(II) с дигидрокверцетином в водно-этанольных растворах [1-3]. Полученные комплексные соединения изучены методом ИК-спектроскопии (таблица).

Таблица

## Характеристические частоты полученных соединений

	$\nu(\text{C-C}) + \delta(\text{OH})$	$\nu(\text{C-C}) + \delta(\text{OH}) + \nu(\text{CO-Ph}) + \delta(\text{CH})$	$\delta(\text{OH}) + \nu(\text{C-C})$	$\delta(\text{OH}) + \nu(\text{C-OH}) + \delta(\text{C-H})$	$\delta(\text{CH}) + \delta(\text{OH})$	$\nu(\text{C-C}) + \nu(\text{C-O}_{\text{Ph}})$
ДГК	1618	1474	1401	1269	1163	1138
	1635	1458	1385	1297	1185	1119
[Mg(ДГК)]	1636	1475	1419	1271	1166	1137
	1616	1457		1298	1187	1120
[Cu(ДГК)]	1636	1473	1419	1267	1163	1136
	1617	1457	1399	1286	1182	1118
[Ni(ДГК)]	1636	1476	1419	1268	1164	1137
	1616	1457		1298	1180	1118
[Co(ДГК)]	1636	1476	1419	1265	1163	1135
	1617	1457		1299		1117
[Zn(ДГК)]	1619	1475	1419	1264	1158	1139
	1616	1456	1399	1298		1116

## Литература

1. Zilberg R.A., Berestova T.V., Gizatov R.R., Teres Y.B., Galimov M.N., Bulysheva E.O. // *Inorganics*. 2022. 10(8). P. 117
2. Berestova T.V., Gizatov R.R., Galimov M.N., Mustafin A.G. // *J. Mol. Struct.* 2021. 1236. 130303.
3. Berestova T.V., Khursan S.L., Mustafin A.G. // *J. Spectrochim. Acta, Part A*. 2020. 229. 117950

© Исмагилова И.И., 2024

УДК 541.183:544.723.2

## СОРБЦИЯ ИОНОВ ХРОМА (VI) НА КОМПОЗИТЕ ПОЛИ-О-ТОЛУИДИН/УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ

Исхакова Л.И., Садыков Т.Т.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

В последние десятилетия полианилин (ПАНИ) активно привлекал внимание в изучении процессов очистки за счет своих хелатирующих свойств, обусловленных присутствием электронодонорных групп [1].

Вместе с тем, его высокая площадь поверхности, пористость, наличие ароматических и хиноидных фрагментов в структуре, а также дырочная проводимость и положительный заряд после процесса протонирования способствуют усилению взаимодействия ПАНИ с различными классами загрязняющих веществ [2].

Ранее в работе [3] были проведено комплексное исследования сорбционных свойств ПАНИ и его производных в отношении красителя метилового оранжевого.

Целью настоящей работы являлось изучении сорбционных свойств композита поли-о-толуидина/углеродные нанотрубки в отношении ионов хрома (VI).

Сорбция ионов хрома (VI) была изучена в статическом режиме. Для проведения сорбционного анализа были выбраны следующие параметры процесса: объём раствора 50 мл, масса композита 10 мг, время установления сорбционного равновесия 60 минут. Количественный анализ ионов хрома (VI) до и после сорбции проведен методом фотометрии.

По результатам исследований установлено, что сорбционная ёмкость изменяется в пределах от 227 мг/г до 411 мг/г, при варьировании начальной концентрации катионов хрома (VI) от 50 мг/л до 200 мг/л. Степень извлечения, после установления сорбционного равновесия составляет 79%, при исходной концентрации хрома (VI) 50 мг/л. Дальнейшие исследования будут направлены на установление механизма сорбции, а также на описание кинетических и термодинамических закономерностей данного процесса.

#### Литература

1. Tang L., Wu T., Kan J. Synthesis and properties of polyaniline–cobalt coordination polymer // *Synth. Met.* – 2009. – V. 159. – No 15-16. – P. 1644-1648.
2. Mahanta D., Madras G., Radhakrishnan S., Patil S. Adsorption of sulfonated dyes by polyaniline emeraldine salt and its kinetics // *J. Phys. Chem. B* – 2008. – V. 112. – No 33. – P. 10153-10157.
3. Sadykov T. T., Syakaev R. S., Andriianova A. N., Mustafin A.G. Adsorption of anionic methyl orange dye by polyaniline, poly (o-methylaniline) and poly (o-methoxyaniline) // *Int. J. Chem. Kinet.* – 2024. – V. 56. – No 2. – P. 81-95.

© Исакова Л.И., Садыков Т.Т., 2024

УДК 544.6.018.47-039.6+546.865-31

### ПРОТОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ПОЛИСУРЬМЯНОЙ КИСЛОТЫ, ДОПИРОВАННОЙ ИОНАМИ НИОБИЯ

Карабельникова Е.С., Коваленко Л.Ю., Бурмистров В.А.

*Челябинский Государственный университет, Челябинск, Россия*

Полисурьмяная кислота (ПСК) состава  $H_2Sb_2O_6 \cdot nH_2O$  ( $2 < n < 4$ ) кристаллизуется в структурном типе пироклора (пр. гр. симм  $Fd\bar{3}m$ ),

является перспективным компонентом мембран водород-воздушных топливных элементов [1]. Согласно литературным данным [2], в ПСК содержатся неэквивалентные протонсодержащие группировки – ионы  $\text{H}_3\text{O}^+$ ,  $\text{OH}^-$ ,  $\text{H}_2\text{O}$ , которые могут участвовать в транспорте протонов. Одним из способов изменения протонной проводимости является изовалентное допирование кристаллической решетки.

В связи с этим целью работы являлось определение величины проводимости твердых растворов замещения на основе ПСК, в которых часть ионов  $\text{Sb}(+5)$  замещена на ионы  $\text{Nb}(+5)$ .

Синтез образцов проводили методом соосаждения [1-3]: для получения пятивалентной сурьмы к навеске треххлористой сурьмы добавляли соляную (33%) и азотную (66%) кислоты. Для полного выделения бурого газа раствор нагревали 1 час при температуре 60 °С. После чего по каплям добавляли раствор хлорида ниобия(V). В дальнейшем был проведен гидролиз в избытке воды, в результате образовался белый осадок. В качестве объекта исследования выбран образец, в котором соотношение  $\text{Nb}(+5)/\text{Sb}(+5)=1/1$ .

Полученным осадкам дали отстояться сутки, после чего отделили их от раствора. Осадки промывали дистиллированной водой путём центрифугирования до отрицательной реакции на хлорид ионы. Осадки были высушены в сушильном шкафу при 80°С.

Структурные исследования образцов провели методом порошка на рентгеновском дифрактометре ДРОН-3М (фильтрованное  $\text{CuK}\alpha$ - излучение) в диапазоне углов дифракции  $10 \leq 2\theta \leq 70$  град. На рентгенограммах фиксируется набор рефлексов, которые отвечают структуре типа пироклора (пр. гр. симм.  $\text{Fd}3\text{m}$ ). Отсутствие дополнительных рефлексов свидетельствует о получении твердых растворов замещения на основе ПСК.

Протонпроводящие свойства исследовали с помощью импедансметра ElinZ-1000J в диапазоне частот 100Гц – 1 МГц. Для этого образцы спрессовали при одинаковом давлении в виде таблетки в специально изготовленной ячейке, использовали графитовые электроды. Площадь образца оценили по площади поверхности электрода. Предварительно образцы перетерли и просеяли через систему лабораторных сит: верхнее сито с диаметром 0,2мм, нижнее – 0,1 мм.

На годографах импеданса образцов можно выделить полукруг в высокочастотной области и луч под небольшим углом наклона к оси абсцисс (рис. 1). Величину сопротивления нашли по отсечке на ось активных сопротивлений (рис. 1), значения приведены в таблице 1. Проводимость определяли как обратную величину сопротивлению с учетом геометрии ячейки.

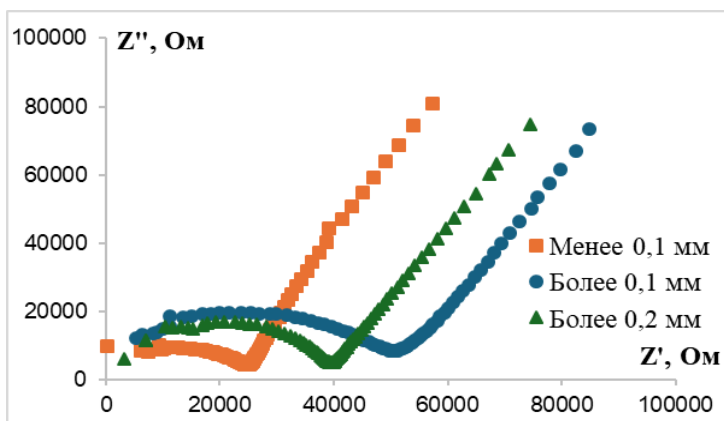


Рис. 1. Годографы импеданса образца, просеянного через систему сит

Таблица 1

Проводимость образцов в зависимости от размера частиц

Размер частиц, мм	R, Ом	$\sigma \cdot 10^{-4}$ , См/м
Менее 0,1	25000	6,5
Более 0,1	51000	3,2
Более 0,2	40000	4,1

Не наблюдается линейной зависимости проводимости от размера частиц (Табл. 1), что свидетельствует о сложном механизме транспорта протонов. Одна из причин – чувствительность образца к относительной влажности среды. Задача дальнейших исследований: определение величины протонной проводимости образцов с учетом относительной влажности среды.

#### Литература

1. Ярошенко Ф.А., Бурмистров В.А. // Электрохимия. 2015. Т. 51. № 5. С. 455–461.
  2. Коваленко Л.Ю., Ярошенко Ф.А., Бурмистров В.А., Исаева Т.Н., Галимов Д.М. // Неорганические материалы. 2019. Т. 55. № 6. С. 628-634.
  3. Белинская Ф.А., Милицина Э.А. //Успехи химии. 1980. Т. 49, № 10. С. 1905-1936.
- © Карабельникова Е.С., Коваленко Л.Ю., Бурмистров В.А., 2024



УДК 54.725.2

## МИКРОЭМУЛЬСИЯ АОТ/ВОДА/ИЗОПРОПИЛМИРИСТАТ ДЛЯ ДОСТАВКИ ЦИТОХРОМА С

Константинова М.А., Саутина Н.В., Галяметдинов Ю.Г.  
*ФГБОУ ВО «КНИТУ», Казань, Россия*

Самоорганизующиеся структуры поверхностно-активных веществ (ПАВ), такие как обратные микроэмульсии (МЭ) способны осуществлять эффективную доставку белков и пептидов, состоящих из последовательности аминокислот, являющихся структурными элементами большинства биопрепаратов [1,2]. Один из самых значимых для человеческого организма - железосодержащий белок цитохром С. Он принимает участие в качестве переносчика электронов в процессах биологического окисления, играет важную роль для реализации клеточного дыхания, способствует полному восстановлению сократительной и ритмической функций сердца.

АОТ (бис (2-этилгексил) сульфосукцинат натрия) является перспективным ПАВ для получения систем доставки, не требующим добавления со-ПАВ для образования стабильных агрегатов с минимальным межфазным натяжением вода/масло. Получена микроэмульсия АОТ/вода/изопропилмиристат, имеющая обратную структуру с размером капель 8,7 нм. Методом УФ спектроскопии определено, что максимально возможная концентрация белка, которую можно ввести в нее при сохранении стабильности и изотропности составляет 0,0125 %.

Исследовано высвобождением цитохрома С из полученной МЭ методом равновесного диализа через полупроницаемую мембрану (целлофановую пленку). Спектрофотометрическим методом определено, что цитохром С имеет максимум при длине волны 409 нм. Построен градуировочный график. Результаты эксперимента показывают, что полное высвобождение цитохрома С из микроэмульсии осуществляется за 260 минут.

Полученные модельные результаты могут быть полезны для прогнозирования и управления процессами транспорта белков и пептидов с применением в качестве систем доставки микроэмульсии АОТ/вода/изопропилмиристат.

### Литература

1. Chavda V.P., Gogoi N.R., Vaghela D.A. Parenteral microemulsions for drug delivery: Advances and update // J Drug Deliv Sci Technol. - 2023. - № 89. - P. 104991-105003.
2. Саутина Н.В., Ситдикова К.И., Галяметдинов Ю.Г. Исследование фазовых переходов в лиотропных жидкокристаллических эмульсионных системах монодециловый эфир тетраэтиленгликоля/вода/вазелиновое масло методом краевого угла смачивания // ЖПХ. – 2014. - Т. 87. - № 4. - С. 424 – 429.

© Константинова М.А., Саутина Н.В., Галяметдинов Ю.Г., 2024

УДК 544.016.2

ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ И ОСВЕЩЕНИЯ СИНТЕЗА НА  
ПРОЦЕССЫ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ ОКСИГИДРОКСИДА  
ЦИРКОНИЯ.

Криволапова А.Д., Куваева А.О.

*Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия*

Соединения циркония обладают превосходными химическими и физическими свойствами, благодаря чему являются перспективными материалами и нашли широкое применение в различных областях, таких как кислородпроводящие мембраны, газовые датчики, оптоэлектроника, катализаторы и коррозионностойкие материалы и т.д. Оксигидроксидные гели, в свою очередь, обладают высокой чувствительностью к условиям получения и, следовательно, имеют вариативность характеристик геля. Влияние различных концентраций гидролитического агента, а также освещения процесса синтеза на структурообразование оксигидроксидных гелей представляет интерес в плане управления процессами формирования кристаллических облатсей с определённой структурой и свойствами. Совершенствование характеристик востребованного  $ZrO_2$  является актуальной задачей для улучшения однородности синтезируемых электролитов, а также сокращение возникновения дефектов в структуре материала.

В данной работе в качестве исходной соли использовали оксихлорид циркония  $ZrOCl_2 \cdot 18H_2O$  ЧДА. Синтез образцов осуществляли золь-гель методом при помощи водного раствора аммиака с концентрациями 0,50 М, 1, М и 2,50 М до рН 9,5 по методике, изложенной в работе [1]. Во время введения гидролитического агента часть образцов помещали в темное место. Таким образом получали образцы в 6 наборах условий, в каждом из которых провели по 3 синтеза. Все образцы после созревания геля декантировали и отмыли дистиллированной водой до отсутствия в промывных водах противоионов исходных солей, после чего сушили на воздухе до воздушно-сухого состояния.

Рентгенофазовый анализ (РФА) (табл.1, рис. 1.) провели при помощи порошкового рентгеновского дифрактометра Rigaku Ultima IV, для этого предварительно прокалили аморфные образцы в муфельной печи при 1000 °С.

Интенсивность, отн. ед.

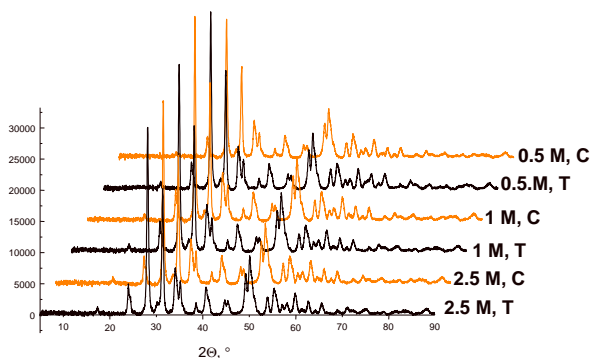


Рис. 1. Рентгеновские дифрактограммы оксигидроксида циркония в зависимости от концентрации гидролитического агента и в соответствии с условиями освещения синтеза, прокаленные при 1000 °С.

Таблица 1

Фаза, % / Размер ОКР	Концентрация гидролизующего агента/условия синтеза					
	2,50 М (С)	2,50 М (Т)	1,00 М (С)	1,00 М (Т)	0,5 М (С)	0,5 М (Т)
Т, %	6,40±0, 32	7,70±0,66	1,68±0,42	2,56±0,62	1,00±0,23	2,18±0, 34
М, %	93,60±1 ,24	92,30±2,6 8	98,32±1,29	97,44±1,57	99,00±0,8 8	97,82±1 ,12
Размер нм	13,65±1 ,17	12,78±1,6 9	17,78±0,82	16,92±1,02	12,58±0,7 5	12,77±0 ,93

Гидролитический золь-гель метод позволяет получить хорошо воспроизводимые результаты, однако воспроизводимось снижается при проведении эксперимента в темноте

Профиль кривых дифрактограмм для всех образцов схож, основные пики, согласно базе данных ICDD-COD-Inorg Rev218120 2019.09.10, соответствуют моноклинному оксиду циркония, однако доля тетрагонального  $ZrO_2$  выше в образцах, где концентрация водного раствора аммиака составляла 2,50 М, из чего следует, что более низкие концентрации образования геля предоставляют возможность структурных перестроек, что способствует формированию наиболее устойчивого направления структурообразования.

## Литература

1. Буланова А.В. Особенности структурообразования оксигидроксида иттрия, полученного золь-гель и гидротермальным методами: дис. канд. хим. наук: Челябинск, 2021. С. 118.

© Криволапова А.Д., Куваева А.О., 2024

УДК 541.49:547.587.11:547.854.4

### КОМПЛЕКСНОЕ СОЕДИНЕНИЕ ОКСИМЕТИЛУРАЦИЛА С β-ЦИКЛОДЕКСТРИНОМ И ЕГО ПРОТИВОЯЗВЕННАЯ АКТИВНОСТЬ

Латыпова А.Р., Борисова Н.С., Зимин Ю.С., Гимадиева А.Р.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Оксиметилурацил (ОМУ) обладает большим спектром биологической активности, в том числе противоязвенной, и малой токсичностью. Однако данное соединение плохо растворяется в воде (0.1–0.3 %), что ограничивает возможность его использования при разработке новых лекарственных препаратов. Решением этой проблемы может стать, например, заключение ОМУ в макроциклические полости природных олигосахаридов циклодекстринов (ЦД) вследствие образования комплексных соединений. Кроме того, анализ литературных данных и ранее полученных собственных результатов дает основания полагать, что взаимодействие с ЦД будет способствовать усилению противоязвенного действия ОМУ. Поэтому настоящая работа посвящена изучению комплексообразования оксиметилурацила с одним из представителей гомологического ряда циклодекстринов – β-циклодекстрином (β-ЦД) – и исследованию противоязвенной активности образующегося комплекса.

Спектрофотометрическим методом установлено, что в интервале температур 296–321 К в разбавленных водных растворах оксиметилурацил и β-циклодекстрин образуют устойчивое комплексное соединение (константа равновесия  $K \sim 10^3 \div 10^4$  л/моль) состава 1:1. Изучено влияние температуры, времени реакции и соотношения реагентов на выход комплексного соединения; определены термодинамические параметры комплексообразования. На основании полученных данных разработана методика синтеза комплекса и наработана опытная партия для исследования его противоязвенной активности.

Биологические испытания проводили на белых беспородных крысах массой 180–200 г. Экспериментальные язвы вызывали двукратным внутрижелудочным введением раствора ацетилсалициловой кислоты (150 мг/кг). Исследуемое комплексное соединение вводили в дозе 50 мг/кг. Животных забивали под эфирным наркозом через 24 часа и определяли поражение слизистой оболочки желудка.

Установлено, что под влиянием исследуемого комплексного соединения происходит уменьшение количества деструкций слизистой оболочки желудка более чем в два раза по сравнению с контрольной группой. Сравнивая результаты биологических испытаний комплекса ОМУ с  $\beta$ -ЦД, полученные в настоящей работе, и литературные данные о противоязвенной активности ОМУ, можно сделать вывод о том, что оксиметилурацил в комплексе с  $\beta$ -циклодекстрином обладает более выраженным противоязвенным действием.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.*

© Латыпова А.Р., Борисова Н.С., Зимин Ю.С., Гимадиева А.Р., 2024

УДК 54.057: 535.376

## ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ ТОЧЕК, ДОПИРОВАННЫЕ ИОНАМИ ЕВРОПИЯ

Максимова И.Д., Заворотько А.Э., Крупин А.С., Галяметдинов Ю.Г.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия*

Углеродные точки – это перспективный класс люминесцентных материалов. В настоящее время они привлекают к себе всё больше внимания благодаря своим преимуществам: высокой интенсивности флуоресценции, хорошей фотостабильности, биосовместимости, низкой токсичности и простому синтезу. Благодаря наличию множества различных функциональных групп по ободу С-точек, существует возможность функционализации их поверхности для изменения свойств получаемых материалов [1]. Одним из способов является образование координационных связей с различными ионами. В данном аспекте представляют интерес ионы европия(III). Соединения европия обладают ярко-выраженной красной монохроматической люминесценцией. При этом его оптические свойства довольно сильно зависят от его лигандного окружения, в связи с чем его используют для анализа веществ, в том числе в биоанализе (DELFIА-анализ).

В связи с чем целью данной работы было изучение возможности синтеза нанокompозитов на основе углеродных точек и ионов европия(III). Синие С-точки (bCD) были получены с использованием 1,2-фенилендиаминa и лимонной кислоты в соотношении 1:1 в ходе гидротермального синтеза с последующей очисткой с помощью диализа [2]. После чего путем прямого химического взаимодействия синих С-точек (bCD) с 2,6-пиридиндикарбонатом европия(III) (Eu-DPA) (рис. 1) при постоянном перемешивании в воде в течение суток при комнатной температуре были получены нанокompозиты bCD-Eu-DPA [3].

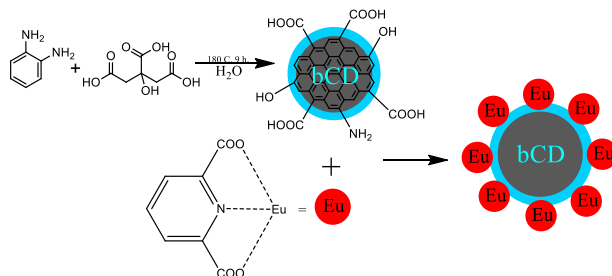


Рис. 1. Принципиальная схема синтеза нанокompозитов bCD с Eu-DPA

При облучении УФ-светом синтезированные материалы показали излучение в синей и красной области спектра. При этом варьируя длину волны возбуждения в спектрах люминесценции меняется соотношение полос, характерных для С-точек и иона европия(III) (рис. 2). При возбуждении на длине волны 280 нм преобладает излучение в красной области спектра, соответствующих переходам иона европия(III), в то время как при 370 нм – в синей, присущей С-точкам. Следовательно, при изменении длины волны возбуждения появляется возможность управления цветом излучения.

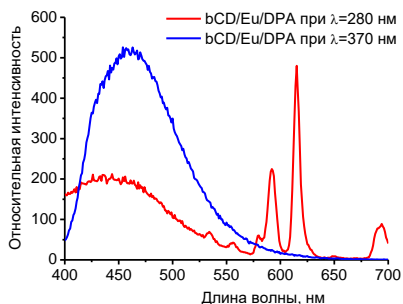


Рис. 2. Спектры излучения полученных композитов

Таким образом в работе были получены нанокompозиты на основе С-точек и ионов Eu(III), обладающих излучением в синей и красной области спектра с возможностью управления люминесцентными свойствами путём регулирования длины волны возбуждения. При этом полученные материалы имеют низкую токсичность, в связи с чем могут найти применение в качестве биомаркеров и контрастных агентов для МРТ.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект №20-73-10091).*

#### Литература

1. Yan F. et al. Surface modification and chemical functionalization of carbon dots: a review //Microchimica Acta. – 2018. – Т. 185. – С. 1-34.

2. Zhao Y. et al. A multi-color carbon quantum dots based on the coordinated effect of quantum size and surface defects with green synthesis // *Ceramics International*. – 2023. – Т. 49. – №. 11. – С. 16647-16651.

3. Tian X., Fan Z. One-step ratiometric fluorescence sensing of ascorbic acid in food samples by carbon dots-referenced lanthanide probe // *Journal of Photochemistry and Photobiology A: Chemistry*. – 2021. – Т. 413. – С. 113261.

© Максимова И.Д., Заворотько А.Э., Кругин А.С., Галяметдинов Ю.Г., 2024

УДК 544

## ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ СУБМИКРОННОГО ДОЛОМИТА ПО ОТНОШЕНИЮ К ИОНАМ МЕДИ (+2) МЕТОДОМ СТАТИКИ

Ильясова Р.Р., Маркелова С.В.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Развитие промышленности РФ требует разработки и применения материалов с высокими эксплуатационными характеристиками. В последние годы интерес ученых и технологов направлен на получение материалов с высокой раздробленностью, обладающих высокой поверхностной активностью и физико-химической эффективностью.

Целью данной работы стало изучение сорбционных свойств субмикронного доломита по отношению к ионам меди (II). Метод извлечения меди из промышленных сточных вод способствует решению как экологических проблем очистки сточных вод предприятий от ионов тяжелых металлов, также позволяет получать ценное медное сырье для дальнейшего использования.

Доломит – природный минерал с химической формулой  $\text{CaCO}_3 \times \text{MgCO}_3$ , механически измельчен на коллоидной лабораторной мельнице. Размер частиц уменьшился в интервале от [2 - 50 мкм с максимумом в 30 мкм] до [2 - 10 мкм с максимумом 5 мкм].

Авторами были поставлены задачи: подобрать экспериментальным путем оптимальные условия сорбции меди (+2) частицами субмикронного доломита: pH, температуру, время контакта сорбента и раствора соли, соотношение массы сорбента и объема водного раствора соли меди(+2). Сорбция ионов меди проведена в статическом формате. Эффективность сорбции определена по степени извлечения ионов меди (2+), рассчитанной по формуле:

$$R, \% = [C_0 - C / C_0] \cdot 100\% \quad (I)$$

где  $C_0$  – концентрация меди (+2) в водном растворе до сорбции,  $C$  – равновесная концентрация меди (+2) в растворе после сорбции.

Степень извлечения ионов меди(+2) составила 94% при концентрации  $10^{-2}\text{M}$ , что свидетельствует о высокой сорбционной эффективности

субмикронного доломита. Степень извлечения частицами исходного доломита составила 55%. Таким образом, субмикронный доломит можно рекомендовать в качестве эффективного сорбента по отношению к ионам меди (+2).

#### Литература

1. Меркулова Е.Н., Жижаев А.М., Чугуевская М.А. Эффективность использования природных карбонатов кальция в качестве коллектора тяжелых цветных металлов // Горный информационно-аналитический бюллетень. 2009. с. 486 – 493.

© Ильясова Р.Р., Маркелова С.В., 2024

УДК 541

### ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ НАНОУГЛЕРОДА ПО ОТНОШЕНИЮ К ИОНАМ ЛАНТАНА (III)

Мухаметдинова А.Я., Ильясова Р.Р.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Углеродные нанотрубки — протяженные цилиндрические структуры диаметром от одного до нескольких десятков нанометров и длиной до нескольких микрон состоят из одной или нескольких свернутых в трубку гексагональных графитовых плоскостей (графенов).

Соединения лантана - один из важнейших ресурсов для огромного числа современных высокотехнологичных промышленных процессов: производство микроэлектроники, оптического оборудования, материалов «зеленой» энергетики, автомобилестроения и др.

Цель работы состоит в изучении сорбционных свойств УНТ по отношению к La(III). Было необходимо установить оптимальные условия сорбции ионов La(III) частицами углеродных нанотрубок, а также установить механизм сорбции по форме изотермы сорбции.

Сорбционные свойства УНТ по отношению к ионам La(III) изучены в статическом режиме. Аналитические исследования по измерению равновесной концентрации ионов лантана (III) проведены методом фотометрии.

Установлено, что оптимальные условия сорбции ионов La(III) частицами углеродных нанотрубок следующие: температура 20<sup>0</sup>С; pH сорбции 7,4; время установления сорбционного равновесия 10 минут; соотношение массы сорбента к объему водного раствора соли 1:10.

В соответствии с формой полученной изотермы сорбции установлено, что механизм сорбции мономолекулярный, что соответствует изотермам сорбции Лэнгмюра. Установлено, что протекающая сорбция имеет физический характер, так как с увеличением температуры сорбция ионов La(III) уменьшается, что имеет немаловажное значение для изучения



процессов десорбции ионов La(III) с поверхности сорбента и дальнейшей регенерации сорбента.

При соблюдении оптимальных условий сорбции степень извлечения лантана (III) составила 85% при концентрации иона  $10^{-3}$  моль/л, что говорит о высокой перспективности использования данного сорбента.

#### Литература

1. Колешко В. М., Дейнак Д. А. Наноуглерод: структура, свойства. – 2007.

© Мухаметдинова А.Я., Ильясова Р.Р., 2024

УДК 544.182.24:544.182.32:544.032.52:544.169

### ЭЛЕКТРОННЫЕ И ЭМИССИОННЫЕ СВОЙСТВА ДЕФЕКТНЫХ ОДНОСТЕННЫХ ОТКРЫТЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Мякишев А.Ю., Родионова Е.В., Родин Е.А., Томилин О.Б.

*МГУ им. Н.П. Огарева, Саранск, Россия*

Изучение эмиссионных свойств углеродных нанотрубок (УНТ) представляет собой сложную научную задачу, поскольку эти свойства зависят от множества факторов, таких как геометрическая структура, наличие дефектов и примесей на поверхности нанотрубок, а также влияние внешних условий, например, электрического поля. Ни один из существующих методов синтеза не обеспечивает создание идеальных наноструктур, что делает изучение влияния дефектов на эмиссионные свойства УНТ особенно актуальным.

Ранее проведенные исследования показали, что дефекты в гексагональной структуре, такие как вакансии и другие дефекты, существенно влияют на электронные свойства УНТ. Несмотря на это, на данный момент нет четкого понимания того, как именно эти дефекты влияют на эмиссионные свойства нанотрубок.

В данной работе объектом исследования являлись ультракороткие молекулы, моделирующие одностенные открытые нанотрубки (ОСУНТ) с различной хиральностью (5,0), (6,0) (7,0) и (3,3) и содержащие вакансии: V1 – образуемой при удалении одного атома углерода из графеновой поверхности трубки и V3 полученной при удалении трех смежных атомов углерода из графеновой поверхности УНТ.

К дефектным ОСУНТ прикладывалось постоянное однородное электрическое поле (напряженностью от 0,0 до 2,1 В/Å), направленного поперек оси нанотрубки. Расчеты электронного строения одностенных открытых нанотрубок выполнены методом DFT 6-31G/B3LYP FireFly.

Результаты исследования показали, что в ОСУНТ с вакансиями существуют эмиссионные молекулярные орбитали, на которых электронная плотность локализуется на торцевых поверхностях молекул [1]. Также было

обнаружено, что в нанотрубках с дефектами V1 и V3 в валентной зоне существуют молекулярные орбитали с локализацией электронной плотности на атомах в области дефекта.

#### Литература

1. Томилин О.Б., Родионова Е.В., Родин Е.А. и др. Зависимость энергии эмиссионных молекулярных орбиталей в коротких открытых углеродных нанотрубках от электрического поля – ФТТ, 2022. – Т. 64, В.3. – С. 359-364.

© Мякишев А.Ю., Родионова Е.В., Родин Е.А., Томилин О.Б., 2024

УДК 544.47

### ПАЛЛАДИЙ-ХРОМОВЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ АЦЕТИЛЕНА

Никуленко Т.А., Мельников Д.П.

*ФГАОУ ВО РГУ нефти и газа (НИУ) имени И.М. Губкина, Москва, Россия*

Селективное гидрирование является важным промышленным процессом для очистки олефиновых фракций от алкиновых и диеновых углеводородов. Гидрированию подвергаются: ацетилен в этан-этиленовых фракциях, пропиин и пропадиен в пропан-пропиленовых, бутadiен в бутан-бутиленовых, бутины в бутилен-дивинильных фракциях и т.п. Наиболее крупнотоннажным процессом селективного гидрирования является гидрирование ацетилена, которое осуществляется на палладиевых катализаторах, промотированных, как правило, серебром [1].

В данной работе синтезированы и исследованы палладиевые катализаторы, промотированные хромом. Катализаторы охарактеризованы рядом физико-химических методов: низкотемпературная адсорбция азота, хемосорбция CO, просвечивающая электронная микроскопия. Каталитические свойства синтезированных катализаторов исследованы в широком диапазоне объемной скорости подачи сырья при температурах 30 и 40 °С и при соотношении водород:ацетилен равном 2,0. В качестве образца сравнения в аналогичных условиях был протестирован промышленный палладий-серебряный катализатор на оксиде алюминия с таким же содержанием палладия.

В области умеренных конверсий ацетилена (<80%) селективность по этилену находится на одном уровне (~65-70%) для лучшего из палладий-хромовых и промышленного катализатора. В области высоких конверсий на обоих катализаторах селективность резко снижается, при этом на палладий-хромовом катализаторе составляет 21%, а на промышленном палладий-серебряном – 32% (при конверсии ацетилена 99%). При этом палладий-хромовый катализатор оказался существенно более активным – производительность по ацетилену на нем составила  $2,83 \cdot 10^{-4}$  моль C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>/(кг

кат·с), в то время как на промышленном катализаторе –  $1,14 \cdot 10^{-4}$  C<sub>2</sub>H<sub>2</sub>/(кг кат·с).

#### Литература

1. Занавескин, Л.Н., Смирнов, В.В., Аверьянов, В.А., Занавескин, К.Л. Каталитическое гидрирование примесей алкинов и алкадиенов в олефинах. Практический и теоретический аспекты // Успехи химии. – 2009. – Т. 78. – №. 3. – С. 248-265.

© Никуленко Т.А., Мельников Д.П., 2024

УДК 546.865-31

### АДСОРБЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛИСУРЬМЯНОЙ КИСЛОТЫ ПО ОТНОШЕНИЮ К КРАСИТЕЛЮ МЕТИЛЕНОВОМУ СИНЕМУ

Нуждина Ю.В., Коваленко Л.Ю.

*Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия*

Полисурьмяная кислота (ПСК) состава H<sub>2</sub>Sb<sub>2</sub>O<sub>6</sub>·nH<sub>2</sub>O (значение n находится в диапазоне от 2 до 4) кристаллизуется в структурном типе дефектного пирохлора (пр.гр.симв. Fd3m). Дефектность обусловлена вакантными 8b позициями и заполнением 16d позиций однозарядными ионами. Именно с особенностями структуры связывают ионообменные и протонпроводящие свойства ПСК [1-3]. Вместе с тем малоизученным остается вклад поверхности частиц ПСК.

В связи с этим целью работы было определение адсорбционной способности ПСК по отношению к красителю метиленовому синему.

Сорбционные характеристики изучали по известной методике: к навеске ПСК добавляли раствор метиленового синего заданных концентраций (0,005 г/л, 0,01 г/л, 0,02 г/л, 0,04 г/л). Наблюдали обесцвечивание метиленового синего. Для отделения частиц ПСК от раствора проводили центрифугирование (3000 об/мин) в течение 30 минут (предварительно было определено: 30 минут - оптимальное время для отделения частиц ПСК от раствора). Далее отбирали порцию раствора над ПСК. Для контроля концентрации метиленового синего в растворе использовали Спектрофотометр ПЭ-S400УФ, толщина кюветы 10мм. Рабочая длина волны была выбрана по максимуму светопоглощения раствора метиленового синего - 664 нм.

Зависимость оптической плотности раствора метиленового синего от концентрации линейна в интервале концентраций 0-0,01 г/л (рис. 1).

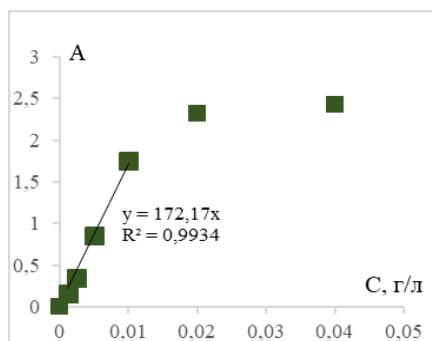


Рис. 1. Градуировочный график раствора метиленового синего  
 С помощью градуировочного графика были найдены значения равновесной концентрации метиленового синего в растворах после сорбции на ПСК. По разности исходной концентрации и равновесной смогли определить количество адсорбированного метиленового синего на 1г ПСК и построить изотерму адсорбции (рис. 2).

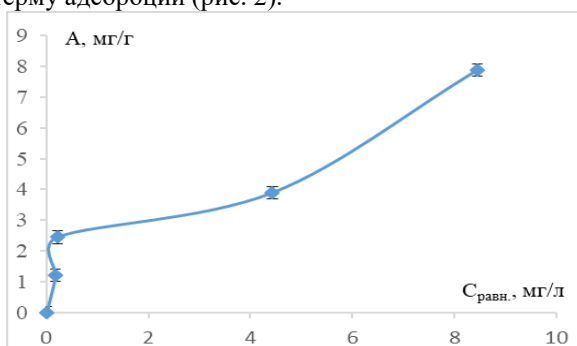


Рис. 2. Изотерма адсорбции метиленового синего на ПСК.

Изотерма имеет сложный вид, что может свидетельствовать о наличии пор различного размера в ПСК, либо о полидисперсности ПСК.

Для определения механизма адсорбции дальнейшие исследования будут проведены при контролируемом размере частиц ПСК.

#### Литература

1. Composition and structured phases formed in the process of hydrated antimony pentoxide thermolysis / D. Klestchov, et al. // Journal of Solid State Chemistry. – 1991. – V. 94, № 2. – P. 220-226.
2. Structure and proton conduction in pyrochlore-type antimonite acid: a neutron diffraction study / R.C.T. Slade, et al. // Solid State Ionics. – 1996. – V. 92. – P. 171-181.
3. Коваленко Л.Ю., Бурмистров В.А. Диэлектрическая релаксация и протонная проводимость полсульфурной кислоты, допированной ионами ванадия /

544.722.1

## ИЗОТЕРМЫ СОРБЦИИ КРАСИТЕЛЯ ПРЯМОГО АЛОГО ПРИРОДНЫМИ МАТЕРИАЛАМИ ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

Пигида Н.В., Горбачев А.С., Лысенко А.В.

*Юго-Западный государственный университет, Курск, Россия*

По объемам потребляемой воды и промышленных стоков красильно-отделочное производство уступает только некоторым отраслям, таким как, черная и цветная металлургия, химическая промышленность и топливно-энергетический комплекс [1-2].

При обработке текстильных материалов возникают сточные воды, содержащие разнообразные загрязнители, включая растворимые красители, которые не удаляются полностью на очистных сооружениях [3-4].

Органические красители, попадая в водные источники, оказывают отрицательное воздействие на местные сообщества водных организмов [5].

Для эффективной очистки промышленных красителей из сточных вод используются различные методы, такие как регенерация, коагуляция, флокуляция, флотация, ионный обмен, экстракция, электролиз и сорбция [6].

При этом остается перспективным применение доступных и дешевых сорбентов, в том числе природных материалов.

В ходе исследования были изучены природные минералы: перлит, керамзит, цеолит, бентонит.

В работе использовался метод одноступенчатой статической сорбции. Сорбцию проводили при постоянной температуре ( $T=298\text{ K}$ ) в одинаковом объеме раствора красителя ( $V=20\text{ см}^3$ ). Для этого к растворам различной концентрации добавляли навески природного сорбента массой 1 г [7]. Затем смесь перемешивали в течение 30 минут с помощью специального устройства для сорбции красителей из водных растворов, после чего фильтровали и определяли остаточную концентрацию сорбента ( $C_{\text{ост}}$ , моль/л) с помощью спектрофотометрического метода.

Концентрация красителя в водных растворах была определена с помощью фотометрического метода. Для этого были измерены значения оптической плотности ( $A$ ) в зависимости от длины волны ( $\lambda$ , нм) и выбрана рабочая длина волны 497 нм. Оптическую плотность растворов красителей измеряли на спектрофотометре PromEcoLab ПЭ-5400УФ в кварцевых кюветах с толщиной поглощающего слоя 1,0 см. Для установления зависимости между оптической плотностью ( $A$ ) и концентрацией красителей ( $C$ , моль/л) строили калибровочный график в координатах: по

оси абсцисс откладывали концентрацию растворов красителей, а оси ординат – соответствующие значения оптической плотности.

Для изучения способности природных материалов к удержанию красителя прямого алого было проведено исследование степени сорбции в зависимости от исходной концентрации красителя в водном растворе.

Изотермы сорбции, которые показывают зависимость сорбционных свойств ( $\Gamma$ ) от равновесной концентрации ( $C_p$ , моль/л) сорбируемого компонента, могут дать основные сведения о сорбционных свойствах минералов, таких как перлит, цеолит, керамзит и бентонит, и о характере адсорбции [8]. На рисунке 1 представлены изотермы сорбции природных минералов.

Адсорбцию ( $\Gamma$ , моль/г) рассчитывали по формуле (1):

$$\Gamma = \frac{(C_0 - C_p)}{m} V, \quad (1)$$

где  $C_0$  и  $C_p$  – исходная и равновесная концентрация, моль/дм<sup>3</sup>;  $m$  – масса навески сорбента, г;  $V$  – объём раствора, дм<sup>3</sup>.

На рисунке 1 представлены изотермы сорбции природных минералов.

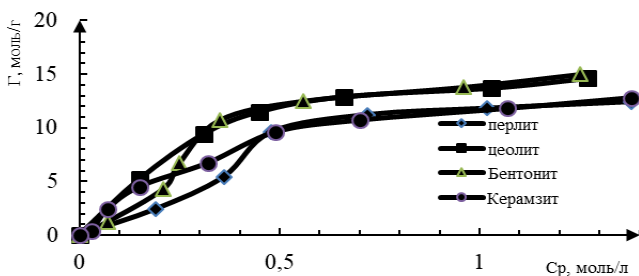


Рис. 1. Изотерма сорбции красителя прямого алого природными материалами из водных растворов

Согласно классификации Брунауэра, Эммета и Теллера (БЭТ), изотермы сорбции природными материалами красителя прямого алого из водного раствора соответствуют типу 1. Изотермы сорбции типа 1 характеризуются мономолекулярной адсорбцией. Выпуклые области на изотермах типа 1 указывают на присутствие микропор в сорбентах.

Изотерма 1-го типа свидетельствует о размере микропор сорбентов: кривые изотерм бентонита и цеолита указывают на ультрапористый размер, в то время как кривые изотерм перлита и керамзита характеризуются микропористым размером.

Проведено исследование процесса сорбции природными материалами красителя прямого алого из водных растворов, на основе которого были построены соответствующие изотермы сорбции. Согласно классификации БЭТ, было установлено, что изотермы сорбции данных минералов из водных растворов красителя прямого алого соответствуют типу I.

## Литература

1. Сазонова А.В. Концентрирование промышленных красителей из водных растворов карбонатными породами // Известия Юго-Западного государственного университета. 2012. № 1-1 (40). С. 236-241.
  2. Лысенко А.В., Левина К.А., Кувардин Н.В. Адсорбция прямых светопрочных красителей целлюлозным сырьем из водных растворов // Известия Юго-Западного государственного университета. Серия: Техника и технологии. 2021. Т. 11. № 1. С. 114-129.
  3. Шабалина К.И., Мяснянкина В.С., Сазонова А.В. Влияние массы древесных опилок на степень сорбции прямых красителей из водных растворов в зависимости от pH среды // Фундаментальные и прикладные исследования в области химии и экологии: материалы международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Юго-Западный государственный университет. 2015. С. 232-234.
  4. Фрундина Д.А., Ветчинова Д.В., Лысенко А.В. Очистка сточных вод отходом сахарного производства от прямых красителей // Будущее науки-2017: сборник научных статей 5-й Международной молодежной научной конференции. 2017. С. 340-343.
  5. Котова А.К., Сазонова А.В., Ниязи Ф.Ф. Использование отходов дробильно-обоганительного комплекса для очистки сточных вод от красителя катионный синий О // Фундаментальные и прикладные исследования в области химии и экологии: материалы международной научно-практической конференции студентов, аспирантов и молодых ученых. Юго-Западный государственный университет. Курск. 2015. С. 182-184.
  6. Лысенко А.В., Янкив К.Ф., Левина К.А. Кинетика и константы скорости диффузии при сорбции прямых красителей древесными опилками // За нами будущее: взгляд молодых ученых на инновационное развитие общества: сборник научных статей Всероссийской молодежной научной конференции. 2020. С. 154-158.
  7. Пигида Н.В., Лысенко А.В., Лысенко Е.А., Ефремова А. Влияние массы природных сорбентов на степень сорбции красителя прямого алого из водных растворов // Фундаментальные и прикладные исследования в области химии и экологии – 2023: сборник научных статей Международной научно-практической конференции. Курск. 2023. С. 235-239.
  8. Сазонова А.В. Термодинамика и кинетика сорбции поллютантов сточных вод нетрадиционными материалами: автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата химических наук / Институт биохимической физики им. Н.М. Эмануэля Российской Академии Наук. Курск, 2013.
- © Пигида Н.В., Горбачев А.С., Лысенко А.В., 2024

УДК 54.03+54.06

## РАЗРАБОТКА СОСТАВА ГЕЛЯ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ С АНТИСЕПТИЧЕСКИМИ И АНАЛЬГЕЗИРУЮЩИМИ СВОЙСТВАМИ

Попова Е.А., Фокина А.И.

*Вятский государственный университет, Киров, Россия*

В литературе отсутствуют данные о свойствах композиций с составом «Альгинат натрия – лидокаин – водный экстракт прополиса», обладающих заживляющим действием. Поэтому в работе представлены результаты изучения гелей на основе альгината натрия с антисептическими и анальгезирующими свойствами.

Альгинат натрия – ионогенный полисахарид, получаемый путём щелочной экстракции бурых водорослей [1]. Водорастворимость, нетоксичность, высокая загущающая способность обуславливают широкое применение этого полисахарида в пищевой, косметической, текстильной, бумажной и других отраслях промышленности [2]. Лидокаин – местный анестетик, содержащий амидную связь. Лидокаин начинает действовать быстро и имеет среднюю продолжительность действия [3].

Изготавливали гели с содержанием альгината натрия 2%, 2,5%, 3%. Брели рассчитанную навеску альгината натрия, растворяли ее в водном экстракте прополиса и в лидокаине. Экстракт прополиса готовили на ультразвуковой ванне в течение часа. Массовое соотношение вода:прополис было 95:5. Концентрация гидрохлорида лидокаина во всех образцах составляла 0,3%. У полученных образцов гелей определяли: кислотность, водопоглощение, растекаемость.

### **Кислотность водных растворов геля на основе альгината натрия с водным экстрактом прополиса.**

Результаты исследования свидетельствуют о том, что с увеличением концентрации альгината натрия рН водного раствора гелевых композиций сдвигается в щелочную сторону, и для всех композиций находится в среднем в пределах от  $5,2 \pm 0,1$  до  $5,3 \pm 0,1$  ед. рН, что соответствует значениям рН здоровой кожи. Величина рН здоровой кожи находится в пределах 3,0–6,0. Важно учитывать этот показатель у лекарственной формы, так как при значительных различиях с рН кожи он может указывать на возможное раздражающее действие лекарственных форм.

### **Особенности водопоглощения геля.**

Тест на водопоглощение показал, что процесс выхода геля в диализную среду преобладает над процессом водопоглощения.



Исследования позволяют сделать вывод, что изученные гелевые композиции не требуют корректировки значения рН, так как их водородный показатель соответствует кислотности поверхности кожи.

Исходя из опытов, можно сделать вывод, что гель не будет сушить кожу. Часть геля будет впитываться в кожу.

#### **Тест на растекаемость.**

На равномерность распределения продукта по коже влияет его растекаемость. Мерой этого параметра является увеличение площади поверхности гидрогеля под приложенным давлением. Легкость нанесения геля облегчает его равномерное нанесение на кожу. Установлено, что наибольшую растекаемость имели гели на основе 2% альгината натрия, а наименьшей – 3% альгината натрия. Растекаемость 3% геля в 1,4 раз меньше, чем у 2%.

Проведенные эксперименты показали возможность применения данных гелевых основ для изготовления нового лекарственного препарата, так как возможно создание композиции однородных, впитывающихся в кожу, обладающих значениями рН, соответствующих кислотности здоровой кожи; при контакте с диализной средой выход активных компонентов преобладает над водопоглощением.

#### Литература

1. Юсова А. А., Гусев И. В., Липатова И. М. Свойства гидрогелей на основе смесей альгината натрия с другими полисахаридами природного происхождения // Химия растительного сырья, 2014. № 4. С. 1.
2. Научный альманах / Е.Л. Макарова, И.В. Петракова // Сорбционные свойства альгината натрия. 2015. N 11-4. С. 212.
3. Шептий О.В. Применение анестезирующего крема лидокаин/прилокаин для лазерных процедур в дерматологии и косметологии. Клиническая дерматология и венерология. 2020. С. 117.

© Попова Е.А., Фокина А.И., 2024

УДК 54.022:547.7

### ОТНЕСЕНИЕ ПОЛОС ПОГЛОЩЕНИЯ ИК-СПЕКТРА $\pi$ -КОМПЛЕКСА 5-(1-ПЕНТИЛ-4-МЕТИЛ-1,2,3-ТРИАЗОЛ-4-ИЛ)-6-МЕТИЛУРАЦИЛА С ХЛОРИДОМ МЕДИ(II)

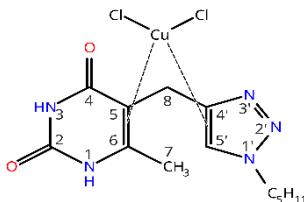
Пышкин <sup>1</sup>А.А., Сайтгарева <sup>2</sup>Е.И., Файзрахманов <sup>2</sup>И.С., Хамитов <sup>1</sup>Э.М.,  
Иванов <sup>1</sup>С.П.

<sup>1</sup>Уфимский Институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

<sup>2</sup>Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Ранее, было показано, что при реакции 5-(1-пентил-4-метил-1,2,3-триазол-4-ил)-6-метилурацила (ТМУ) с хлоридом меди(II) в мольном соотношении 1:1 в ацетоне образуется осадок, который, по результатам

ЯМР-спектроскопии, предположительно является  $\pi$ -комплексом  $\text{TМУ} \times \text{CuCl}_2$ .



Целью данной работы являлось отнесение полос поглощения в ИК-спектре полученного комплекса. ИК-спектры регистрировались на Фурье-спектрометре IR Prestige-21 (Shimadzu) в диапазоне волновых чисел – 4000-400  $\text{см}^{-1}$ . Квантово-химические расчеты проведены в программе Gaussian09. В качестве основного приближения использовали метод M06/def2tzvp.

В таблице представлены данные отнесения ИК-спектров для

Отнесения	ТМУ, $\text{см}^{-1}$	Комплекс, $\text{см}^{-1}$	$\Delta$ , $\text{см}^{-1}$
$\nu_s(\text{C}(2)=\text{O})$	1749	1717	33
$\nu_s(\text{C}(4)=\text{O})$	1678	1651	27
$\nu_s(\text{C}(5)=\text{C}(6))$	1643	1612	31
$\nu_{\text{as}}(\text{C}(4')=\text{C}(5'))$	1539	1450	89
$\nu(\text{N}(2')=\text{N}(3'))$	1277	1225	52

выделенного продукта взаимодействия ТМУ с хлоридом меди в ацетоне. ИК-спектр ТМУ отнесли ранее, в работе [1]. Существенные изменения происходят в области валентных колебаний триазольного кольца  $\text{C}(4')=\text{C}(5')$  и  $\text{N}(2')=\text{N}(3')$ . В меньшей степени меняются полосы поглощения валентных колебаний урацильного кольца, что может свидетельствовать о преимущественной координации меди с триазольным кольцом ТМУ.

Таким образом, произведено отнесение полос ИК-спектра выделенного продукта взаимодействия ТМУ с хлоридом меди(II) в ацетоне с применением методов вычислительной химии. Полученные результаты хорошо согласуются с предположенной на основании данных ЯМР спектроскопии структурой  $\pi$ -комплекса.

#### Литература

1. Пышкин А.А., Хамитов Э.М., Шишлов Н.М., Иванов С.П. // Вестник Томского государственного университета. – 2023. – №31. – С. 62-72.

© Саитгареева Е.И., Файзрахманов И.С., Пышкин А.А., Хамитов Э.М., Иванов С.П., 2024

УДК 541.14:547.551.2

QSAR-МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНГИБИТОРОВ 15-ЛИПОКСИГЕНАЗЫ В  
РЯДУ ПРОИЗВОДНЫХ 3-ЗАМЕЩЕННЫХ ПИРАЗОЛОВ И 4-  
ЗАМЕЩЕННЫХ ТРИАЗОЛОВ

Рассказова Я.О., Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Липоксигеназы (LOX) представляют собой железосодержащие ферменты, которые принимают непосредственное участие в перекисном окислении липидов и полиненасыщенных жирных кислот (ПНЖК), включая арахидоновую кислоту. При окислении данных субстратов под действием LOX образуются лейкотриены, которые участвуют как в физиологических процессах, так и в патогенезе ряда воспалительных, гиперпролиферативных и нейродегенеративных заболеваний. Как правило, воспалительные заболевания развиваются при избыточном производстве лейкотриенов. Помимо этого, 15-LOX играет значимую роль в развитии рака через усиление транскрипционной активности PPAR $\gamma$ . Поэтому можно утверждать, что ингибиторы 15-LOX будут считаться эффективными химиотерапевтическими средствами. В соответствии с данными ЯМР-спектроскопии, фермент LOX имеет два домена - N-концевой и C-концевой, где расположен активный центр, который содержит функциональные аминокислоты и ион железа. Известны три семейства липоксигеназ человека (5-LOX, 12-LOX, 15-LOX), действующие на атомы углерода ПНЖК, находящиеся в положениях C<sub>5</sub>, C<sub>12</sub> и C<sub>15</sub>. В этих белках при окислении ПНЖК (например, арахидоновой кислоты) образуются биологически активные соединения и провоспалители 5S-, 12S- или 15S-гидропероксиды соответственно.

Целью настоящего исследования было построение моделей QSAR для поиска и количественного прогноза эффективных ингибиторов 15-LOX. Модели QSAR строили на основе ряда производных 3-замещенных пиразолов и 4-замещенных триазолов. Эти соединения характеризовались разной степенью активности в отношении 15-LOX.

Симуляция представляла собой количественное моделирование параметра pIC<sub>50</sub>. Для расчетов использовали программу GUSAR2019. С использованием данной программы строили QSAR-модели на основе 71 ингибиторов 15-LOX, которые находились по активности в диапазоне 10 нМ – 3965 нМ. Для построения и проверки консенсус-моделей использовалась методика, описанная в работах [1-3], при этом в процессе применялась программа GUSAR 2019. Метод отбора переменных – SCR (самосогласованная регрессия).

В ходе симуляций были разработаны шесть консенсус моделей QSAR M1-M6. Важно отметить, что проверка их статистической значимости и

устойчивости показала хорошие результаты. Модели M1-M6 планируется применять для предварительной оценки численных значений  $pIC_{50}$  для ингибиторов фермента 15-LOX (таблица 1).

Таблица 1

Характеристики моделей QSAR M1-M6

OB <sub>i</sub>	Дескриптор	N <sub>i</sub>	R <sup>2</sup> <sub>OB<sub>i</sub></sub>	F	StD	Q <sup>2</sup> <sub>OB<sub>i</sub></sub>	V	R <sup>2</sup> <sub>ТВ<sub>i</sub></sub>
OB1	QNA	48	0,860	23,383	0,219	0,802	8	0,5549
	MNA		0,766	11,199	0,294	0,668	7	0,4529
	QNA+MNA		0,851	15,690	0,242	0,783	8	0,5374
OB2	QNA	40	0,831	14,202	0,234	0,734	8	0,7424
	MNA		0,681	5,414	0,340	0,550	6	0,6108
	QNA+MNA		0,835	9,652	0,260	0,749	7	0,6609

где N – число соединений в каждой из выборок OB<sub>i</sub>; Q<sup>2</sup> – коэффициент детерминации при скользящем контроле для выборок с 80% N; R<sup>2</sup> – коэффициенты детерминации для выборок со 100% N; F – критерий Фишера; StD – стандартное отклонение, V – число значимых переменных.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.*

#### Литература

1. Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р., Насретдинова Р.Н. [и др.] Определение констант скорости обрыва цепи радикально-цепного окисления органических соединений на молекулах антиоксидантов методом QSPR // Известия Академии наук. Серия химическая. 2020. – №9. – С. 1679-1691.
2. Хайруллина В.Р., Акбашева Ю.З., Янгирова К.Р. [и др.] QSAR-моделирование некоторых производных урацила с выраженной ингибиторной активностью в отношении дезоксиуридинфосфорилазы // Вестник Баш-го ун-та. 2018. – Т.23, № 4. – С. 987-993.
3. Khairullina V., Martynova Y., Safarova I. [и др.] QSPR Modeling and Experimental Determination of the Antioxidant Activity of Some Polycyclic Compounds in the Radical-Chain Oxidation Reaction of Organic Substrates // Molecules. 2022. – V. 27. – 6511.

© Рассказова Я.О., Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р., 2024

УДК 577.1

### ВЛИЯНИЕ НИТРОПРУССИДА НАТРИЯ НА БИОХИМИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ ПШЕНИЦЫ ПРИ ДЕЙСТВИИ ЦИНКА

Рахматуллина С.Р.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Антропогенная деятельность связана с утилизацией бытовых отходов, ирригацией засушливых земель водой с применением промышленных

стоков, переработкой отходов рудных производств - всё это источники, загрязняющие земли тяжелыми металлами (ТМ). В связи со сложностями очистки земель от тяжелых металлов - проблема эта усложняется. ТМ поступают в растения через корневую систему, в результате чего происходит первичная реакция растения на их воздействие. Вещества, обладающие протекторными свойствами, каким является Нитропруссид натрия (SNP) снижают токсическое действие ТМ на растения. Защитный эффект связан с активацией ферментов антиоксидантной защиты [1]. Известно, что обработка проростков пшеницы *Sodium nitroprusside* (SNP) снижала содержание перекиси водорода и малонового диальдегида [2]. Данных о смягчении действия на растения ионов токсичных металлов при обработке донорами NO достаточно. Цинк (Zn) в допустимой концентрации микроэлемент, являющийся кофактором ферментов, участвующих в метаболизме азота, фотосинтезе, синтезе нуклеиновых кислот, белков. Высокие его концентрации оказывают токсическое действие на биохимические процессы, нарушающие морфогенез растений. Zn - индуктор окислительного стресса, в ответ на который возрастает активность антиоксидантных ферментов - каталазы и пероксидазы, участвующих в детоксикации перекиси водорода. Выявлено, что при действии SNP активность пероксидазы в побегах увеличивалась на 29,3% по сравнению с вариантом SNP/цинк. Добавление SNP к цинку приводило к увеличению в корнях активности каталазы на 24,6 %. Обработка нитропруссидом натрия (на цинке) приводила к снижению содержания малонового диальдегида в побегах и корнях на 29,9% и 27,1% соответственно.

#### Литература

1. Wang S.-H., Zhou Z.-Y., He Q.-Y. et al. Nitrogen oxide suppress nickel toxicity in wheat plantlets // Acta Bot. Yunnanica. - 2007.-V.29, №1.-P.115-121.
2. Чжан Х., Ли Я.Х., Ху Л.Ю. и др. Влияние обработки листьев пшеницы донором окиси азота на антиокислительный метаболизм при стрессе, вызванном алюминием // Физиология растений - 2008. Т. 55. № 4. С. 523-528.

© Рахматуллина С.Р., 2024

УДК 546.654:547.581

КОМПЛЕКСЫ ЛАНТАНОИДОВ С 1,2,3 – ТРИАЗОЛАМИ:  
ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ И БИОАКТИВНЫЕ СВОЙСТВА

Селиванова<sup>1</sup> Н.М., Рыбакова<sup>2</sup> А.И., Семенов<sup>3</sup> В.Э.

<sup>1</sup>*Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия*

<sup>2</sup>*Марийский государственный университет, Йошкар-Ола, Россия*

<sup>3</sup>*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия*

Люминесцентные материалы находят широкое применение в различных областях биомедицины и молекулярной оптоэлектроники [1]. В данной работе синтезированы новые комплексы лантаноидов с биоактивными лигандами: замещенными 1,2,3 –триазолами. Проводилось исследование оптических и биоактивных свойств как индивидуальных лигандов, так и металлокомплексов. Разработаны методики синтеза новых гетеролигандных комплексов на основе замещенных 1,2,3-триазолов: бис-1,3-(4-метилкарбоксил-1,2,3-триазол-1-ил)ксилилена (TR1), 1-октил-4-карбоксил-1,2,3-триазол (TR2); β-дикетонов: ацетилацетона (AcAc), теноилтрифторацетона (TTA) и гексагидратов хлоридов Tb(III), Eu(III), Dy(III). Исследование оптических свойств гетеролигандных комплексов показало характерную люминесценцию с максимумами в зеленой ( $\lambda = 545$  нм), красной ( $\lambda = 612$  нм) и желтой ( $\lambda = 574$  нм) областях спектра, соответственно. Комплекс  $[Tb(AcAc)_2(TR1)]$  обладает улучшенными люминесцентными характеристиками. Эффективность люминесценции комплекса на 13% выше, чем у монолигандного комплекса  $Tb(AcAc)_3$ . Синтезированные лиганды TR1, TR2 и комплекс  $[Tb(AcAc)_2(TR1)]$  были исследованы на цитотоксичность в отношении нормальных (Chang liver) и раковых (M-HeLa и HuTu80) клеточных линий человека. Установлено, что TR2 обладает противоопухолевыми свойствами в отношении M-HeLa и HuTu 80, при этом на здоровые клетки Chang liver оказывает токсическое воздействие. TR1 избирательно действует на клетки HuTu 80 и при этом не токсично в отношении гепатоцитов человека. Исследование синтезированного гетеролигандного комплекса  $[Tb(AcAc)_2(TR1)]$  показало, что он является цитотоксически неактивным в отношении всех клеточных линий, используемых в эксперименте. Таким образом, синтезированные комплексы демонстрируют высокий потенциал как в качестве оптических зондов для биомедицинского применения, а биоактивные лиганды - в качестве противоопухолевых препаратов.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-23-00187, <https://rscf.ru/project/24-23-00187>*

© Селиванова Н.М., Рыбакова А.И., Семенов В.Э., 2024

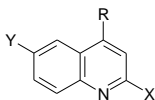
УДК 536.461; 536.25

## ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ВОДНО-АЦЕТОНИТРИЛЬНЫХ РАСТВОРОВ ПРОИЗВОДНЫХ ХИНОЛИНА

Сенокосова А., Финкельштейн Е.Е.

*Самарский национальный исследовательский университет имени академика С.П. Королева, Самара, Россия*

Интерес к изучению межмолекулярных взаимодействий в неводных растворах обусловлен широким применением водно-органических растворов веществ в процессах химической технологии и аналитической химии, в том числе в высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ). Подавляющее большинство исследований в данной области осуществляется с использованием преимущественно физических и физико-химических методов, позволяющих оценить процессы, протекающие в водноорганической среде. Известно, что в водно-ацетонитрильных растворах органических соединений возможно образования гомо- и гетероассоциатов в связи со сравнительно высокими донорно-акцепторными способностями ацетонитрила. При этом, гетеромолекулярные ассоциаты могут образовываться как за счет атомов азота нитрильной группы, так и за счет участия радикала  $-CH_3$  ацетонитрила [1]. В качестве объектов исследования нами выбраны производные хинолина с функциональными группами и заместителями различной химической природы, общая формула которых приведена ниже:



Многие из исследованных веществ являются амфолитами и могут проявлять себя в качестве как кислот, так и оснований за счет присутствия в молекулах гетероатомов и функциональных групп.

Измерение электрической проводимости растворов исследованных соединений проводили на кондуктометре фирмы HANNA, HI 8733. Значения молярной и удельной электрической проводимости рассчитывали по известным формулам [2]. Величина удельной электрической проводимости растворов, как известно, сложным образом зависит от концентрации компонентов раствора и определяется количеством ионов, переносящих электричество, и скоростью их перемещения в растворе.

Из полученных нами данных следует, что зависимость как удельной, так и молярной электрической проводимости растворов исследованных производных хинолина от концентрации ацетонитрила оказывается различной в зависимости от строения молекул аналитов, при этом значения

электропроводности могут увеличиваться или уменьшаться с ростом концентрации органического компонента, что иллюстрирует рисунок 1.

Как известно, ацетонитрил представляет собой типичный апротонный дипольный растворитель с высокой диэлектрической проницаемостью, молекулы которого содержат тройную связь между атомами углерода и азота с неподеленной электронной парой, поэтому он обладает способностью к образованию прочных донорно-акцепторных комплексов со многими органическими соединениями [3].

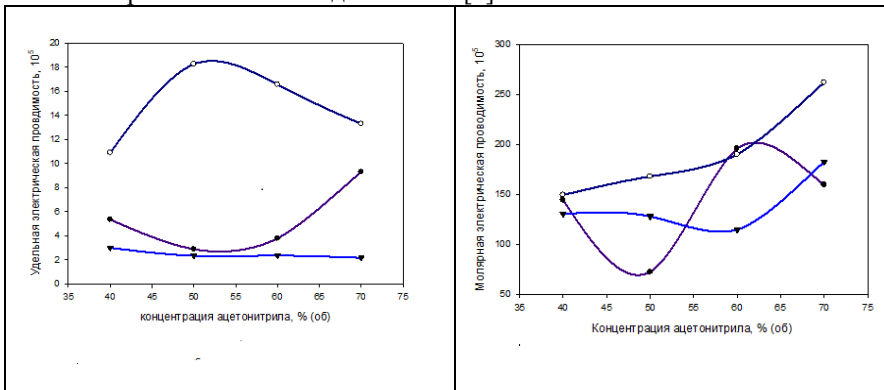


Рис. 1. Зависимость удельной и молярной электрической проводимости некоторых производных хинолина от концентрации ацетонитрила

Наличие нелинейной зависимости между электрической проводимостью растворов производных хинолина и концентрацией ацетонитрила с учетом указанных его свойств свидетельствует о возможном существовании в водноацетонитрильных растворах различных форм аналитов – молекулярной, ионизированной или сольватированной.

#### Литература

1. Структурная самоорганизация в растворах и на границе раздела фаз / Отв. ред. А.Ю. Цивадзе. М.: Изд-во ЛКИ, 2008. 544 с.].
2. Дамаскин Б.Б., Петрий О.А., Цирлина Г.А. Электрохимия. - М.: Химия, 2006. - 670с.
3. Монахова Ю.Б., Муштакова С. П., Колесникова С. С., Грибов Л. А. Журнал аналитической химии. 2011. Т. 66, № 1. С. 56–62.

© Сенокосова А., Финкельштейн Е.Е., 2024



УДК 544.654.2

## ВЛИЯНИЕ ФЛОКУЛЯНТОВ НА ЭЛЕКТРОЛИЗ ЦИНКА В КИСЛОЙ СРЕДЕ

Смородина Л.А., Шайкина Д.А., Агеенко Е.И., Колесников А.В.  
*ФГБОУ ВО Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия*

В технологии цинкового производства используют высокомолекулярные поверхностно-активные вещества – флокулянты для улучшения процессов фильтрации и отстаивания пульпы. Флокулянты (высокомолекулярные ПАВ) часто оказывают отрицательное влияние на последующие электрохимические процессы на стадиях цементационной очистки растворов и электролиза. Поэтому выяснение причин их влияния является важной практической задачей, позволяющей найти оптимальные решения при подборе флокулянтов.

В настоящее время ПАВ используется как добавка, представляющая собой органическое соединение с высокой молекулярной массой. Целью работы является исследование влияния неионогенного Besfloc 4000, анионного Besfloc 4043 и катионного Besfloc 6645 флокулянтов на осаждение цинка при его электролизе в кислом растворе соли цинка.

К 45 мл раствора электролита, состоящий из 0,07 М раствора сульфата цинка и 0,09 М раствора серной кислоты, добавляли флокулянты, концентрацией 0,07 г/л. Влияние параметров на осаждение цинка наблюдали с помощью метода циклической вольтамперометрии (ЦВА), в диапазоне потенциалов от -870 до -1301 В.

Кривые, построенные по координатам  $E - I_{gi}$ , содержали 3 участка. При добавлении неионогенного флокулянта наблюдалось смещение потенциала при нулевом токе в анодную область. При добавлении анионного флокулянта происходило смещение потенциала при нулевом токе в катодную область. При добавлении катионного флокулянта наблюдалось изменение формы кривой, формальный потенциал не изменился.

Исходя из результатов исследований можно сделать вывод об ингибирующем эффекте флокулянтов.

© Смородина Л.А., Шайкина Д.А., Агеенко Е.И., Колесников А.В., 2024

УДК 544.4

## ФЕНОТИАЗИНЫ В КАЧЕСТВЕ ИНГИБИТОРОВ РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОГО ОКИСЛЕНИЯ 1,4-ДИОКСАНА

Султанова А.Д., Шараева К.С., Сафарова И.В., Шайморданова Г.М.  
*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Известно, что оксидативный стресс, включающий процессы свободнорадикального окисления, играет ключевую роль в патогенезе

многих заболеваний [1]. Избыточные процессы окисления, как правило, подавляются антиоксидантами, которые циркулируют в крови и нейтрализуют свободные радикалы. В данном исследовании объектом изучения стало производное фенотиазина с точки зрения его антиокислительной активности.

В результате работы исследована реакционная способность 10Н-фенотиазин-2-ил-метанамина в качестве ингибитора радикально-цепного окисления 1,4-диоксана при температуре 348К и при скорости иницирования  $V_i = 2.4 \cdot 10^{-7}$  М/с (инициатор - азодиизобутиронитрил). Эффективность антиокислительного действия ингибитора оценивали по измерению скорости поглощения кислорода воздуха в присутствии объекта изучения. Эксперименты проводили с помощью универсальной манометрической дифференциальной установки. Введение ингибитора в процесс окисления 1,4-диоксана привело к снижению скорости поглощения кислорода, что подтверждает его антиоксидантные свойства (рис. 1).

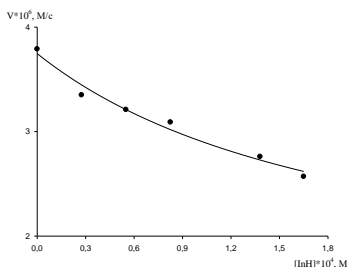


Рис. 1. Зависимость скорости окисления 1,4-диоксана от концентрации введенного ингибитора  $V_i=2.4 \cdot 10^{-7}$  М/с, 348 К.

*Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.*

#### Литература

1. Gerchikov A.Y., Sharipova G.M., Safarova I.V., Safarov E.F., Petrova A.V. Kinetics and mechanism of antioxidant action of triterpenoids in the liquid-phase oxidation reaction of 1,4-dioxane // *React. Kin., Mech. and Catalysis*. 2021. № 134. p. 629 – 64

© Султанова А.Д., Шараева К.С., Сафарова И.В., Шайморданова Г.М., 2024

Объектами исследования были выбраны янус нанотрубки (ЯНТ) хиральности (5,0) и (3,3). ЯНТ были смоделированы совмещением в плоскости, параллельной главной оси нанотрубки, углеродного и бор-нитридного полуцилиндрических фрагментов одинаковой протяженности (рис. 1). Свободные валентности концевых атомов ЯНТ насыщались атомами водорода.

Электронные свойства ЯНТ исследовались методом DFT/B3LYP/6-31G при численном моделировании воздействия постоянного электрического поля (напряженностью  $E = 0 - 2,1 \text{ В/Å}$  с шагом  $0,1 \text{ В/Å}$ ), направленного вдоль цилиндрической оси нанотрубок. Вследствие неравнозначности концевых фрагментов ЯНТ рассматривались оба возможных направления вектора напряженности  $E$  электрического поля.

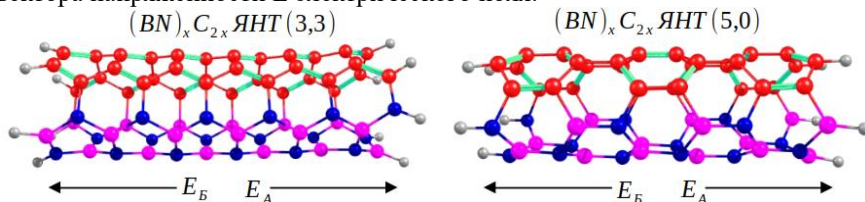


Рис. 1. Структура янус нанотрубок и направления вектора  $E$  приложенного постоянного электрического поля

Анализ эмиссионных свойств ЯНТ, проведенный в рамках теории эмиссионных молекулярных орбиталей [1], показал, что в электрическом поле с направлением Б критическое значение напряженности поля, при котором наступает полевая эмиссия, имеет меньшее значение, чем в случае направления А. В целом, совмещение в одной наноструктуре бор-нитридной и углеродной частей мало влияет (в электрическом поле с направлением Б) или незначительно увеличивает (в электрическом поле с направлением А) напряженность постоянного электрического поля появления полевой эмиссии электронов.

#### Литература

1. Томилин О. Б., Родионова Е. В., Родин Е. А. Механизм полевой эмиссии электронов в одностенных углеродных нанотрубках // Журнал физической химии. 2020. Т. 94, № 8. С. 1242–1247.

© Томилин О.Б., Е.В. Родионова, Е.А. Родин, Е.А. Киселева, 2024

## ПРИМЕНЕНИЕ ЯВЛЕНИЯ ФОТОПЕРЕНОСА ПРОТОНА ДЛЯ СОЗДАНИЯ ОПТИЧЕСКОГО СЕНСОРА КИСЛОТНОСТИ СРЕДЫ

Устинова К.А., Наумова А.О., Мельников П.В.

*МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

Флуоресцентные сенсоры могут применяться для измерения целого ряда аналитов, и их разработка и совершенствование является одной из быстро развивающихся научных областей. Одним из ключевых и востребованных показателей является водородный показатель – рН, – измерение которого в микрообъеме или под давлением с помощью традиционных электрохимических методов затруднено. Создание многоцветных оптических сенсоров неразрывно связано с исследованием физико-химических процессов при иммобилизации.

Существуют системы, которые при фотовозбуждении наряду с изменением донорно-акцепторных свойств изменяют и кислотно-основные [1]. В настоящей работе на примере модельных систем фотокислот, натриевых солей сульфопроизводных 2-нафтола, изучен процесс их иммобилизации на частицах мезопористого силикагеля, предварительно обработанных катионным полиэлектролитом – полидиаллилдиметиламмония хлоридом. Полученные частицы помещали в 10% водный раствор поливинилового спирта, формировали пленку и проводили сшивку за счёт обработки эпихлоргидрином.

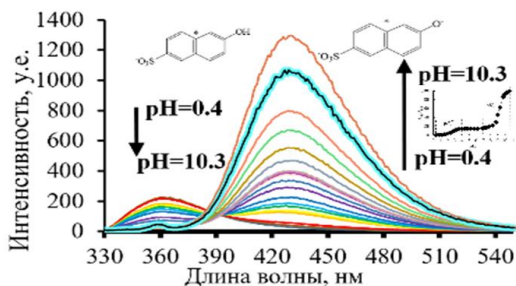


Рис. 1. Спектры флуоресценции моносамещенной 2-нафтолсульфо кислоты в зависимости от рН среды

Пример эволюции спектра флуоресценции 2-нафтол-6-сульфо кислоты в зависимости от рН представлен на рис. 1. Видно, что отношение амплитуд пиков исходной ( $\lambda=356$  нм) и депротонированной ( $\lambda=427$  нм) форм заметно меняется при переходе из сильнокислой в сильнощелочную среду.

На рисунке также представлен график зависимости отношения интенсивностей от рН среды, на нем наблюдаются два S-образных участка,

первый из которых соответствует константе равновесия  $pK_a^* = 0,60$ , а второй –  $pK_a = 8,32$ .

#### Литература

1. Gerasimova M.A., Tomilin F.N., Malyar E.Yu., Varganov S.A. Fluorescence and photoinduced proton transfer in the protolytic forms of fluorescein: Experimental and computational study // *Dyes and Pigments*. 2020. V.173. p. 107851.

© Устинова К.А., Наумова А.О., Мельников П.В., 2024

УДК 544.42

### КИНЕТИКА РЕАКЦИИ ДИЛЬСА-АЛЬДЕРА ТИОФЛУОРЕНОНА С ТРАНС,ТРАНС-1,4-ДИФЕНИЛБУТАДИЕНОМ-1,3

Фазылова З.А., Корнилов Д.А., Мустафин А.Г.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Тиокетоны являются чрезвычайно активными соединениями. Из-за высокой скорости реакций 1,3-диполярного циклоприсоединения тиокетонов с нитронами и диазоалканами данные сераорганические соединения называют «супердиполярофилами». Тиокетоны называют также «супердиенофилами» из-за их высокой реакционной способности в реакциях [4+2]-циклоприсоединения. *Транс,транс*-1,4-дифенилбутадиен-1,3 является одним из первых представителей ряда  $\alpha,\omega$ -дифенилполиенов. Значительный интерес представляют фотохимические и фотофизические свойства  $\alpha,\omega$ -дифенилполиенов. Такой интерес связан с их подобием биологически важным хромофорам, таким как ретинол и каротин.

В данной работе нами изучено влияние растворителя и температуры на скорость реакции Дильса-Альдера тиофлуоренона с *транс,транс*-1,4-дифенилбутадиеном-1,3, определены значения параметров активации. Константы скорости реакции определены в 5 растворителях и варьируются в очень узком интервале  $(0.54-1.2) \cdot 10^{-1}$  л·моль<sup>-1</sup>·с<sup>-1</sup>. Константы скорости реакции в неполярном бензоле и полярном ацетонитриле довольно близки, поэтому можно исключить разделение зарядов в переходном состоянии и считать данную реакцию изополярной. Как правило, скорость реакций циклоприсоединения и енового синтеза в протонодонорных растворителях на 1–2 порядка выше, чем в апротонных. Такое ускорение происходит вследствие активации диенофилов за счет образования водородной связи с протонодонорными растворителями. Поскольку водородная связь S---H значительно слабее водородной связи O---H, то эффект стабилизации переходного состояния в реакциях с участием диенофилов с C=S связью значительно слабее эффекта стабилизации переходного состояния в реакциях с участием диенофилов с C=O связью, поэтому константы скорости данной реакции в протонодонорных и апротонных растворителях

очень близки. Подобные эффекты ранее наблюдались и в других реакциях [1].

*Исследование выполнено в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (код научной темы FZWU-2023-0002) и при поддержке НОЦ РБ (договор № ЦПД-МЛ-4/РФ-23).*

#### Литература

1. Kiselev V.D., Kornilov D.A., Sedov I.A. Solvent influence on the Diels-Alder reaction rates of 9-(hydroxymethyl)anthracene and 9,10-bis(hydroxymethyl)anthracene with two maleimides. – International Journal of Chemical Kinetics. – 2017. – V. 49. – P. 61-68.

© Фазылова З.А., Корнилов Д.А., Мустафин А.Г., 2024

УДК 541.14:547.551.2

### МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ ПРОИЗВОДНЫХ 3,4-ДИГИДРОПИРИМИДИН-2-ТИОНА В АКТИВНЫЙ ЦЕНТР 5-ЛИПОКСИГИНАЗЫ

Хайруллина В.Р., Мартынова Ю.З., Максимов Л.С.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

В данной работе изучали комплементарность 10 производных 3,4-дигидропиримидин-2-она с активным центром 5-липоксигеназы (ЛОГ-5). Ориентацию и энергию связывания ( $E_{\text{bind}}$ ) лигандов в активном центре определяли методом молекулярного докинга в программах AutoDock Vina 1.2.5 и AutoDock 4.2.6. За центр бокса размером 22 Å, принято нативное положение (2E)-3(2-окт-1-ин-1-илфенил) акриловой кислоты. Результаты исследования представлены в таблицах 1 и 2.

Таблица 1

Численные значения свободной энергии связывания  $E_{\text{bind}}$ , оцененные с использованием скоринг-функции AutoDock Vina 1.2.5 / AutoDock 4.2.6 при позиционировании лигандов s1a-s5a в активном центре 5-ЛОГ (3o8y – цепи)

Код соединения	$E_{\text{bind}}$ , ккал/моль	
	R-изомер	S-изомер
s1a	-4,2/-6,36	-4,8/-5,4
s2a	-2,9/-2,64	-2,1/-5,02
s3a	-2,6/-3,08	-2,9/-6,0
s4a	-4,2/-3,42	-4,5/-5,83
s5a	-4,1/-4,47	-3/-5,87

Таблица 2

Численные значения свободной энергии связывания  $E_{\text{bind}}$ , оцененные с использованием скоринг-функции AutoDock Vina 1.2.5 / AutoDock 4.2.6 при позиционировании лигандов s1b-s5b в активном центре 5-ЛОГ (3o8y – цепи А)

Код соединения	$E_{\text{bind}}$ , ккал/моль			
	RR-изомер	RS-изомер	SR-изомер	SS-изомер
s1b	-1,4/-3,37	-2,7/-3,93	-3,9/-3,84	-1,9/-6,22
s2b	-2,9/-3,87	-2,7/-1,55	-3,5/-3,86	-1,9/-5,47
s3b	-3/-3,27	-3,4/-4,02	-1,4/-7,2	-1,2/-5,28
s4b	-0,9/-5,0	-2,6/-2,7	-4/-5,57	-1,4/-4,53
s5b	-3,4/-4,18	-1,9/-3,99	-2,3/-4,48	-0,9/-5,66

Сравнение значений величины  $E_{\text{bind}}$ , рассчитанных с использованием оценочных функций двух программ, свидетельствует о противоречивых выводах о стерической комплементарности лигандов с активным центром 5-ЛОГ. Так, в соответствии с данными AutoDock 4.2.6 только 13 лигандов (s1aR, s1aS, s1bSS, s2aS, s2bSS, s3aS, s3bSR, s3bSS, s4aS, s4bRR, s4bSR, s5aS, s5bSS) могут теоретически рассматриваться как потенциальные ингибиторы 5-ЛОГ, так как численные значения  $E_{\text{bind}} \leq -5$  ккал/моль и сопоставимы в пределах погрешности с аналогичной характеристикой для арахидоновой кислоты ( $E_{\text{bind}} = -6.00$  ккал/моль). В то же время по данным AutoDock Vina ни один лиганд не является потенциальным ингибитором 5-ЛОГ. При этом координаты потенциально биологически активных конформаций, предсказанные с использованием обеих программ, совпадают в пределах допустимой разницы величины RMSD (не более 2 Å).

Оценивая влияние стереоизомерии на ингибиторную активность соединений данной серии, можно заметить, что по данным AutoDock 4.2.6 и AutoDock Vina R-стереоизомеры незначительно уступают по активности S-стереоизомерам. По данным AutoDock 4.2.6 и AutoDock Vina R-стереоизомеры соединений s1a-s5a не комплементарны с активным центром 5-ЛОГ, за исключением соединения s1aR. Однако и для этого соединения подобные выводы можно делать только на основании данных AutoDock 4.2.6.

Надёжный результат может быть получен только в ходе испытаний.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.*

#### Литература

1. Akhmetova V., Leont'ev, D., Akhmadiev, N., Khairullina, V. 2-(Sulfanylmethyl)indol-3-yl Acetic Acid Derivatives: Synthesis and In Silico Prediction of Anti-Inflammatory Activity // Russian Journal of General Chemistry. 2023. – 93 (1). – P. 106-114.
2. Akhmadiev N., Mescheryakova E., Khayrullina V., Khalilov L., Akhmetova V. DOS strategy, crystal structure, and in silico evaluation of the anti-inflammatory activity of hydroxysulfanylazole derivatives // Journal of the Chinese Chemical Society. 2022. – V. 69. – P. 1954–1967.

© Хайруллина В.Р., Мартынова Ю.З., Максимов Л.С., 2024

УДК 541.14:547.551.2

### QSAR-МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНГИБИТОРОВ ВИРУСА ТАБАЧНОЙ МОЗАИКИ

Хамитова Г.М., Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р., Насретдинова Р.Н.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Вирус табачной мозаики (ВТМ) – это одноцепочечный РНК-вирус положительного действия из рода *Tobamovirus*, который поражает широкий спектр растений, принадлежащих к 36 семействам, такие как табак, томат, картофель и огурец (более 400 растений). Однако химической обработки от этого вируса до настоящего времени не существует. ВТМ наносят огромный ущерб сельскому хозяйству и садоводству во всем мире.

Растения выработали множество механизмов избирательного подавления патогенов путем выработки вторичных метаболитов, обладающих антибактериальной активностью. Таким образом, прямой отбор противовирусных соединений из растений может быть использован для выявления новых соединений хитов с мощной противовирусной активностью, но не токсичных для хозяев. В связи с этим цель исследования заключалась в поиске эффективных ингибиторов ВМТ.

Модели строили на основе 45 ингибиторов ВТМ в ряду производных фенола, хромана, квазиноидов, лимонноидов и гликозидных производных. По методике, описанной в работах [1-3], с помощью компьютерной программы GUSAR 2019 проводили построение и валидацию моделей. Метод отбора значимых переменных – ССР (самосогласованная регрессия). Затем каждый набор регрессионных моделей автоматически в данной программе объединялся в консенсус модели.

В ходе расчетов было построено 6 моделей QSAR. Все они продемонстрировали свою пригодность для виртуального скрининга, так как являлись статистически значимыми и устойчивыми. Таким образом, все 6 моделей можно рекомендовать для прогноза численных значений  $rIC_{50}$  при отборе потенциальных ингибиторов ВТМ в онлайн-библиотеках (таблица 1).



Таблица 1

## Характеристики моделей QSAR M1-M6

Выборка	M <sub>i</sub>	N <sub>i</sub>	R <sup>2</sup> <sub>ОВi</sub>	Φ	StD	Q <sup>2</sup> <sub>ОВi</sub>	R <sup>2</sup> <sub>ТВi</sub>	V
МД1	M1	45	0,969	86,501	0,198	0,948	0,9832	10
	M2		0,946	48,273	0,275	0,911	0,9786	9
	M3		0,980	105,710	0,178	0,966	0,9858	10
ОВ1	M4	30	0,960	50,528	0,244	0,924	0,8113	8
	M5		0,945	28,292	0,321	0,901	0,831	7
	M6		0,975	50,035	0,240	0,954	0,8497	7

где N – число структур в i-той выборке ОВ<sub>i</sub>; Q<sup>2</sup> – коэффициент детерминации для 80% N; R<sup>2</sup> – коэффициенты детерминации для 100% N в выборках; Φ – критерий Фишера; StD – стандартное отклонение, V – число значимых переменных.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.*

## Литература

1. Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р., Насретдинова Р.Н. [и др.] Определение констант скорости обрыва цепи радикально-цепного окисления органических соединений на молекулах антиоксидантов методом QSPR // Известия Академии наук. Серия химическая. 2020. – №9. – С. 1679-1691.
2. Хайруллина В.Р., Акбашева Ю.З., Янгирова К.Р. [и др.] QSAR-моделирование некоторых производных урацила с выраженной ингибиторной активностью в отношении дезоксиуридинфосфоорилазы // Вестник Баш-го ун-та. 2018. – Т.23, № 4. – С. 987-993.
3. Khairullina V., Martynova Y., Safarova I. [и др.] QSPR Modeling and Experimental Determination of the Antioxidant Activity of Some Polycyclic Compounds in the Radical-Chain Oxidation Reaction of Organic Substrates // Molecules. 2022. – V. 27. – 6511.

© Хамитова Г.М., Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р., Насретдинова Р.Н., 2024

УДК 544.07

**ВЛИЯНИЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА НА ХАРАКТЕРИСТИКИ  
ОПТИЧЕСКОГО СЕНСОРА МОЛЕКУЛЯРНОГО КИСЛОРОДА**

Ходкина А.С., Наумова А.О., Мельников П.В.

*МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия*

Оптические сенсоры молекулярного кислорода плотно вошли в нашу жизнь и нашли широкое применение в различных областях, таких как медицина, наука, промышленность и экология. Благодаря своей высокой чувствительности и точности в сравнении с традиционным методом Винклера, а также электрохимическим методом с использованием электрода

Кларка, оптические сенсоры молекулярного кислорода позволяют быстро и надежно измерять концентрацию кислорода в различных средах.

Метод основан на тушении фосфоресценции молекулы индикатора молекулярным кислородом, поэтому точность измерений напрямую связана с интенсивностью регистрируемого оптического сигнала. Для его усиления может использоваться явление плазмонного резонанса, возникающее, например, при облучении наночастиц металлов. В данной работе использовали наночастицы серебра, полученные цитратно-сульфатным методом Кери-Ли. Выбор метода обусловлен узким ММР получаемых частиц и легкостью в реализации и масштабировании.

Синтезированные наночастицы инкапсулировали вместе с индикатором – комплексом Pt(II)-октаэтилпорфирина (Pt(II)OEP) – в композитной системе типа «ядро-краситель-оболочка», методика получения которой была разработана ранее [1].

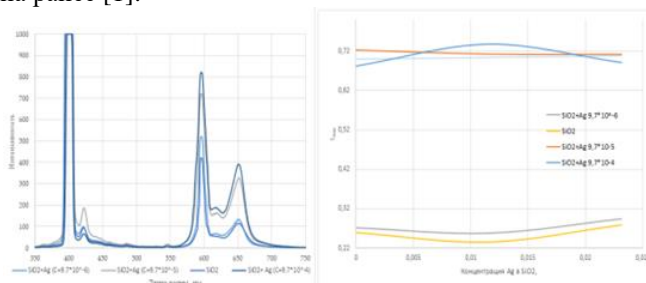


Рис. 1. Влияние содержания наночастиц серебра на интенсивность фосфоресценции Pt(II)OEP

На рис. 1 видно, что добавление наночастиц кратно увеличивает интенсивность аналитического сигнала при той же концентрации индикатора, что позволяет увеличить соотношение сигнал/шум при измерении и улучшить метрологические характеристики сенсорной системы в целом.

#### Литература

1. Pavel V. Melnikov, Anastasia Yu. Alexandrovskaya, Alina O. Naumova. Optical Oxygen Sensing and Clark Electrode: Face-to-Face in a Biosensor Case Study

© Ходкина А.С., Наумова А.О., Мельников П.В., 2024

ОСОБЕННОСТИ СМАЧИВАНИЯ ПОЛИМЕРНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ  
СИСТЕМАМИ НА ОСНОВЕ МОНОДОДЕЦИЛОВОГО ЭФИРА  
ТЕТРАЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ С УГЛЕРОДНЫМИ ТОЧКАМИ

Хуснутдинова Р.И., Галеева А.И., Крупин А.С., Галяметдинов Ю.Г.

*Казанский национальный исследовательский технологический  
университет, Казань, Россия*

В последнее время лиотропные жидкие кристаллы (ЛЖК) привлекают значительный интерес благодаря возможности их применения в тераностике, то есть для визуализации, доставки лекарственных средств и лечения заболеваний [1-3].

Ранее нами были исследованы энергетические аспекты взаимодействия лиотропных металломезогенов, гелей на основе поверхностно-активных веществ (ПАВ), биополимеров с различными подложками [3-5]. Изучение смачивания полимерных поверхностей лиомезофазами и гелеобразными системами значимо для установления механизма взаимодействия изучаемых образцов с контактируемой поверхностью.

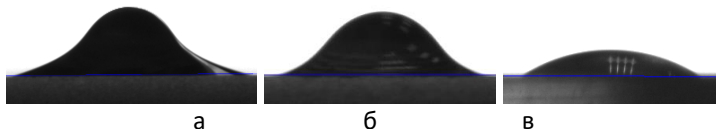


Рис. 1. Фотографии смачивания ЛЖК  $C_{12}EO_4/(H_2O+bCD)/C_{10}H_{21}OH$  (45%/50%/5% масс.) поверхности стекла(а), нейлона (б), ПДМС (в).

В данной работе представлены результаты смачивания модельных поверхностей, с различной свободной поверхностной энергией гибридными лиотропными средами на основе ПАВ - монододециловый эфир тетраэтиленгликоля ( $C_{12}EO_4$ ), допированных синими С-точками (bCD), обладающих наноразмерной структурой. Формирование лиомезофазы происходило в диапазоне концентраций компонентов от 25 до 65 % масс.  $C_{12}EO_4$  и от 30 до 70 % мас. ( $H_2O+bCD$ ), при постоянном содержании деканола в системах равное 5 % масс. Стеклояная поверхность являлась базовой поверхностью для сравнения с ранее изученными ЛЖК. В ходе работы был использован планарный ориентант - нейлон марки N6, который наносили на поверхность чистого стекла методом напыления при вращении. Поскольку в дальнейшем предполагается исследование полученных систем в микрофлюидных устройствах, в которых, качестве материала для их изготовления используется полимер полидиметилсилоксан (ПДМС), была проведена оценка смачиваемости полученных образцов на поверхности ПДМС. Смачивающую способность образцов по отношению к полимерным

образцам и стеклу оценивали стандартным методом путём измерения краевых углов смачивания методом сидящей капли (Рис. 1). Максимальное смачивающее действие наблюдается на поверхности ПДМС для  $C_{12}EO_4/(H_2O+bCD)/C_{10}H_{21}OH$  системы, содержащей в своем составе полярные оксиэтилированные группы, способные к донорно-акцепторному взаимодействию с полярными группами на поверхности полимера.

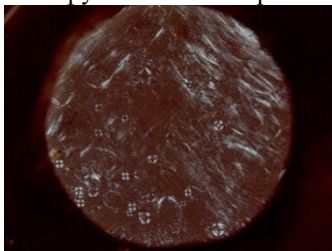


Рис. 2.Текстура ламеллярной мезофазы системы  $C_{12}EO_4/(H_2O+bCD)/C_{10}H_{21}OH$

Для системы  $C_{12}EO_4/(H_2O+bCD)/C_{10}H_{21}OH$  (45%/50%/5% масс.) (Рис. 2) были получены следующие значения краевого угла смачивания на поверхности стекла -  $61,2 \pm 0,4$ , нейлоне -  $60,2 \pm 0,21$  и ПДМС -  $42,7 \pm 0,26$ .

Таким образом, исследовано смачивание ЛЖК с различными гидрофобными поверхностями. Выявлены и обсуждаются основные закономерности смачивания стеклянной и полимерных поверхностей лиомезофазами в зависимости от содержания ПАВ и типа мезофазы.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания на оказание государственных услуг (выполнение работ) от 29.12.2022 г. № 075-01508-23-00. Тема исследования «Создание научных основ получения новых мультифункциональных материалов широкого спектра применения» (FZSG-2023-0008).

#### Литература

1. Zhang Z., Yang X., Zhao Y., Ye F., Shang L. Liquid Crystal Materials for Biomedical Applications // *Advanced Materials*. 2023. P. 2300220.
2. Селиванова Н.М., Галеева А.И., Галяметдинов Ю.Г. Биосовместимые системы доставки на основе κ- каррагинана и неионных сурфактантов // *Жидкие кристаллы и их практическое использование*. 2020. Т. 20. № 2. С. 28-39.
3. Галеева А.И., Селиванова Н. М., Галяметдинов Ю. Г. Смачивающая способность и адгезионные свойства организованных конденсированных фаз на основе биополимера в системах доставки // *Жидкие кристаллы и их практическое использование*. 2023. Т. 23. № 4. С. 38–48.
4. Галеева А.И., Русакова Е.Ю., Ситдикова К.И., Богданова С.А., Галяметдинов Ю.Г. Межфазное взаимодействие в системе лиотропный жидкий

кристалл - полимерный ориентант // Жидкие кристаллы и их практическое использование. 2012. Т. 40. № 2. С. 76-85.

© Хуснутдинова Р.И., Галеева А.И., Крупин А.С., Галяметдинов Ю.Г., 2024

УДК 544.52:620.3

## ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА $ZnIn_2S_4$ В ПРИСУТСТВИИ КИСЛОРОДА

Шамилов Р.Р., Музипов З.М., Галяметдинов Ю.Г.

*Казанский национальный исследовательский технологический  
университет, Казань, Россия*

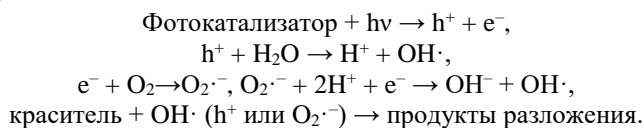
Фотокаталитические материалы, способные под действием солнечного (УФ и видимого) света разлагать различные органические загрязнители, генерировать водород из воды, восстанавливать углекислый газ до органических соединений представляют значительный практический интерес, в том числе в целях улучшения экологической обстановки.

В рамках данного исследования гидротермальным методом были получены наноструктуры состава  $ZnIn_2S_4$  (цинка индия сульфид – ЦИС). Данные материалы имеют высокую удельную поверхность, способны поглощать видимый свет и расщеплять органические соединения в водных растворах.

Фотокаталитические свойства полученного материала изучены на примере разложения красителя – Родамина С, который является модельным загрязнителем. В качестве источника возбуждения использовали светодиоды с пиком излучения 450 нм. Отбор проб проводили через определенные промежутки времени от начала облучения. Оценка количества разложившегося красителя проводили по спектрам поглощения (рис. 1а).

Согласно полученным данным, пик поглощения Родамина С при 554 нм быстро снижается в результате его распада, появляется пик при 500 нм в результате образования более устойчивого продукта разложения Родамина 110 [1]. При дальнейшем облучении также происходит медленный распад данного продукта.

Фотокаталитический эффект основан на взаимодействии катализатора с молекулами воды и растворенного кислорода ( $растO_2$ ) и образовании из них высокоактивных радикалов, которые приводят к разложению органических соединений:



Согласно значениям ширины запрещенной зоны ЦИС, в нашем случае образование  $\text{OH}\cdot$  а с участием дырок ( $h^+$ ) невозможен, следовательно, они образуются из  $\text{растO}_2$  [2]. Поэтому в начальный момент, когда в реакционной смеси достаточное количество  $\text{растO}_2$ , скорость реакции высокая. По мере его расходования скорость разложения красителя быстро падает.

С целью поддержания высокой скорости разложения мы барботировали реакционную смесь воздухом. Это привело к существенному возрастанию скорости разложения Родамина С и его продукта деэтилирования Родамина 110 (рис. 1б).

Кинетические кривые разложения Родамина С были построены на основе максимума поглощения при 554 нм (рис. 1в). Видно, что в отсутствие катализатора краситель достаточно устойчив. Добавление небольшого количества фотокатализатора приводит значительному возрастанию скорости разложения, а при барботировании воздухом деградация Родамина С еще больше ускоряется.

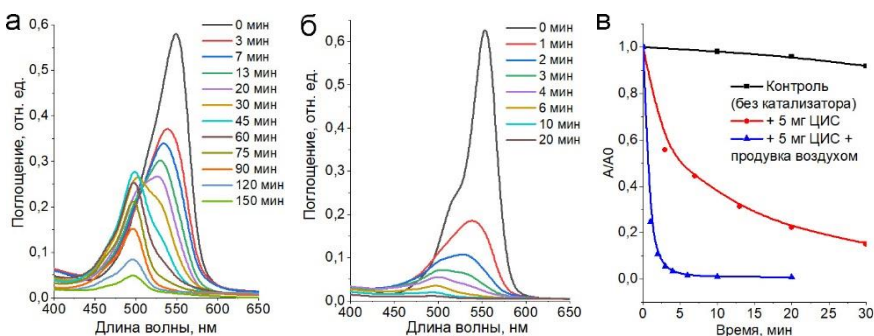


Рис. 1. а – спектры поглощения проб от времени облучения для ЦИС образца; б – спектры поглощения проб для ЦИС образца при барботировании воздухом; в – кинетические кривые разложения Родамина С.

Реакция фоторазложения Родамина С соответствует первому порядку. Рассчитанные значения константы скорости реакции показали, что скорость реакции разложения красителя в присутствии  $\text{ZnIn}_2\text{S}_4$  возрастает в 13 раз, а при дополнительном пропускании воздуха 174 раза относительно контроля.

*Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания на оказание государственных услуг (выполнение работ) от 29.12.2022 г. № 075-01508-23-00. Тема исследования «Создание научных основ получения новых мультифункциональных материалов широкого спектра применения».*

## Литература

1. Сагдеев Д.О., Шамилов Р.Р., Галяметдинов Ю.Г. ЖПС. 88, 3, 419-425 (2021).
2. Shamilov R.R., Muzipov Z.M., Sagdeev D.O. et al. С. 9, 3. 85 (2023).

© Шамилов Р.Р., Музипов З.М., Галяметдинов Ю.Г., 2024

УДК 544.4

### КИНЕТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОГО ОКИСЛЕНИЯ 1,4-ДИОКСАНА В ПРИСУТСТВИИ 3-ГИДРОКСИТЕТРАГИДРОФУРАНА

Шараева К.С., Сафарова И.В., Охиров Ш.М., Латыпова Э.Р.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

В настоящее время изучение производных фурана стало актуальной темой в области медицинской химии. Включение фуранового ядра является важной синтетической стратегией в ходе синтеза новых соединений, обладающих высокой фармакологической активностью. Весьма перспективными соединениями данного ряда выступают производные 3-гидрокситетрагидрофурана, проявляющие эффективную антиоксидантную и антибактериальную активность [1]. Целью данной работы является изучение кинетических закономерностей антиокислительной эффективности 3-гидрокситетрагидрофурана (3-ГТГФ) на примере модельной реакции окисления 1,4-диоксана.

Кинетический эксперимент проводили с помощью высокочувствительной манометрической дифференциальной установки (УМД). Исследуемое вещество вводили в окисляющийся при 348 К 1,4-диоксан. Установлено, что 3-ГТГФ оказывает выраженное ингибирующее действие на процесс инициированного окисления 1,4-диоксана, о чем свидетельствует уменьшение скорости поглощения кислорода в присутствии добавок 3-ГТГФ. Типичные кинетические кривые поглощения кислорода при окислении 1,4-диоксана в отсутствие и в присутствии 3-ГТГФ приведены на рис. 1.

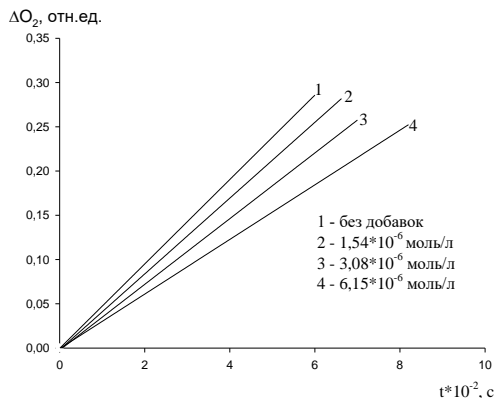


Рис.1. Типичные кинетические кривые поглощения кислорода при окислении 1,4-диоксана в отсутствие и в присутствии 3-ГТГФ.  $T = 348 \text{ K}$ ,  $V_i = 2.4 \cdot 10^{-7} \text{ M/ с}$ .

#### Литература

1. Banerjee R., Kumar H. K. S., Banerjee M. Medicinal significance of furan derivatives: a review //International Journal of Research in Phytochemistry and Pharmacology – 2015. – Т. 5. – №. 3. – С. 48-57.

© Шараева К.С., Сафарова И.В., Охиров Ш.М., Латыпова Э.Р., 2024

УДК 541.14:547.551.2

### QSAR-МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНГИБИТОРОВ 5-ЛИПОКСИГЕНАЗЫ В РЯДУ ПРОИЗВОДНЫХ N-ГИДРОКСИМОЧЕВИНЫ

Шарипова Р.Р., Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Лейкотриены – это биологически активная группа жирных кислот и основные компоненты метаболизма арахидоновой кислоты, которые образуются благодаря каталитической активности 5-липоксигеназы (5-LOX). Накапливаются данные, подтверждающие непосредственное участие 5-LOX в прогрессировании различных видов злокачественных новообразований, включая рак предстательной железы, органов дыхания и образование опухолей в толстой кишке.

Фармакологические препараты, которые специфически ингибируют LOX-опосредованные сигнальные пути, в последние несколько лет применяются для лечения воспалительных заболеваний, таких как астма и артрит. Таким образом, изучение этих хорошо зарекомендовавших себя препаратов оправдано для их использования в качестве возможных



кандидатов для химиотерапевтических исследований против смертельного заболевания - рака.

Таким образом, поиск эффективных ингибиторов 5-LOX является наиважнейшей практической задачей. Целью настоящей работы является поиск структур хитов вреду биологически активных органических соединений с выраженной противовоспалительной, антиокислительной и противоопухолевой активностью.

Симуляция представляла собой количественное моделирование параметра  $pIC_{50}$ . Для расчетов использовали программу GUSAR2019. С использованием данной программы строили QSAR-модели на основе 70 ингибиторов 5-LOX, которые находились по активности в диапазоне 50 нМ – 4100 нМ. Для построения и проверки консенсус-моделей использовалась методика, описанная в работах [1-3], при этом в процессе применялась программа GUSAR 2019. Метод отбора переменных – SCR (самосогласованная регрессия).

В ходе симуляций были разработаны шесть консенсус моделей QSAR M1-M6. Важно отметить, что проверка их статистической значимости и устойчивости показала хорошие результаты. Модели M1-M6 планируется применять для предварительной оценки численных значений  $pIC_{50}$  для ингибиторов фермента 5-LOX (таблица 1).

Таблица 1

Характеристики моделей QSAR M1-M6

OB <sub>i</sub>	Дескриптор	N <sub>i</sub>	R <sup>2</sup> <sub>OB<sub>i</sub></sub>	Φ	StD	Q <sup>2</sup> <sub>OB<sub>i</sub></sub>	V	R <sup>2</sup> <sub>ТВ<sub>i</sub></sub>
OB1	QNA	47	0,851	32,913	0,204	0,802	6	0,6648
	MNA		0,886	33,992	0,180	0,841	8	0,7126
	QNA+MNA		0,899	31,456	0,175	0,855	8	0,6702
OB2	QNA	53	0,847	35,908	0,207	0,808	6	0,5997
	MNA		0,848	33,386	0,207	0,804	7	0,5877
	QNA+MNA		0,873	30,836	0,193	0,828	8	0,5519

где N – число соединений в каждой из выборок OB<sub>i</sub>; Q<sup>2</sup> – коэффициент детерминации при скользящем контроле для выборок с 80% N; R<sup>2</sup> – коэффициенты детерминации для выборок со 100% N; Φ – критерий Фишера; StD – стандартное отклонение, V – число значимых переменных.

*Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.*

#### Литература

1. Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р., Насретдинова Р.Н. [и др.] Определение констант скорости обрыва цепи радикально-цепного окисления органических

соединений на молекулах антиоксидантов методом QSPR // Известия Академии наук. Серия химическая. 2020. – №9. – С. 1679-1691.

2. Хайруллина В.Р., Акбашева Ю.З., Янгирова К.Р. [и др.] QSAR-моделирование некоторых производных урацила с выраженной ингибиторной активностью в отношении дезоксиуридинфосфорилазы // Вестник Баш-го ун-та. 2018. – Т.23, № 4. – С. 987-993.

3. Khairullina V., Martynova Y., Safarova I. [и др.] QSPR Modeling and Experimental Determination of the Antioxidant Activity of Some Polycyclic Compounds in the Radical-Chain Oxidation Reaction of Organic Substrates // Molecules. 2022. – V. 27. – 6511.

© Шарипова Р.Р., Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р., 2024

УДК 547.855.3

## ИЗУЧЕНИЕ СЕЛЕКТИВНОСТИ ЗАМЕЩЕНИЯ 2,4-ДИХЛОРПИРИМИДИНА В РЕАКЦИЯХ КРОСС-СОЧЕТАНИЯ

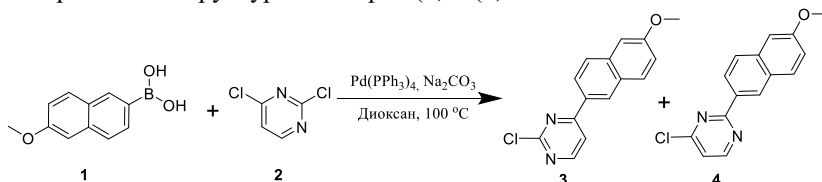
Швецов А.Б., Семёнов А.В.

*Мордовский государственный университет, Саранск, Россия*

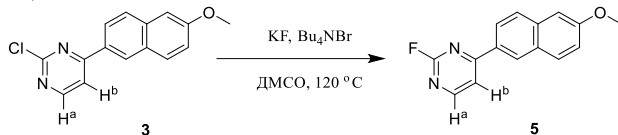
Производные пиримидина нашли широкое терапевтическое применение, являясь структурной основой для разработки противоопухолевых, противомикробных, противовоспалительных, противодиабетических, противовирусных антигельминтные, иммуномодулирующих, анальгезирующих, гипотензивных и другие средств [1].

Одним из способов, создания остова таких производных, являются реакции кросс-сочетания с участием полигалогенпиримидинов. При этом часто возникает вопрос селективности сочетания по определённому атому углерода. Так, известно, что фторзамещённые пиримидины не активны в таких реакциях, а для полийод- и полибромпроизводных характерна низкая селективность замещения [2]. Для полихлорпиримидинов установлено последовательное замещение по 4, 6, 2 и 5 углеродным атомам [3, 4].

В нашей работе в качестве субстрата был использован 2,4-дихлорпиримидин, образующий в реакциях кросс-сочетания по Сузуки с метоксипроизводным нафтилбороновой кислоты (**1**) два продукта в соотношении 99:1, которым на основании идентичности пиков молекулярных ионов и сходства осколочных фрагментов в масс-спектрах были приписаны структуры изомеров (**3**) и (**4**).



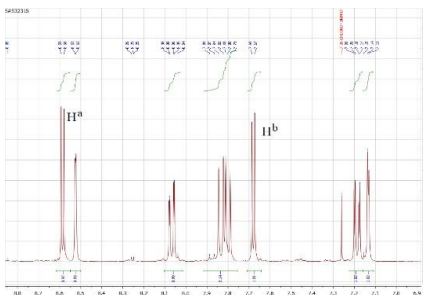
Для однозначного установления структуры основного продукта (**3**) был использован метод химической корреляции, а именно получено фтор-производное (**5**).



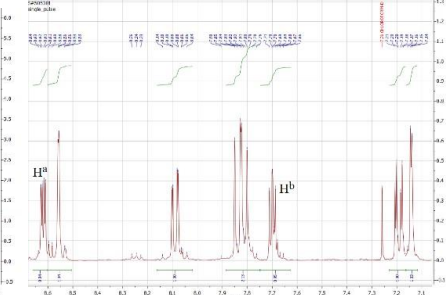
При сравнении спектров ЯМР фторированного продукта (**5**) и его предшественника наблюдали расщепление сигналов для протонов  $H^a$  и  $H^b$  с константами, характерными для изомера, соответствующего структуре (**3**).

Спектр ЯМР  $^1H$  соединения **3** (400 МГц,  $CDCl_3$ ),  $\delta$ , м. д.: 3,93 с (3H,  $CH_3$ ), 7,13 д (1H,  $N_{аром}$ ,  $J$  2,5 Гц), 7,18 д (1H,  $N_{аром}$ ,  $J$  2,5 Гц), 7,20 д (1H,  $N_{аром}$ ,  $J$  2,5 Гц), 7,68 д (1H,  $H^b_{аром}$ ,  $J$  5,3 Гц), 7,82 дд (2H,  $N_{аром}$ ,  $J$  13,3, 8,8 Гц), 8,07 дд (1H,  $N_{аром}$ ,  $J$  8,8, 1,9 Гц), 8,52 д (1H,  $N_{аром}$ ,  $J$  1,9 Гц), 8,59 д (1H,  $H^a_{аром}$ ,  $J$  5,3 Гц).

Спектр ЯМР  $^1H$  соединения **5** (400 МГц,  $CDCl_3$ ),  $\delta$ , м. д.: 3,94 с (3H,  $CH_3$ ), 7,14 д (1H,  $N_{аром}$ ,  $J$  2,5 Гц), 7,19 дд (1H,  $N_{аром}$ ,  $J$  8,9, 2,5 Гц), 7,70 дд (1H,  $H^b_{аром}$ ,  $J$  5,3, 4,1 Гц), 7,83 дд (2H,  $N_{аром}$ ,  $J$  10,7, 8,8 Гц), 8,09 дд (1H,  $N_{аром}$ ,  $J$  8,6, 1,9 Гц), 8,56 д (1H,  $N_{аром}$ ,  $J$  1,9 Гц), 8,62 дд (1H,  $H^a_{аром}$ ,  $J$  5,2, 2,2 Гц).



Спектр ЯМР  $^1H$  соединения **3**



Спектр ЯМР  $^1H$  соединения **5**

Таким образом было показано, что замещение 2,4-дихлорпиримидина в реализованных условиях кросс-сочетания по Сузуки с высокой селективностью происходит по положению 4.

#### Литература

1. Kumar S., Narasimhan B. Therapeutic potential of heterocyclic pyrimidine scaffolds // Chem. Central J. 2018. V. 12. P. 38. doi 10.1186/s13065-018-0406-5
2. Schomaker, J. M. Arylation of halogenated pyrimidines via a Suzuki coupling reaction / J. M. Schomaker, T. J. Delia // J. Org. Chem. 2001. V. 66. P. 7125-7128. doi: 10.1021/jo010573+

3. Delia, T.J., Schomaker J.M., Kalinda A.S. The Synthesis of Substituted Phenylpyrimidines via Suzuki Coupling Reactions // J. Heteroc. Chem. 2006. V. 43. P. 127-131. doi: 10.1002/jhet.5570430119
4. Hussain M., Hung N.T., Khera R.A., Malik I., Zinad D.S., Langer P. Synthesis of Aryl-Substituted Pyrimidines by Site-Selective Suzuki–Miyura Cross-Coupling Reactions of 2,4,5,6-tetrachloropyrimidine // Adv. Synth. Catal. 2010. V. 352. P. 1429-1433. doi: 10.1002/adsc.201000020

© Швецов А.Б., Семёнов А.В., 2024

УДК 541.14:547.551.2

## ВЛИЯНИЕ ПРИСУТСТВИЯ СОКА ПЛОДОВ ОБЛЕПИХИ НА СКОРОСТЬ РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ ЭТИЛБЕНЗОЛА

Юрьева А.О., Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Плоды облепихи содержат группу витаминов В, Р, РР, К, в них высокое содержание витамина С, Е, 15 различных микроэлементов, 18 из 22 незаменимых аминокислот. Суточная доза полезных веществ для человека содержится всего в 0,1 кг сока или свежих ягод облепихи. Натуральное облепиховое масло широко используется как противовоспалительное, а также ранозаживляющее средство.

Антиокислительные свойства являются одним из важных компонентов биологической активности веществ. В приведенной работе исследовались плоды ряда сортов облепихи на предмет антиокислительных свойств ее сока, которые предоставили опытные плантации Самаркандского государственного университета им.Ш.Рашидова в Узбекистане. В качестве модельной реакции было взято инициированное окисление этилбензола, исследовалось влияние на нее сока 6 сортов облепихи. Инициатором реакции использовался азодиизобутилонитрил. Скорость была измерена на манометрической дифференциальной сверхчувствительной установке, в которой используется два реактора. В одном из них протекает модельная реакция, в другом компенсируются физические процессы. Манометрический датчик выводит полученные данные в формате кинетической кривой поглощения кислорода.

В специальных опытах установили, что процесс окисления этилбензола в присутствии сока облепихи протекает в кинетическом режиме и с сохранением цепей окисления. Пероксильные радикалы субстрата этилбензола ведут реакции и продолжения, и обрыва цепей окисления.

Кинетические кривые поглощения кислорода дают возможность вычислить скорость поглощения его при окислении субстрата в отсутствие и в присутствии с сока исследуемых сортов облепихи. Наличие сока облепихи в реакционной смеси закономерно уменьшают скорость поглощения кислорода. Причем этот эффект зависит как от количества сока

в системе, так и от сорта ягоды. Для объемной доли сока облепихи, равной в 0,125, скорость реакции снижается от 1,4 до 2-х раз; для объемной доли сока равной в 0,25, скорость реакции снижается от двух до 3,8 раза в зависимости от сорта облепихи.

Можно сделать выводы, что сок облепихи может использоваться для добавления как в продукты питания, так и в косметические изделия для увеличения срока их годности.

© Юрьева А.О., Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н., 2024

УДК 544.576 + 535.379

## СОНОХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ РАСТВОРОВ АРОМАТИЧЕСКИХ ЛЮМИНОФОРОВ В ПРИСУТСТВИИ БИС-(2,4-ДИНИТРОФЕНИЛ) ОКСАЛАТА

Якшембетова Л.Р., Абдрахманов А.М., Гареев Б.М., Шарипов Г.Л.

*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

Обнаружена сонохемилюминесценция (СХЛ) при ультразвуковом облучении на растворов полиароматических люминофоров (активаторов) и бис-(2,4-динитрофенил) оксалата в толуоле. Квантовые выходы СХЛ зависят от используемых активаторов и равны  $(0,5, 4,3, 1,0, 1,5) \cdot 10^{-7}$  Эйнштейн/моль для антрацена, тетрацена, 9,10-дифенилантрацена и рубрена соответственно. Ранее хемилюминесценция в системе бис-(2,4-динитрофенил) оксалат – люминофор была известна только при участии пероксида водорода (реакция Чандросса [1]).

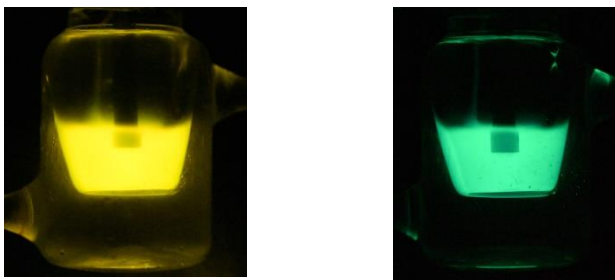


Рис. 1. Фотографии свечения, возникающего при сонолизе растворов бис-(2,4-динитрофенил) оксалата ( $10^{-4}$  М) и активаторов ( $10^{-5}$  М) рубрена (слева) или тетрацена (справа) в толуоле.  $P_{\text{уз}} = 20$  Вт,  $f = 20$  кГц,  $t = 10^\circ\text{C}$ .

Механизм обнаруженной СХЛ заключается в первичном образовании пероксидных продуктов сонолиза толуола, инициирующих, аналогично перекиси водорода в классической реакции Чандросса [1], возникновение из молекулы оксалата ключевого интермедиата – диоксетандиона, каталитически распадающегося в присутствии активатора, с образованием

эмиттера СХЛ – электронновозбужденной молекулы активатора. Данная СХЛ может быть использована в аналитических целях, предел обнаружения активатора 9,10-дифенилантрацена в толуоле составил  $5 \cdot 10^{-8}$  М.

*Работа выполнена в рамках государственного задания Института нефтехимии и катализа УФИЦ РАН (тема № FMRS-2022-0077).*

#### Литература

1. Chandross E.A. A new chemiluminescent system // Tetrahedron Lett. 1963. No. 12. Pp. 761-765.

© Якшембетова Л.Р., Абдрахманов А.М., Гареев Б.М., Шарипов Г.Л., 2024

**СЕКЦИЯ**  
**«ХИМИЯ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ**  
**СОЕДИНЕНИЙ»**

УДК 665.622.43

## КОМПОЗИЦИОННЫЙ ДЕЭМУЛЬГАТОР ДЛЯ ПОДГОТОВКИ ТЯЖЕЛОЙ ВЫСОКОВЯЗКОЙ НЕФТИ

Амангельда А.А., Турышева А.И., Ширяева Р.Н.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа,  
Россия*

В процессе добычи нефти и ее совместного движения с пластовой водой образуются устойчивые нефтяные эмульсии с высоким содержанием в них воды. Проблема разрушения водонефтяной эмульсии особо остро стоит при подготовке нефтей с высоким содержанием природных эмульгаторов (смола, асфальтенов и парафинов). Одним из путей разрешения этой проблемы является создание высокоэффективных деэмульгаторов. В последнее время одним из распространенных способов увеличения эффективности реагентов – деэмульгаторов является использование НПВАВ на основе простых полиэфиров на оксиде пропилена и оксиде этилена различного строения и молекулярной массы [1-3].

Целью настоящей работы являлось получение деэмульгатора на основе неионогенного ПАВ отечественного производства для разрушения сложных водонефтяных эмульсий тяжелых высоковязких нефтей.

В качестве неионогенного ПАВ в композиции использовался блоксополимер оксида этилена и пропилена (Лапрол 6003-2Б-18). Модифицирование деэмульгатора проводилось путем введения функциональных групп. Изучение структурных фрагментов исходного лапрола, композиционного деэмульгатора и диссольвана-4411 проводилось методом ИК-спектроскопии в области от 4000-650 см<sup>-1</sup>.

Деэмульгирующую способность композиционного деэмульгатора оценивали на искусственной нефтяной эмульсии, содержащей 40% минерализованной воды.

Количество остаточной воды в смеси водонефтяной эмульсии определялось по методу Дина-Старка (ГОСТ 2477-65).

Установлено, в композиционном деэмульгаторе в отличие от исходного лапрола содержится меньше алкильных групп (1456 и 1373 см<sup>-1</sup>), валентных колебаний связей С-О-С (1020, 1396 см<sup>-1</sup>). По основным функциональным группам спектр композиционного деэмульгатора идентичен спектру диссольвана. Минимальное остаточное содержание воды для модифицированного деэмульгатора и диссольвана достигается при концентрации 400 г/т (Т=70<sup>0</sup>С). Большой расход деэмульгаторов объясняется высокой устойчивостью нефтяной эмульсии.

По результатам проведенных лабораторных испытаний установлено, что разработанный композиционный деэмульгатор за счет проявления



синергизма компонентов, входящих в состав композиции, обеспечивает высокую степень разрушения эмульсии и не уступает зарубежному аналогу.

#### Литература

1. Матиев К.И., Ага-заде А.А., Эльсафарова М.Э., Акберова А.Ф. Подбор эффективного деэмульгатора для разрушения водонефтяной эмульсии по определению совместимости с базовым деэмульгатором. // SOCAR Proceedings. 2018. №1. 075-082.
2. Сладовская О.Ю., Отожонов С.И., Галина Л.А., Сладовский А.Г. Современные реагенты-деэмульгаторы для разрушения водонефтяных эмульсий // Вестник технологического университета. 2018. Т.21. №2. С.49-53.
3. Махиянов Д., Сафин Д.Х. Строение и молекулярные характеристики полиэфирных блок-сополимеров на основе оксидов пропилена и этилена по данным спектроскопии ЯМР // Высокомолекулярные соединения. Серия Б. Том 48 №2. С.359-369.

© Амангельда А.А., Турышева А.И., Ширяева Р.Н., 2024

УДК 661.728.892:537.635

### МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ В ГИДРОКСИПРОПИЛМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЕ С ПОМОЩЬЮ ЯМР $^1\text{H}$ СПЕКТРОСКОПИИ

Асфандеев А.Ю., Калязин В.А., Яшина Е.Е., Кострюков С.Г.

*Национальный исследовательский Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарёва, Саранск, Россия*

Эфиры целлюлозы являются одними из наиболее распространенных химических добавок, используемых в различных отраслях промышленности [1]. Наиболее широко используемым представителем данной группы химических веществ являются гидроксипропилметилцеллюлоза (ГПМЦ).

Этерификация целлюлозы может приводить к получению эфиров с различными параметрами замещения и соответственно с различным содержанием заместителей. Учитывая, что содержание заместителей является определяющим параметром, характеризующим эффективность использования эфиров целлюлозы, разработка простых количественных методик определения заместителей является одной из приоритетных задач в химии эфиров целлюлозы. Наиболее часто для этих целей используется метод Цейзеля, согласно которому образец эфира целлюлозы расщепляют с помощью йодоводородной кислоты и анализируют образовавшиеся алкилиодиды методом газожидкостной хроматографии (ГЖХ) [2] или высокоэффективной жидкостной хроматографии (ВЭЖХ) [3].

Для определения содержания заместителей в эфирах целлюлозы использовали ЯМР  $^1\text{H}$  спектроскопию гидролизатов, полученных в условиях кислотного гидролиза. Для гидролиза использовали водный раствор

CF<sub>3</sub>SO<sub>3</sub>H, которая, как известно, является самой сильной протонной кислотой, поэтому её можно применять в значительно меньших количествах, чем серную кислоту.

Гидролиз эфиров целлюлозы проводили по следующей методике: 100 мг эфира целлюлозы растворяли в 1 мл 4 %-ного раствора CF<sub>3</sub>SO<sub>3</sub>H в D<sub>2</sub>O и нагревали в микроволновом реакторе Monowave 300 (Anton Paar) при 110 °C в течение 90 мин. После окончания реакции реакцию смесь центрифугировали и полученный раствор анализировали с помощью <sup>1</sup>H ЯМР спектроскопии. Степень замещения метокси-группами (m) и молярное замещение гидроксипропоксильными группами (k) можно вычислить из спектра ЯМР <sup>1</sup>H как отношения интегральных интенсивностей сигналов заместителя, отнесенного к одному протону к интегральной интенсивности сигналов C<sup>1</sup>-H по следующим формулам:

$$m = \frac{I_{MeO}/3}{I_{C1-H}} \text{ и } k = \frac{I_{Me}/3}{I_{C1-H}}$$

Для расчета содержания метоксильных (OCH<sub>3</sub>) и гидроксипропоксильных (OCH<sub>2</sub>CH(OH)CH<sub>3</sub>) групп нужно знать молекулярную массу элементарного звена полученной ГПМЦ. Формула элементарного звена ГПМЦ с учетом наличия заместителей – C<sub>6</sub>H<sub>7</sub>O<sub>2</sub>(OCH<sub>3</sub>)<sub>m</sub>(OCH<sub>2</sub>CH(OH)CH<sub>3</sub>)<sub>k</sub>(OH)<sub>3-m-k</sub>. Соответственно молекулярная масса элементарного звена ГПМЦ – M<sub>0</sub> = 162 - 17m + 31m - 17k + 75k = 162 + 14m + 58k.

Содержание метоксильных (OCH<sub>3</sub>) и гидроксипропоксильных (OCH<sub>2</sub>CH(OH)CH<sub>3</sub>) групп рассчитываем по следующим формулам:

$$X_{OCH_3} = \frac{31m \times 100\%}{M_0} \text{ и } X_{OCH_2CH(OH)CH_3} = \frac{75k \times 100\%}{M_0}$$

Полученные по нашей методике значения содержания метоксильных и гидроксипропоксильных групп соответствуют заявленным производителем.

#### Литература

1. Кряжев В.Н., Широков В.А. Состояние производства эфиров целлюлозы // Химия растительного сырья. 2005. № 3. С. 7–12.
2. Cobler J.G., Samsel E.P., Beaver G.H. Determination of alkyl cellulose ethers by gas chromatography // Talanta. 1962. Vol. 9. № 6. Pp. 473–481. Doi: 10.1016/0039-9140(62)80115-5.
3. Sachse K., Metzner K., Welsch T. Substitution in cellulose ethers part II. Determination of the distribution of alkoxy substituents on the glucose units using high-performance liquid chromatography // The Analyst. 1983. Vol. 108, Iss. 1286. Pp. 597–602. Doi: 10.1039/AN9830800597.

© Асфандеев А.Ю., Калязин В.А., Яшина Е.Е., Кострюков С.Г., 2024

ХИТОЗАН КАК ОСНОВА ДЛЯ СОЗДАНИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ  
ФОРМ

Бадыркеева Л.Д.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

В современном мире, где научно-технический прогресс стремительно развивается и приводит к постоянному появлению новых технологий и открытий, исследователи фармацевтической промышленности вынуждены постоянно уделять особое внимание разработке и использованию новых лекарственных веществ. Процесс создания новых лекарств является довольно трудоемким и дорогим. Более оптимальным вариантом является модификация уже имеющихся лекарств путем включения их в полимерную матрицу. Одним из полимеров, соответствующих ряду требований, предъявляемых к лекарственным формам, стал хитозан (ХТЗ).

Хитозан является продуктом деацетилирования хитина, состоящий из  $\beta$ -1,4-связанных остатков глюкозамина и небольшого количества N-ацетилглюкозаминовых (хитиновых) звеньев. Благодаря положительному заряду на первичной аминогруппе хитозана в слабокислых водных растворах он проявляет множество ценных качеств, таких как: биосовместимость, биodeградируемость, а также способность образовывать комплексы с другими биополимерами [1]. В медицине хитозан распространён благодаря лечебно-профилактическим свойствам, обусловленным его нетоксичностью, иммуномодулирующей активности, ранозаживляющим эффектом и антисептическим действием, которые позволяют считать хитозан перспективным активным ингредиентом для разработки лекарственных форм. Этот полисахарид способен образовывать гели, плёнки, волокна, частицы различных форм, в том числе и сферической.

Гели образованы гибридной полимерной сетью, реакция сшивания происходит между структурными звеньями хитозановой полимерной цепи посредством сшивающих агентами. Хитозановые гели из-за устойчивости к условиям окружающей среды, высокой адсорбционной способности, противогрибковым свойствам и превосходной проницаемости кислорода применяют как для создания раневых повязок, так и в качестве системы с лекарственными средствами для доставки препаратов.

## Литература

1. Ахметханов Р.М., Чернова В.В., Шуршина А.С., Лаздина М.Ю., Кулиш Е.И. Исследование структурообразования в растворах смесей полимеров хитозан-поливиниловый спирт // Конденсационные среды и межфазные границы. 2021. Т. 23. № 2. С. 188-195.

© Бадыркеева Л.Д., 2024

## ПЕРЕРАБОТКА ПОЛИМЕРОВ

Бакиров И.Р., Судакова О.М.

*ФГБОУ ВО Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Полиэтилен, как тип полимера, обладает различными свойствами, и широко используется благодаря своей прочности, гибкости и химической инертности. Он представляет собой полимеризационный продукт этилена и обладает различными свойствами, в зависимости от его молекулярной структуры.

Полиэтилен – один из самых дешевых полимеров, занимающий в мировом производстве одно из лидирующих мест, поэтому остро стоит вопрос по его переработке. Из-за его распространенного использования в упаковке, возникает большое количество отходов, которые часто либо сжигаются, либо закапываются, что вредит окружающей среде [1].

Из-за долгого времени распада при складировании и закапывании, а также загрязнения воздуха вредными веществами при сжигании важно разработать эффективные и экономически целесообразные методы вторичной переработки, такие как, например, переработка в гранулы, чтобы сократить негативное воздействие на окружающую среду. Вторичная переработка позволяет получать гранулы, хлопья, грануляты необходимого качества, из которых в последствии получают новые продукты. Процесс производства гранул из отходов полиэтилена - это важный шаг в устойчивой и экологически ответственной переработке материалов. Этот процесс включает в себя несколько этапов (сортировка, измельчение, промывка, сушка, агломерация и гранулирование), каждый из которых играет ключевую роль в создании качественных и конкурентоспособных продуктов [2].

Полиэтилен – это длинная углеводородная цепь, которую необходимо разбить на более короткие части, чтобы можно было использовать их для получения других веществ. Полимеры в ходе химических реакций за счет изменения химической структуры превращаются в мономеры. Мономеры можно использовать для новых реакций полимеризации исходного или родственного полимера. Этот метод превращает пластиковые отходы (полимеры) в мелкие молекулы, которые используются в качестве сырья для получения других продуктов [3].

Помимо гранулирования востребованным способом переработки является пиролиз полимерных отходов с получением жидких углеводородов, которые в дальнейшем используются как топливо или добавки к топливу.

Полимерные отходы можно переработать в ходе термokatалитического разложения в присутствии различных катализаторов: редкоземельных

металлов, соединений на их основе или гидрида титана [4], медь или алюмосодержащих минералов [5], органических соединений – 2 этилгексаноата никеля, растворенного в бензоле [6,7].

В дальнейшем необходимо уменьшать объемы захороненных полимерных отходов и увеличивать количество отходов, направляемых на переработку с получением новых продуктов.

#### Литература

1. Абрамов В.В., Чалая Н.М. Вторичная переработка полимерных отходов: анализ существующих методов. – 2012. – № 1. – С. 21-24
2. Вторичная переработка полиэтилена // URL: <https://regiontsentr-ekologiya.inni.info>
3. Белокурова А.П. Химия и технология получения полиолефинов: Учебное пособие / А. П. Белокурова, Т. А. Агеева. – Иваново: ИГХТУ, 2011. – 126 с
4. Пат. 2110535 С1 Российская Федерация Способ переработки органических промышленных и бытовых полимерных отходов / В.В. Платонов; Патентообладатели: Общество с ограниченной ответственностью «ЭКОДЕСТ». - № 97117269/04; заявл. 29.10.1997; опубл. 10.05.1998;
5. Пат. 6043289 USA Catalyzed degradation of thermoplastic polyolefins and incorporation of the degradation products into heavy hydrocarbons / Jacques Nicaud, Guy Lemoine, Jacques Jarrin; № US09/063829; заявл.22.04.1998; опубл. 28.03.2000;
6. Пат. 252589155 Российская Федерация, Способ переработки органических полимерных отходов / Р.Н. Галияхметов, О.М. Судакова, А.Г. Мустафин; Патентообладатели: Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Башкирский государственный университет». – № 2015100385; заявл. 12.01.2015; опубл. 10.07.2016.
7. Пат. 2612220 Российская Федерация, МНК С 07 С 51/41, С 07 С 53/126, С 07 С 51/48, С 01 G 53/00. Способ получения 2-этилгексаноата никеля / Галияхметов Р.Н., Судакова О.М., Мустафин А.Г., Гимадиева А. Р., Мустафин И. А.; заявитель и патентообладатель ФГБОУ ВПО Баш. гос. ун-т. – № 2015149712; заявл. 19.11.2015; опубл. 03.03.17, Бюл. № 7.

© Бакиров И.Р., Судакова О.М., 2024

УДК 541.6

### ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИКАПРОЛАКТОНА И ЛЕКАРСТВЕННОГО ВЕЩЕСТВА

Бакирова Э.Р., Сунаргулов А.Б., Гарипова Л.Г.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Микробные инфекции, вызванные различными патогенными штаммами бактерий, приводят к тяжелым внутрибольничным инфекциям у пациентов во всем мире. Поликапролактон (ПКЛ) принадлежит к классу биоразлагаемых и биосовместимых полиэфиров, которые позволяют контролируемо высвобождать лекарственный препарат из композиций на

его основе. Цефтриаксон (ЦФТ), полусинтетический цефалоспорин третьего поколения проявляет широкий спектр антибактериальной активности против различных бактериальных штаммов, вызывающих инфекции кожи, нижних дыхательных путей, мочевыводящих путей, внутрибрюшных, костно-суставных инфекций и инфекций ЦНС. Цель данной работы заключается в изучении зависимости физико-механических свойств композиций на основе ПКЛ-ЦФТ от количества введенного лекарственного вещества.

В работе использовали: образец ПКЛ марки «Экопластик» (Китай), цефтриаксона натриевую соль (ПАО «Биосинтез», Россия). Получение композиций на основе ПКЛ осуществляли на лабораторном пластографе. После процесса пластикации образцы композитов помещались в автоматический гидравлический пресс для формирования пленок. Выбор условий переработки обусловлен проведенной ранее оптимизацией процесса [1]. Содержание ЦФТ варьировалось от 2.5 до 10.0% от общей массы полимеров в смеси. Испытания получаемых материалов на разрыв проводили на универсальной испытательной машине «Shimadzu AGS-X» (Япония).

В ходе проделанной работы оценивались следующие параметры: модуль упругости, разрывное удлинение и разрывное напряжение. Установлено, что введение ЦФТ в композиции на основе ПКЛ приводит к небольшому увеличению модуля упругости ( $E$  (ПКЛ)=285 МПа,  $E$  (ПКЛ-ЦФТ 10%)=358 МПа); незначительному уменьшению разрывного напряжения ( $\sigma$  (ПКЛ)=12.2 МПа,  $\sigma$  (ПКЛ-ЦФТ 10%)= 11.2 МПа, а также к сильному уменьшению разрывного удлинения ( $l$  (ПКЛ) = 400%,  $l$  (ПКЛ-ЦФТ 10%)= 22.1%).

#### Литература

1. Влияние условий переработки на некоторые характеристики поликапролактона / Э. Р. Бакирова, Р. Ю. Лаздин, Е. М. Гизбулина, Е. И. Кулиш // Бутлеровские сообщения. – 2023. – Т. 74, № 4. – С. 72-76.

© Бакирова Э.Р., Сунаргулов А.Б., Гарипова Л.Г., 2024

УДК 541.64

### ПОДХОДЫ К СОЗДАНИЮ МЯГКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ НА ОСНОВЕ ПЕКТИНА

Брызгалова М.Е., Афанасьева М.А., Лаздин Р.Ю.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

На сегодняшний день биомедицинское полимерное материаловедение активно развивается. Среди актуальных задач - создание скаффалдов, систем с пролонгированным высвобождением лекарственных препаратов, пленочных защитных покрытий, мягких лекарственных форм. Среди полимеров, активно применяемых в полимерном материаловедении –

полисахариды, в том числе и пектин. Пектин обладает широким спектром физиологической активности: иммуномодулирующим, антиканцерогенным, действием, а также активностью в отношении грамположительных и грамотрицательных микроорганизмов. К сожалению, гели на основе пектина обладают низким значением предела текучести, что исключает возможность их применения в качестве мягких лекарственных форм. Однако, эта проблема может быть решена введением в раствор пектина модифицирующей добавки - многоатомного спирта глицерина [1].

Гели пектина были получены из исходного раствора цитрусового пектина производства SIGMA-ALDRICH с содержанием галактуроновой кислоты 74,0%. Пектин растворяли в смеси вода:глицерин с объемным содержанием глицерина 10%, 20% и 30%. Концентрация пектина варьировалась от 3 до 20 г/дл. Установлено, что введение модифицирующей добавки глицерина в раствор пектина приводит не только к общему повышению вязкости раствора и усилению аномалий вязкости, но и к росту упругой составляющей вязкости, и к значительному увеличению значений предела текучести.

Таким образом, в ходе выполнения работ было показано, что растворы с концентрацией пектина в растворе 7-10% и содержащие до 30% глицерина могут выступать в качестве основы мягких лекарственных форм. Они характеризуются мягкостью, эластичностью и необходимыми значениями предела текучести. Для использований композиций пектин-вода-глицерин в качестве суппозиториев можно рекомендовать 20% растворы пектина с содержанием глицерина порядка 30%.

#### Литература

1. Shurshina A., Afanasyeva M., Chernova V. Lazdina M., Kulish E. On the possibility of obtaining soft dosage forms based on polyanionic polysaccharides with prolonged yield of drugs. *Macromol. Res.* (2023).

© Брызгалова М.Е., Афанасьева М.А., Лаздин Р.Ю., 2024

УДК 54.057; 541.49; 544.23

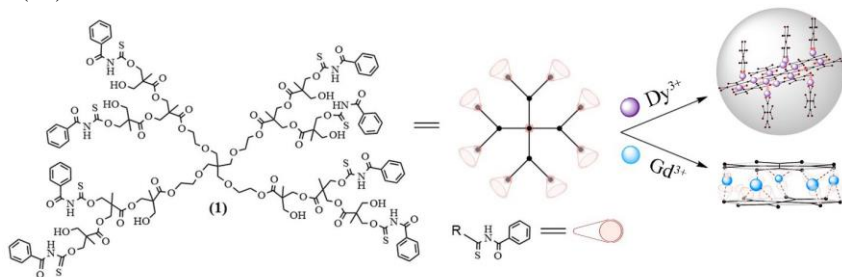
### КОНТРАСТНЫЕ РЕАГЕНТЫ НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСОВ ГИПЕРРАЗВЕТВЛЕННОГО ПОЛИЭФИРОПОЛИБЕНЗОИЛТИОКАРБАМАТА ДОПИРОВАННОГО ИОНАМИ Dy(II) И Gd(II)

Вагапова А.И., Кутырев Г.А.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,  
Казань, Россия*

С целью создания новых эффективных контрастных реагентов для МРТ диагностики синтезированы комплексы гиперразветвленного полиэфирополибензоилтиокарбамата (1) с ионами Dy(III) (2) и Gd(III) (3).

Структура полученных лиганда и комплексов доказана методами ЯМР, ИК и УФ спектроскопии. Было установлено, что в координации с ионами лантаноидов участвуют  $-C=O$  и  $-C=S$  группы бензоилтиокарбаматного фрагментов лиганда (**1**) и реализуются комплексные формы состава  $M:L=3:1$ . Логарифмы условных констант устойчивости составили  $\lg(\beta)=12.41\pm 0.47$  для комплекса (**2**) и  $\lg(\beta)=13.11\pm 3.24$  для комплекса (**3**), что указывает на их высокую устойчивость. Установлено, что в комплексах реализуется самоорганизация в растворах в сферические наноструктуры для комплекса с ионами  $Dy(III)$  (**2**) и в наностержни для комплекса с ионами  $Gd(III)$ .



Измерения релаксационных характеристик полученных соединений проводили в смеси растворителей ДМСО-вода (8:2). Установлено, что лиганд (**1**) не оказывает влияния на времена релаксации. Для комплекса с ионами  $Dy(II)$  (**2**) значения релаксивности  $\tau_1$  и  $\tau_2$  составили 298,22 и 293,64 л·моль $^{-1}$ ·с $^{-1}$ , для комплекса с ионами  $Gd(II)$  (**3**) 19157,24 и 19731,46 л·моль $^{-1}$ ·с $^{-1}$ . Релаксационная способность комплексов  $Dy(III)$  и  $Gd(III)$  увеличилась в 2,5 и 3 раза по сравнению с нитратами этих лантаноидов соответственно. Установлено, что комплексы диспрозия (**2**) и гадолиния (**3**) находятся в парамагнитных состояниях. Таким образом, комплекс (**3**) является перспективным контрастным реагентом для дальнейших исследований.

© Вагапова А.И., Кутырев Г.А., 2024

УДК 544.777

## ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА МИЦЕЛЛОБРАЗОВАНИЕ ПОЛИМЕРНОГО ПАВ PLURONIC P123

Газарян Д.А., Слепцова О.В.

*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

Pluronic P123 представляет собой амфифильный триблоксополимер этиленоксида и пропиленоксида ( $PEO_{20}-PPO_{70}-PEO_{20}$ ) и является неионным водорастворимым ПАВ. Наличие в полимере гидрофильных и гидрофобных блоков, а также их взаимная ориентация определяют не только



поверхностно-активные свойства Pluronic P123, но и его способность участвовать в мицеллообразовании. Формирование мицеллярных структур связано с возможностью макромолекул плюроника принимать в водных растворах различные конформации, зависящие от степени гидратации гидрофильных оксиэтиленовых звеньев и гидрофобных взаимодействий оксипропиленовых звеньев.

Целью настоящей работы послужило исследование влияния температуры на мицеллообразование Pluronic P123 в водных растворах. Исследования проводили методом динамического рассеяния света, позволяющим оценить размеры макромолекулярных ассоциатов в фазе раствора в статических условиях.

Было обнаружено, что формированию мицеллярной структуры полимерного ПАВ в водном растворе отвечает образование устойчивой монодисперсной системы (рис. 1). Полиоксипропиленовый блок макромолекул триблоксополимера включается в ядро мицеллы, гидрофильные полиоксипропиленовые блоки образуют ее оболочку, размер мицелл составляет примерно 9 нм при 20 °С.

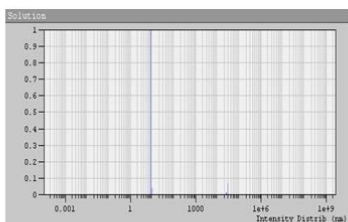


Рис. 1. Гистограмма распределения ассоциатов Pluronic P123 по размерам

Методом динамического рассеяния света были получены температурные зависимости гидродинамического радиуса ассоциатов при различных концентрациях Pluronic P123. С увеличением температуры гидродинамический радиус уменьшается вследствие

дегидратации оксиэтиленовых звеньев. При достижении температуры помутнения начинается разделение фаз. Зависимости гидродинамического радиуса ассоциатов от логарифма концентрации Pluronic P123 позволили по точке перегиба, отвечающей формированию монодисперсной структуры, определить ККМ в широком диапазоне температур. При температуре помутнения происходит разрушение мицеллярной структуры водного раствора полимерного поверхностно-активного вещества Pluronic P123.

© Газарян Д.А., Слепцова О.В., 2024

Хитозан – это природный полимер, получаемый путем деацетилирования хитина, который является основным компонентом панцирей ракообразных.

Хитозан имеет большой потенциал для медицинского применения. Например, он используется в качестве биосовместимых материалов для создания ранозаживляющих повязок, в тканевых инженерных конструкциях, стентов, костных имплантов и т.д. Благодаря биоразлагаемости, биосовместимости, бактериостатичности хитозан способствует естественному процессу заживления ран и раневых поверхностей.

Перспективным направлением в последнее время служит применение его в системе доставки лекарственных средств. Он может служить носителем с контролируемым высвобождением лекарственного вещества [1]. Главная задача такого носителя заключается в осуществлении доставки лекарства в течение длительного времени в зону локализации, тем самым снизив побочный эффект и улучшив восприимчивость пациента. Согласно последним литературным данным, хитозан обладает противоопухолевой активностью, где противоопухолевый механизм его связан с ингибированием пролиферации опухолевых клеток и индукцией апоптоза опухолевых клеток, тем самым активируется иммунная система и уничтожаются опухолевые клетки [2]. Кроме того, хитозан имеет антимикробные свойства, способствующие борьбе с инфекциями. Поэтому в медицине одобрили различные противомикробные повязки и наполнители для лекарств с использованием хитозана [3].

Таким образом, перспективы применения хитозана в медицинских целях обширны и его использование позволяет сделать шаг вперед в разработках новых и эффективных методов лечения различных травм и заболеваний.

#### Литература:

1. Кулиш Е.И., Лаздин Р.Ю., Шуршина А.С., Колесов С.В., Захарова Е.М., Захаров В.П. Структурообразование как способ формирования физико-механических характеристик пленок, полученных из водных растворов некоторых полисахаридов // Высокомолекулярные соединения. Серия А. 2021. Т. 63. № 1. С. 57-65.
2. Shi G.N., Zhang C.N., Xu R., Niu J.F., Song H.J., Zhang X.Y., Wang W.W., Wang Y.M., Li C., Wei X.Q., Kong D.L. Enhanced antitumor immunity by targeting dendritic cells with tumor cell lysate-loaded chitosan nanoparticles vaccine. // *Biomaterials*. 2017. Vol. 113. P. 191–202.
3. Layek B., Rahman Nirzhor S. S., Rathi S., Kandimalla K. K., Wiedmann T. S., Prabha S. Design, Development, and Characterization of Imiquimod-Loaded Chitosan Films for Topical Delivery // *AAPS PharmSciTech*. 2019. Vol. 20. P. 58.

РАНЕЗАЖИВЛЯЮЩИЕ ПЛАСТИНЫ НА ОСНОВЕ СМЕСЕЙ  
НАТРИЕВЫХ СОЛЕЙ СУКЦИНИЛХИТОЗАНА И  
КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ

Гареева З.Д., Алмаев Б.Ф.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Современное раневое покрытие должно обладать заданными технологическими, физико-химическими и физиологическими свойствами: лечебными, защитными, сорбционными и транспортными. Кроме того, оно должно быть прозрачным, достаточно прочным и эластичным, устойчивым к стерилизации, удобным в применении для больного и медперсонала, а также биodeградирующим. Этим свойствам удовлетворяют материалы, полученные из биосовместимых природных или искусственных полимеров, а также их композиций. Например, очень перспективным является полимер хитозан (ХТЗ) и его производные, например натриевая соль N-сукцинилхитозана (СХТЗ), преимуществами которого являются, с одной стороны – растворимость в нейтральных средах и возможность формирования материалов из растворов, что снижает затраты на производство, а с другой – биосовместимость с тканями организма, бактериостатичность, способность к биodeградации. Вместе с тем, большинство применяемых на данный момент полимерных материалов на основе СХТЗ не обладают достаточными для эффективной и удобной эксплуатации физико-механическими характеристиками. Одним из путей решения данной проблемы является использование полимерных смесей СХТЗ с другими биоразлагаемыми полимерами, например, натриевой солью карбоксиметилцеллюлозы (КМЦ), которая обладает большей механической прочностью, а также проявляет биоадгезивные свойства. Также перспективным методом улучшения деформационного поведения полимерных материалов является добавление к смесям низкомолекулярных модифицирующих добавок, таких как многоатомные спирты.

*Целью работы* было получение ранезаживляющих пластин на основе полимерных смесей СХТЗ с КМЦ и глицерином в качестве пластификатора, с оптимальными для технологическими и эксплуатационными характеристиками.

Пластины получены лиофилизацией растворов смесей полимеров различных составов: 3% СХТЗ, КМЦ 1-1.5%, глицерин 0.25-2%. Для установления взаимосвязи «структура формовочного раствора – свойство конечного материала» проведены реологические исследования стерилизованных и нестерилизованных растворов индивидуальных КМЦ и СХТЗ и их смесей. Растворы индивидуального КМЦ и смесей КМЦ и СХТЗ, подвергнутых стерилизации, при содержании КМЦ более 1 % масс.

характеризуются существенным повышением вязкости, что может свидетельствовать о процессах сшивания макромолекул (рис. 1). Об этом же свидетельствуют и данные о величинах пределов текучести (табл. 1). При этом, при содержании КМЦ от 1,5 % предел текучести растворов индивидуального КМЦ и смесей КМЦ и СХТЗ резко возрастает.

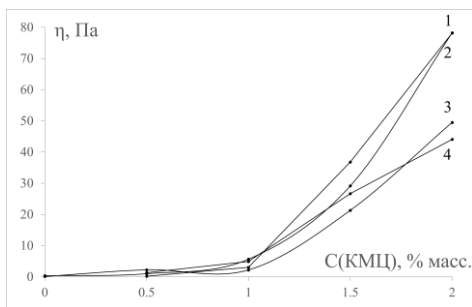


Рис. 1. Зависимость вязкости раствора от содержания КМЦ: Стерилизованные растворы индивидуального КМЦ (1) и смеси КМЦ и 3% масс. СХТЗ (3); Нестерилизованные растворы индивидуального КМЦ (4) и смеси КМЦ и 3% масс. СХТЗ (2).

Следовательно, содержание КМЦ в формовочных растворах при получении ранезаживляющих пластин должно быть, с одной стороны, не менее 1 % масс., чтобы растворы имели достаточно высокую степень структурированности, а с другой стороны – не более 1,5%, чтобы системы оставались достаточно текучими для транспортирования и дозирования. Введение глицерина снижает значения пределов текучести, что может быть связано с тем, что глицерин сольватирует полярные группы КМЦ и СХТЗ и уменьшается интенсивность межмолекулярного взаимодействия, что особо проявляется в области высоких концентраций КМЦ.

В конденсированной фазе (пористой пластине) введение глицерин способствует улучшению совместности компонентов в результате того, что межмолекулярное интерполимерное взаимодействие преобладает над внутримолекулярной гомоассоциацией. Наблюдаемое усиление разрывного напряжения пластин, полученных из растворов смесей СХТЗ и КМЦ с содержанием КМЦ 1 и 1,5 % по сравнению с пластинами из индивидуального СХТЗ, можно рассматривать как ситуацию повышения разрывного напряжения в наполненных системах. Т.е. причиной, обуславливающей некоторое усиление прочностных характеристик пластин, является образование агрегатов макромолекул, представляющие собой узлы флуктуационной сетки зацеплений. Значение разрывного удлинения тоже увеличиваются. При введении глицерина с концентрацией 1 % наблюдается резкий рост разрывного удлинения. Вместе с тем, физико-механические свойства промышленно-производимой и находящейся в свободной продаже пластины «Хитокол» уступают полученным в данной работе пластинам.

© Гареева З.Д., Алмаев Б.Ф., Базунова М.В., 2024

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ  
ПОЛИКАПРОЛАКТОНА И ЛЕКАРСТВЕННОГО ВЕЩЕСТВА

Гарипова Л.Г., Бакирова Э.Р., Сунаргулов А.Б.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Известно, что частота послеоперационных инфекций снижается при применении антибиотикопрофилактики. Идеальные противомикробные препараты должны быть эффективны против наиболее распространенных микроорганизмов, обнаруживаемых в местах хирургического вмешательства, без уничтожения других возбудителей. В частности, цефтриаксон (ЦФТ), цефалоспорин третьего поколения, рассматривается как препарат для профилактики постнейрохирургических инфекций. Это связано с тем, что ЦФТ наиболее эффективен против грамположительных бактерий, таких как *S. aureus* и *CoNS*, которые являются основными причинами подобных инфекций. Локализованная доставка лекарств — одна из наиболее эффективных стратегий доставки лекарств в конкретный целевой участок. В качестве основы композиций, содержащих ЦФТ, может быть использован биосовместимый и биоразлагаемый синтетический полиэфир – поликапролактон (ПКЛ). Целью данной работы является анализ зависимости реологических характеристик композиций на основе ПКЛ-ЦФТ от количества введенного лекарственного вещества.

В работе использовали: образец ПКЛ марки «Экопластик» (Китай), цефтриаксона натриевую соль (ПАО «Биосинтез», Россия). Получение композиций на основе ПКЛ осуществляли на лабораторном пластиграфе, далее образцы помещались в автоматический гидравлический пресс. Выбор условий переработки обусловлен проведенной ранее оптимизацией процесса [1]. Содержание ЦФТ варьировалось от 2.5 до 10.0% от общей массы полимеров в смеси. Реологические измерения проводили на модульном динамическом реометре «Haake Mars III» (Япония).

В ходе проделанной работы оценивались значения комплексной вязкости. Установлено, что чем больше лекарственного вещества в композиции, тем больше значения комплексной вязкости.

## Литература

1. Влияние условий переработки на некоторые характеристики поликапролактона / Э. Р. Бакирова, Р. Ю. Лаздин, Е. М. Гизбуллина, Е. И. Кулиш // Бутлеровские сообщения. – 2023. – Т. 74, № 4. – С. 72-76.

© Гарипова Л.Г., Бакирова Э.Р., Сунаргулов А.Б., 2024

ОСОБЕННОСТИ ОСАЖДЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА В НАНОГЕЛИ  
НА ОСНОВЕ ПОЛИ-N-ВИНИЛКАПРОЛАКТАМА

Гомозова С.А., Бесчетнова Т.А., Слепцова О.В.

*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

Среди многочисленных полимерных объектов особое внимание вызывают наногели, представляющие собой водную дисперсию сетчатых полимерных частиц, стабилизированных поверхностно-активным веществом. Сетчатые частицы наногеля могут быть использованы в качестве реакторов для осаждения функциональных материалов в форме наночастиц, например, благородных металлов.

Одним из стимул-чувствительных полимеров, используемых для синтеза наногелей, является поли-N-винилкапролактан (ПВК). Он обладает рядом важнейших свойств, например, невысокой токсичностью, термочувствительностью, способен образовывать комплексные соединения.

Синтез наногеля ПВК проводили методом радикальной гетерофазной полимеризации N-винилкапролактама (ВК). В качестве сшивающего агента использовали N,N'-метилен-*бис*-акриламид (МБАА), инициатора – пересульфат калия (ПСК). Синтез проводили при различных концентрациях мономера и ПАВ –додецилсульфата натрия. Сетчатые частицы синтезированных наногелей имеют гидродинамический радиус порядка 100 нм, с увеличением концентрации додецилсульфата натрия, стабилизирующего наногель, размер частиц закономерно уменьшается.

Агрегативная устойчивость наногеля обеспечивалась за счет ионно-электростатического фактора устойчивости благодаря адсорбционным слоям анионоактивного додецилсульфата натрия. Снижение агрегативной устойчивости наблюдалось для наногелей, синтезированных при низких концентрациях ПАВ, ниже их критической концентрации мицеллообразования.

Осаждение наночастиц серебра проводили путем химического восстановления борогидридом натрия ионов серебра, адсорбированных наногелем. При введении ионов серебра в полимерную дисперсию не происходило увеличения размеров частиц, а значения  $\zeta$ -потенциалов оставались достаточно высокими ( $\zeta = -31$  мВ). В процессе восстановления  $Ag^+$   $\zeta$ -потенциалы приобретали еще более отрицательные значения, что подтверждало сохранение агрегативной устойчивости наногелей.

Для подтверждения осаждения серебра в форме наночастиц было проведено спектрофотометрическое исследование нанокомпозитов. На УФ-спектрах отчетливо наблюдается полоса плазменного поглощения наноразмерного серебра в области  $\lambda \approx 400$  нм. Высота пика при одинаковой концентрации введенного восстановителя ионов серебра определяется

насыщенностью адсорбционных слоев додецилсульфата натрия, стабилизирующих наногели ПВК.

© Гомозова С.А., Бесчетнова Т.А., Слепцова О.В., 2024

УДК 544.6

## ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ 1-НАФТИЛАМИНА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩЕГО ПОЛИМЕРА

Гордеев Д.Н., Гимадиева А.Р., Мустафин А.Г.

*Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

Полианилин (ПАНИ) является одним из наиболее широко исследованных проводящих полимеров из-за его замечательных электрохромных свойств и разнообразного применения в области биосенсоров, органических солнечных батарей, суперконденсаторов и т. д. Хотя этот полимер термически стабилен, он крайне плохо растворяется в обычных органических растворителях. Поиски растворимых производных ПАНИ привлекли внимание исследователей к полимеризации мономера 1-нафтиламина (1-НА) [1].

Нами проведена окислительная полимеризация 1-НА действием различных окислителей ( $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$ ,  $\text{K}_2\text{Cr}_2\text{O}_7$ ) в кислой среде ( $\text{HCl}$ ,  $\text{H}_2\text{SO}_4$ ).

Полимеризация подтверждена ИК- и ЯМР- спектроскопией. Предполагаемая структура полученного полимера представлена на схеме 1.

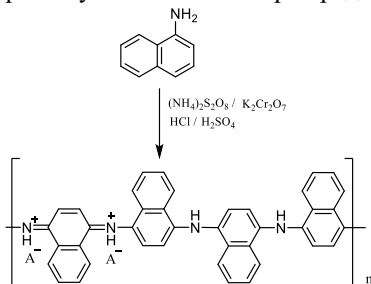


Схема 1. Предполагаемая структура 1-НА

Таким образом, нами получен поли-(1-НА) при различных условиях синтеза. Полимер хорошо растворяется в ДМСО, ДМФА, ТГФ, ацетоне, частично в хлороформе. Изучаются строение и физико-химические свойства полученного соединения, а также подбираются оптимальные условия для полимеризации 1-нафтиламина.

### Литература

1. Jadoun S. et al. A short review on the synthesis, characterization, and application studies of poly (1-naphthylamine): a seldom explored polyaniline derivative // Colloid and Polymer Science. – 2017. – Т. 295. – С. 1443-1453.

© Гордеев Д.Н., Гимадиева А.Р., Мустафин А.Г., 2024

УДК 678.01

ТЕРМОДЕФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА БАЗАЛЬТОПЛАСТИКОВ НА  
ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО ПОЛИЭТИЛЕНА ВЫСОКОЙ  
ПЛОТНОСТИ

Гулиева О.М., Кахраманов Н.Т.

*Институт Полимерных Материалов Министерства Науки и Образования,  
Сумгайыт, Азербайджан*

Полиолефины относятся к числу многотоннажных полимерных материалов выпускаемых в промышленности. Высокая технологичность переработки практически всеми методами: литьем под давлением, экструзией, вакуум-пневмоформованием, а также удовлетворительные физико-механические свойства в совокупности позволили получить на их основе различные виды конструкционных материалов. Совершенствование техники в различных отраслях промышленности, а также высокие эксплуатационные требования к качеству полиолефинов способствовали использованию различных методов модификации их структуры и свойств [1]. Путем использования физических и химических методов модификации структуры полиолефинов, а также введение наполнителей, пластификаторов, стабилизаторов и т.д. позволили в значительной степени расширить эксплуатационные возможности композитных материалов на их основе. В данной работе основное внимание акцентируется на изучении термодформационных характеристик композитных материалов на основе полиэтилена высокой плотности (ПЭВП) и волокнистого базальта. Использование волокнистого базальта в качестве наполнителя, прежде всего, было обусловлено тем, что этот минерал сравнительно мало изучен и трудно смешивается с полиолефинами, в частности с ПЭВП. В данном случае речь идет о совместимости смешиваемых компонентов смеси и равномерном распределении базальтового волокна в составе ПЭВП.

Целью данного исследования являлось изучение термомеханических характеристик базальтопластика на основе ПЭВП, которая позволяет получить довольно полезную информацию о физических состояниях и фазовых переходах в зависимости от содержания наполнителя. При построении термомеханической кривой полимера  $\Delta = f(T)$  очень важно охватить по возможности всю температурную область существования полимера – стеклообразное (кристаллическое), высокоэластическое и вязкотекучее состояния. Необходимость использования этого метода исследования позволяет прогнозировать поведение полимерного материала в режиме расплава в материальном цилиндре перерабатывающего оборудования, а также в твердом состоянии в процессе эксплуатации при различных температурных условиях. При этом, весьма важное значение приобретают исследования, направленные на улучшение совместимости



смешиваемых компонентов смеси с использованием компатибилизаторов. При изучении совместимости минерального наполнителя с полимерной матрицей метод термомеханического анализа становится весьма информативным для интерпретации деформационных процессов при различных вышеуказанных физических состояниях композита.

Приводятся результаты исследования влияния температуры на деформацию композитов в зависимости от содержания базальта без компатибилизатора и с компатибилизатором. Анализ термомеханических кривых показал, что с увеличением содержания базальта от 1.0 до 30%масс. наблюдается изменение фазового перехода первого рода, выражающееся в повышении температуры размягчения композитов от 131 до 142оС. Это обстоятельство имеет важное значение, поскольку позволяет утверждать о том, что волокна базальта создают определенные стерические затруднения процессу термического распада в надмолекулярной структуре композита. И, чем больше содержание базальта, тем при более высокой температуре происходит размягчение надмолекулярной структуры композита. Дальнейшее повышение температуры в области вязкотекучего состояния характеризуется появлением искривлений на термомеханических кривых. Есть основание полагать, что появление нескольких искривлений на этих кривых свидетельствует о неравномерном распределении волокон в составе композита (ПЭВП+базальт). Совершенно очевидно, что волокна распределяются в межсферолитной области ПЭВП. Высокая кристалличность исходной полимерной матрицы вносит определенные ограничения на процесс распределения наполнителя, что, по-видимому, может сопровождаться появлением дефектности в кристаллической фазе полимерной матрицы.

Изучено влияние компатибилизатора (ПЭМА) на термомеханические свойства базальтопластиков на основе ПЭВП. Установлено, что введение ПЭМА в состав композита способствует тому, что в области вязкотекучего состояния практически отсутствуют искривления на кривой. Это обстоятельство имеет важное значение поскольку подтверждает равномерное распределение базальта и улучшение совместимости в системе «полимерная матрица-наполнитель».

#### Литература

1. Симонов-Емельянов И.Д. Построение структур в дисперсно-наполненных полимерах и свойства композиционных материалов // Пластические массы. – 2015, №9–10. – С. 29–36.

© Гулиева О.М., Кахраманов Н.Т., 2024

МЕТАЛЛОСодержащие нанокомпозиционные  
термоэластопласты на основе изотактического  
полипропилена

Гулиева Т.М., Курбанова Н.И.

*Институт Полимерных Материалов Министерства Науки и  
Образования Азербайджанской Республики, Сумгаит, Азербайджан*

Одной из актуальных задач полимерной промышленности является производство и применение полимерных композиционных материалов на основе термоэластопластов (ТЭП). Эти полимеры обладают свойствами каучуков при эксплуатации и характеризуются легкостью переработки в изделия по технологии с использованием оборудования для переработки термопластов.

В настоящее время огромный интерес среди разработчиков полимерных материалов вызывают наноразмерные слоистосиликатные или металлосодержащие наполнители, которые уже при небольших количествах (до 5 масс.%) в полимерной матрице приводят к увеличению модуля упругости, прочности, повышению термо-, теплостойкости и устойчивости к горению, снижению газопроницаемости материала [1, 2]. В связи с этим особый интерес вызывает применение наночастиц оксидов металлов в производстве термоэластопластов (ТЭП) на основе полиолефинов и каучуков с целью повышения их физико-механических и эксплуатационных свойств.

В настоящей работе исследовались термоэластопласты, получаемые смешением изотактического полипропилена (ПП), бутадиен-нитрильного каучука (БНК) с 40 % акрилонитрила и наполнителя (НН). В качестве наполнителя использовались наночастицы оксида никеля (NiO), стабилизированные полимерной матрицей полиэтилена высокого давления (ПЭ), полученные механохимическим методом в расплаве полимера. Соотношение компонентов композиции (масс. %): ПП/БНК/НН=70/30/ (0.5; 1.0; 2.0).

Исследованы физико-механические и теплофизические свойства полученных нанокомпозитивов. Введение в состав композиции 1.0 масс. % НН приводит к увеличению показателя прочности от 13.76 до 17.24 МПа, деформации при разрыве композита в 1.25 раза, что, по-видимому, обусловлено синергетическим эффектом, связанным с межфазным взаимодействием никельсодержащих наночастиц в матрице ПЭ с компонентами композиции ПП/БНК, взаимное влияние которых способствует увеличению как величины деформации, так и показателя прочности. Исследование теплостойкости по Вика полученных композиций

показало, что введение в состав ПП/БНК нанонаполнителя приводит к увеличению показателя теплостойкости от 160 до 175°C.

При изучении показателя текучести расплава (ПТР) полученных нанокompозитов при нагрузке 5 кг и температуре 230°C установлено, что добавление 1.0 масс.% нанонаполнителя в смесь ПП/БНК способствует сохранению показателя текучести расплава на уровне исходного показателя равного 2.37 г/10 мин, дальнейшее увеличение количества НН до 2.0 масс.% - не влияет на величину показателя текучести расплава. Данный показатель свидетельствует о возможности переработки полученных нанокompозитов путем литья под давлением и экструзией.

Используемые в работе металлсодержащие наночастицы, располагаясь на границе межфазного слоя структурных элементов ПП, БНК и ПЭ, способствуют формированию в расплаве композиции гетерогенных центров зародышеобразования, которые в процессе ступенчатого охлаждения нанокompозита способствуют увеличению центров кристаллизации, приводящих в целом к улучшению процесса кристаллизации и формированию относительно мелкоферолитной структуры.

#### Литература

1. Guliyeva T. M., Kurbanova N. I. Properties of metal-containing nanocomposites on the basis of isotactic polypropylene and butadiene nitrile rubber. High Energy Chemistry, -Vol. 57, Suppl. 2, 2023.- pp. S60-S64.
2. Вольфсон С.И., Охотина Н.А., Нигматуллина А.И., Сабилов Р.К., Кузнецова О.А., Ахмерова Л.З. Упруго-гистерезисные свойства динамических термоэластопластов, модифицированных нанонаполнителем. Пластические массы, 2012. - №4. - с.42-45.

© Гулиева Т.М., Курбанова Н.И., 2024

УДК 691.175.5/8

### СРАВНЕНИЕ РАЗЛИЧНЫХ МАРОК АБС-ПЛАСТИКА ПОСРЕДСТВАМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ СКАНИРУЮЩЕЙ КАЛОРИМЕТРИИ.

Ионова А.Д., Любина Е.П., Яковлев И.Д.  
*ФБГОУ ВО «КНИТУ», Казань, Россия*

В работе методом дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) рассматривается информация о температурах и теплотах фазовых переходов (плавления, кристаллизации, стеклования), термодинамике и кинетике химических реакций ABS- пластика различных производителей.

В качестве материала используются 6 видов АБС-пластиков разных производителей: 1. Cyberfiber белого цвета; 2. Пластик узловая желтого цвета; 3. Пластик узловая синего цвета; 4. Cyberfiber черного цвета; 5. Пластик узловая бронзового цвета; 6. Рес натурального цвета.

Измерения проводили на установке Netzsch Phoenix DSC 204 F1.

Образцы сополимеров помещали в ячейку калориметра при комнатной температуре и охлаждали до температуры 25 °С (точка начала сканирования), после чего образец подвергался нагреву до 300 °С со скоростью 10 град/мин.

Анализ результатов, полученных методом ДСК, показывает, что большинство полимеров характеризуются наличием структурных переходов в области температур 100°С, характерных для процессов расстеклования АБС.

При этом для образца №1 (Cyberfiber белого цвета) характерны множественные пики в области температур от 60°С до 140°С, позволяющие говорить о протекании различных процессов расстеклования, тем самым подтверждая, что данный образец сделан либо на основе блок-сополимеров, либо компаунда из АБС и полистирола различного строения.

Все остальные образцы характеризуются типичными структурными переходами для АБС-пластиков. Иногда заметны процессы окисления, о которых говорят пики при температурах выше 250-300°С, что подтверждает рекомендации производителей не использовать режим печати свыше 250°С.

© Ионова А.Д., Любина Е.П., Яковлев И.Д., 2024

УДК 541.64

#### ПЕРСПЕКТИВА ПРИМЕНЕНИЯ ПОЛИМЕРОВ РАСТИТЕЛЬНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ В СОСТАВЕ ЖИДКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ.

Исаева А.В.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия.*

Люди используют жидкие лекарственные формы уже многие века. В древнем Египте были созданы первые жидкие лекарственные формы. В более поздние времена в Греции и Риме были разработаны более сложные композиции.

Однако существенный прорыв в производстве и использовании жидких лекарственных форм наступил в 20 веке. Были созданы новые технологии, которые улучшили биодоступность и контроль над высвобождением лекарственных веществ. Ученые в поисках новых технологий, способных улучшить характеристики лекарств, обнаружили, что применение полимеров позволяет снизить колебания уровней в плазме и поддерживать стабильную концентрацию активного ингредиента в организме на протяжении более длительного периода времени.

Кроме того, выяснилось, что жидкие лекарственные формы на основе полимеров могут быть особенно полезны для лекарств, которые требуют регулярного или постоянного поступления активного ингредиента для достижения терапевтического эффекта.

Одним из таких полимеров является пектин. Структура пектина включает в себя многочисленные химические группы, такие как метоксильные и карбоксильные группы, которые обеспечивают его химические свойства. Свойства пектина включают способность образовывать гели [1], высокая водорастворимость, способность образовывать комплексы с различными макро- и микроэлементами, что делает его полезным материалом в различных биологических и медицинских приложениях.

Исследования также показывают, что растительные полимеры могут значительно улучшить биодоступность и растворимость некоторых лекарственных веществ. Они способны действовать в качестве носителей для активных компонентов, защищая их от разрушения в пищеварительном тракте и обеспечивая постепенное и равномерное высвобождение.

#### Литература

1. Афанасьева М.А., Лаздина М.Ю., Шуршина А.С., Кулиш Е.И. Мягкие лекарственные формы на основе водных растворов пектина // Вестник Башкирского университета. 2022. Т. 27. № 2. С. 355-358.

© Исаева А.В., 2024

УДК 541.64

### ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ ПОЛИМЕРОВ В МЕДИЦИНЕ

Исмагилова Э.Ш.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Разработка лекарственных препаратов с улучшенным высвобождением является одним из ключевых направлений современных исследований в области фармацевтической технологии. Этот подход направлен на улучшение эффективности и безопасности лекарственных средств, как новых препаратов, так и уже существующих в клинической практике.

На сегодняшний день среди разнообразных фармацевтических форм особым вниманием охвачены системы доставки лекарств второго, а также третьего поколения. Препараты второго поколения - это системы, высвобождающие активное вещество в течение длительного времени, а препараты третьего поколения - системы с контролируемым высвобождением. В зависимости от способа применения, введения специальных вспомогательных веществ или других методов можно добиться медленного непрерывного высвобождения препарата. Наиболее распространенными вспомогательными веществами являются полимеры, а также их композиции.

Одним из наиболее часто используемых полимеров для этих целей является поливиниловый спирт (ПВС), который характеризуется высокими

показателями гидрофильности и биосовместимости. ПВС используется в качестве компонента для создания лекарственных систем с контролируемым высвобождением. Эти системы обеспечивают постепенное и длительное высвобождение лекарств в организме, что позволяет повысить эффективность лечения [1]. Поливиниловый спирт растворим в воде, что делает его удобным для использования в производстве медицинских изделий, а также может применяться в качестве носителя для лекарств, повышая их биодоступность и стабильность. Поливиниловый спирт не обладает токсичным действием и является инертным при использовании лекарственных препаратов.

Разработка препаратов с улучшенным высвобождением является важным шагом в совершенствовании фармацевтических технологий и позволяет повысить эффективность лечения, снизить дозировку препарата, улучшить соблюдение режима приема препарата пациентами и сократить возможные побочные эффекты.

#### Литература:

1. Shurshina A.S., Lazdin R.Yu., Zakharova E.M., Titlova A.S., Kulish E.I. Prolonging effects of polyvinyl alcohol on drug release // *Chimica Techno Acta*. 2022. Т. 9. № 2. С. 20229206.

© Исмагилова Э.Ш., 2024

УДК 541.64

### ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИКАПРОЛАКТОНА С АМИКАЦИНОМ

Казыргалин А.И., Якупов М.Р., Бакирова Э.Р.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Регенеративная медицина направлена на восстановление, поддержание или улучшение функций и эстетики тканей, предлагая заменители, которые взаимодействуют с окружающей средой и активно стимулируют регенерацию тканей, не заменяя их. Эта цель может быть достигнута путем производства биоматериалов, способных имитировать структуру восстанавливаемой ткани, избегая любой негативной реакции, что способствует так называемой направленной регенерации тканей. Для этих целей прекрасно подходят биоразлагаемые полиэферы, например, поликапролактон (ПКЛ).

В данной работе были изучены физико-механические характеристики композиций ПКЛ с амикацином в качестве лекарственного вещества (ЛВ), которые были измерены на разрывной машине "ShimadzuAGS-X" при температуре 20°C и скорости движения подвижного захвата 1 мм/мин.

Смешение ЛВ с полимерной матрицей было выполнено в расплаве при помощи лабораторной станции (пластограф) “Plastograph EC” (Brabender® GmbH & Co. KG, Германия). Для формирования пленок было выполнено прессование смеси на лабораторном гидравлическом автоматическом прессе. В ходе проделанной работы были определены значения модуля упругости  $E$ , показателя разрывной деформации  $\sigma$  и предела прочности.

Получены образцы с составами: 1) ПКЛ-ЛВ 2.5%; 2) ПКЛ-ЛВ 5%; 3) ПКЛ-ЛВ 10%. Информация по основным параметрам приведена в таблице 1:

Таблица 1

Физико-механические характеристики образцов ПКЛ-ЛВ			
Содержание ЛВ, %	$E$ , МПа	$\sigma$ , МПа	$l$ , %
2,5	356,72	8,48668	9,62213
5	344,86	8,12799	8,12799
10	376,361	5,58257	9,82524

#### Литература

1. Влияние условий переработки на некоторые характеристики поликапролактона / Э. Р. Бакирова, Р. Ю. Лаздин, Е. М. Гизбуллина, Е. И. Кулиш // Бутлеровские сообщения. – 2023. – Т. 74, № 4. – С. 72-76. – DOI 10.37952/ROI-jbc-01/23-74-4-72.

© Казыргалин А.И., Якупов М.Р., Бакирова Э.Р., 2024

УДК 541.64

### ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА С АМИКАЦИНОМ

Казыргалин А.И., Якупов М.Р., Бакирова Э.Р.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Полимерные системы контролируемого высвобождения на основе биоразлагаемых полимеров, наполненных лекарственным веществом, являются крайне перспективными, и уже довольно широко изучаются в качестве инновационных терапевтических технологий. Основными задачами этих систем являются контроль уровня действующего вещества, оптимизация доз, снижение побочных эффектов и удобство для приема пациентами. Подобные материалы должны обладать заданными физико-механическими свойствами, например, быть достаточно упругими и прочными, чтоб не было преждевременного разрушения материала.

В данной работе были изучены физико-механические характеристики композиций полилактида (ПЛ) с амикацином в качестве лекарственного вещества (ЛВ). Получение полимерных композиций было осуществлено в расплаве на лабораторной станции (пластограф) “Plastograph EC” (Brabender® GmbH & Co. KG, Германия) с дальнейшей отпрессовкой пластика в лабораторном гидравлическом автопрессе [1]. Физико-

механические свойства полимерных композитов при разрыве были определены на разрывной машине "ShimadzuAGS-X" при температуре 20°C и скорости движения подвижного захвата 1 мм/мин.

Получены образцы со следующими составами: 1) ПЛ-ЛВ 2.5%; 2) ПЛ-ЛВ 5%; 3) ПЛ-ЛВ 10%. Получены следующие результаты:

Таблица 1

Физико-механические характеристики образцов ПЛ-ЛВ.

Содержание ЛВ, %	$E$ , МПа	$\sigma$ , МПа	$l$ , %
2,5	2488,555	1,65148	28,21585
5	2812,25	2,27906	41,9885
10	2653,673	2,12905	36,82463

#### Литература

1.Бакирова Э. Р., Лаздин Р. Ю., Чернова В. В., Кулиш Е. И. Влияние условий переработки на некоторые характеристики полилактида // Бутлеровские сообщения. 2022. Т. 69. № 4. С. 59-64.

© Казыргалин А.И., Якупов М.Р., Бакирова Э.Р., 2024

УДК 544.77, 661.18

### ИЗУЧЕНИЕ СКОРОСТИ ГИДРОЛИТИЧЕСКОЙ ДЕСТРУКЦИИ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ВТОРИЧНОГО ПОЛИПРОПИЛЕНА, НАПОЛНЕННОГО ДРЕВЕСНОЙ МУКОЙ

Калеева В.В.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

В условиях окружающей среды гидролитическая деструкция и сопровождающая ее биodeградация отходов ряда полимерных материалов может протекать под действием жидкие биологических сред, представляющих собой растворы различных неорганических и органических веществ и микроорганизмов [1,2]. Карбоцепные полимеры, в том числе полипропилен (ПП), устойчивы к такой деструкции (связь С-С не расщепляется перечисленными выше реагентами). Однако, если рассматривать отходы изделий из карбоцепных полимеров, то вероятность гидролитической деструкции по связям углерод-гетероатом, образующимся в результате старения, повышается. Целлюлозосодержащие растительные компоненты, которые можно вводить в композиционные материалы на основе ПП, способны к полной гидролитической деструкции, т.к. в определённых условиях целлюлоза гидролизуеться до глюкозы:

В связи с вышесказанными, с целью оценки вклада гидролитической деструкции в процесс деградации отходов полиолефинов проведено изучение скорости гидролитической деструкции в среде ферментного препарата полимерных композитов на основе вторичного полипропиленового сырья с



разной степенью наполнения природными компонентами растительного происхождения различного типа.

Для изучения скорости гидролитической деструкции приготовлены образцы на основе вторичного ПП, соответствующего ПП марки «ПП 350 белый Мастербач 22», представляющего собой дробленый материал из некондиционных изделий, производимых методом литья под давлением в технологическом производстве ООО "ЗПИ Альтернатива" (Республика Башкортостан, г. Октябрьский). В качестве растительного целлюлозосодержащего наполнителя использована древесная мука (ДМ) марки 180 хвоя (г. Дзержинск) (ГОСТу 16361-87 и ТУ 5386-001-87877379-2014), со средним размером частиц около 0.17 мм, содержала 45-52% целлюлозы, 35% лигнина, 17-23% гемицеллюлозы. Дозировка ДМ рассчитывалась в массовых частях (м.ч.) на 100 м.ч. полипропилена.

Получение полимерных материалов в виде стандартных лопаток по ГОСТ 11262-80, «Пластмассы. Метод испытания на растяжение» (тип образцов № 5) осуществляли литьем под давлением на инжекционной формовочной машине Babuplast 6/10P.

С целью изучения кинетики гидролитической деструкции образцы композитов выдерживались в среде ферментного препарата длительное время (до 60 суток), в течение которого определялось относительное изменение массы образцов (рисунок 1). Каждые три дня на протяжении всего испытания раствор ферментного препарата менялся. В качестве ферментного препарата использовали фермент «Целлюлаза» концентрацией 2 г/л (производства PHAYNO INDUSTRY LIMITED, KHP).

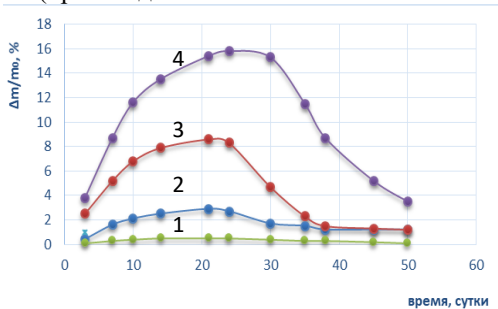


Рисунок 1. - Кривые относительного изменения массы образцов на основе вторичного ПП и ДМ, погруженных в раствор ферментного препарата «Целлюлаза» концентрацией 0,2 г/л (20 °С): 5 м.ч. ДМ (1); 15 м.ч. ДМ (2); 30 м.ч. ДМ (3); 50 м.ч. ДМ (4).

Как следует из кривых водопоглощения, представленных на рисунке 1, на начальной стадии процесса происходит максимальное увеличение массы, что связано с набуханием поверхностных слоев композиции за счет наличия пор в структуре материала и содержания в системе большого количества гидрофильного наполнителя. Затем происходит постепенное снижение массы образцов, связанное с деструкцией, вымыванием наполнителя и низкомолекулярных фракций из полимерной матрицы композита. При этом происходит увеличение пористости в структуре композита, что

способствует более активному проникновению воды и диффузии фермента в межмолекулярное пространство композиции, поэтому наблюдается поэтапное изменение массы образцов, связанное с протеканием последовательных процессов набухания и вымывания. Длительная выдержка образцов с высоким содержанием растительного наполнителя (более 30-40 дней) сопровождалась потерей их массы, причём, чем больше содержание ДМ, тем больше коэффициент водопоглощения в ферментной среде и тем на более ранних сроках наблюдается снижение коэффициента водопоглощения, а затем – и потеря массы самих образцов. Данные факты можно понять, если учесть, что используемая в качестве ферментного препарата «Целлюлаза» способна к разрыву  $\beta$ -гликозидной связи, имеющейся в целлюлозе – основном компоненте выбранных растительных наполнителей. Таким образом, разрушение целостности образцов вызывается протекающим процессом гидролитической деструкции.

Скорость водопоглощения в растворе ферментного препарата определена графически путём проведения касательной к кривым водопоглощения, приведённых на рисунке 1; скорость водопоглощения в данный момент времени равна по абсолютной величине тангенсу угла наклона касательной. Результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1. – Скорость водопоглощения (V) образцами полимерных композитов на основе вторичного ПП с разной степенью наполнения ДМ при выдержке в растворе ферментного препарата «Целлюлаза» концентрацией 0,2 г/л (20 °С).

Содержание ДМ, м.ч.	V водопоглощения с 3 по 7 сутки выдержки в растворе ферментативного препарата, $\Delta m/(m_0 \cdot \tau)$ , Сутки <sup>-1</sup>	V водопоглощения с 7 по 14 сутки выдержки в растворе ферментного препарата, $\Delta m/(m_0 \cdot \tau)$ , Сутки <sup>-1</sup>
5	0,05	0,03
15	0,30	0,13
30	0,68	0,39
50	1,23	0,69

Максимальной скоростью водопоглощения характеризуется образцы полимерных композитов, содержащие в качестве природного наполнителя растительного происхождения мякину. Вероятно, данный факт можно объяснить меньшим размером частиц мякины и большим содержанием гемицеллюлозы, которая имеет относительно невысокую степень полимеризации (50 – 200 моносахаридных остатков) и менее упорядоченную по сравнению с целлюлозой надмолекулярную структуру. Следовательно, скорость диффузии водной среды и степень водопоглощения частицей гемицеллюлозой в составе материала должна быть выше.

Образцы полимерных композиционных материалов на основе вторичного ПП с наполнителями растительного происхождения, выдерживаемые в растворе ферментного препарата «Целлюлаза», с определённой периодичностью сушились при температуре не более 80°C и определялось относительное изменение их массы. Для всех образцов наблюдается ускорение потери массы по сравнению с исходными ненаполненными материалами, причём потеря массы после выдерживания в растворе ферментного препарата в течение 60 суток незначительна даже для образцов с высокими степенями наполнения, и не превышает 6 %. Таким образом, при составлении технических условий на изделия, произведённые из полимерных композиций на основе вторичного полипропиленового сырья и древесной муки следует указать низкую склонность к гидролитической деструкции.

#### Литература

1. Платэ А.Н. Итоги науки и техники. Том 10., 1976, 207 с.
2. Базунова М.В., Хлобыстова Е.С., Васюкова А.С., Кулиш Е.И., Захаров В.П., Фахрединов Р.К., Галиев Л.Р. // Вестник Башкирского университета. 2018. Т. 23. № 1. С. 56-60.

© Калеева В.В., 2024

УДК 662.749.33

### МЕТОДИКА ВЫДЕЛЕНИЯ ПЕКА ИЗ СМОЛЫ ПОЛУКОКСОВАНИЯ СРЕДНЕМЕТАМОРФИЗИРОВАННОГО УГЛЯ

Ковалев Р.Ю., Никитин А.П.

*Федеральное государственное бюджетное научное учреждение  
«Федеральный исследовательский центр угля и углехимии Сибирского  
отделения Российской академии наук», Кемерово, Россия.*

**Введение.** Каменноугольный пек, представляет из себя как остаток разгонки каменноугольной смолы (КУС) на фракции: легкая фракция ( $T < 170^{\circ}\text{C}$ ); фенольная фракция ( $T=170-210^{\circ}\text{C}$ ); нафталиновая фракция ( $T=210-230^{\circ}\text{C}$ ); поглотительная фракция ( $T=230-270^{\circ}\text{C}$ ); антраценовая фракция ( $270-360^{\circ}\text{C}$ ); пековая фракция или каменноугольный пек ( $T < 360^{\circ}\text{C}$ ). При разгонке КУС можно получить среднетемпературные и электродные пеки [1-2]. Для расширения сырьевой базы получения пеков, особый интерес представляет смола полукоксования (СПК).

*Цель работы:* Получение пека из смолы полукоксования путем разгонки ее до  $360^{\circ}\text{C}$ , определение температуры размягчения полученного пека.

**Описание материалов и методик.** В данной работе для получения пека использовалась СПК угля марки Ж (ш.Юбилейная), полученная в работе

при температуре 650 °С в инертной среде [3]. СПК имела следующие характеристики: элементный состав (С-83,5%; Н-6,37%; О+S+N-10,13%); компонентный состав (масло -27,3%; смола -66,9%; асфальтены-5,8%) [3].

Для выделения пека, СПК разгоняли с помощью установки на основе аппарата АРН-Лаб 03 (рис.1).

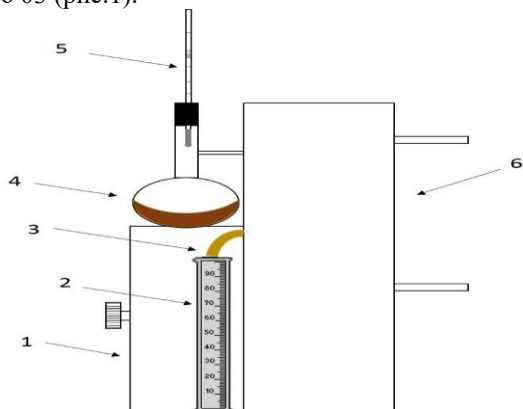


Рис.1 Установка для выделения пека на основе аппарата АРН Лаб 03 (вид сбоку). 1-передняя панель аппарата АРН-Лаб 03, со встроенной системой управления. 2-мерный цилиндр. 3-сливной кран. 4-колба Вюртца с СПК. 5-термометр. 6-холодильник.

Установка, созданная на базе аппарата АРН-Лаб 03, который в свою очередь состоит из передней панели (1), в которую входит блок управления, включающий в себя кнопки включения прибора, включения нагрева и подсветки, бесступенчатый регулятор мощности нагрева, регулятор высоты столика для размещения колбы с пробой. Столик имеет круглое отверстие в которую помещается дно колбы и через которое осуществляется нагрев. Также аппарат АРН –Лаб 03 состоит из холодильника (6), охлаждение которого до температуры ниже 5°С, осуществляется с помощью холодной воды. Аппарат АРН-Лаб 03 имеет следующие технические характеристики: температурный диапазон 35-400°С, мощность электронагревательного элемента 700 Вт. В качестве реактора использовалась круглодонная колба Вюртца (4) объемом 120 мл. Для выделенного определялась температура размягчения, зольность. Выход продукта определялся как процентное отношения массы выделенного к массе СПК.

**Описание эксперимента и результаты.** Нагрев смолы в колбе Вюртца (4), происходил с помощью встроенной электронагревательной системы, фракции СПК выходили в виде газов. Температура газов измерялась с помощью термометра (5), далее газы из колбы поступали в холодильник (6) где охлаждались до жидкого состояния. Выделенные фракции отбирались мерным цилиндром (2).

Разгон СПК проходил до температуры 360°C, был получен пек с  $T_p=51^\circ\text{C}$ . Выход пека -11,3%, зольность пека 0,17%.

Выводы:

1. Отработана методика получения пека путем разгонки смолы полукоксования на аппарате АРН-Лаб 03.

2. Был получен мягкий пек ( $T_p=51^\circ\text{C}$ ), путем разгонки смолы полукоксования среднеметаморфизированного угля марки Ж.

3. Выход пека был 11,3%.

*Работа была выполнена по проекту № 121031500512-7 Государственного задания ФИЦ УУХ СО РАН.*

#### Литература

1. Козлов, А.П. Перспективы получения инновационных продуктов из каменноугольной смолы ПАО "Кокс" / А. П. Козлов, Т. Г. Черкасова, С. В. Фролов и др. // Кокс и химия. – 2020. – № 7. – С. 35-41.

2. Чешко, Ф.Ф. О некоторых особенностях низкопириролизированных каменноугольных смол / Ф. Ф. Чешко, Н. П. Скрипченко, Л. П. Банников и др.// Кокс и химия. – 2014. – № 6. – С. 34-38.

3. Гаврилюк, О. М. Получение и анализ состава каменноугольной смолы из ископаемых углей средней стадии метаморфизма / О. М. Гаврилюк, Е. С. Михайлова, и др.// Углекимия и экология Кузбасса: Сборник тезисов докладов XI Международного Российско- Казахстанского Симпозиума. – Кемерово: ФИЦ СО РАН, 2022. – С. 26.

© Ковалев Р.Ю., Никитин А.П., 2024

УДК 662.749.33

## ПОЛУЧЕНИЕ ПЕКОВ ИЗ СМОЛЫ ПОЛУКОКСОВАНИЯ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ СВОЙСТВ

Ковалев Р.Ю., Никитин А.П.

*Федеральное государственное бюджетное научное учреждение  
«Федеральный исследовательский центр угля и углекими СО РАН»,  
Кемерово, Россия*

*Введение.* Пек полученный из смолы полукоксования (СПК) имеет перспективу в получении электродного пека [1], имеет широкое применение в качестве материалов для дорожного строительства [2], в качестве брикет связующего для угольно шихты при коксовании углей [3]. Пек из СПК выделяют методом разгонки при  $T>300^\circ\text{C}$  [4-9], также показана возможность выделение пека из СПК методом экстрагирования с помощью толуола [10].

*Выделение пеков из СПК углей, торфа и сланцев.* СПК полученные из торфа и из торфяного топливно-плавильных материала (ТПМ) разгоняли на фракции до 330°C, установлено, что в пеке полученного из СПК (торфа) фенолов было 4,8% а в пеке из СПК (ТПМ)-6,7% [4]. СПК получали путем

полукоксования углей при  $T=500-550^{\circ}\text{C}$  и дополнительно при  $T=700-750^{\circ}\text{C}$ , выделенную смолу разгоняли до  $320^{\circ}\text{C}$ , был получен пек с  $T_p=59^{\circ}\text{C}$  [5]. Был получен пек с  $T_p=34^{\circ}\text{C}$ , из СПК бурого угля, путем ее разгонки до  $350^{\circ}\text{C}$  [6]. Из СПК получали следующие пеки: пек с  $T_p=65^{\circ}\text{C}$  получали путем дистилляции до  $405^{\circ}\text{C}$ ; пек с  $T_p=56^{\circ}\text{C}$ , путем дистилляции до  $390^{\circ}\text{C}$  [7]. Из СПК бурых углей Лельчицкого углепроявления (полученные полукоксованием при  $T=550^{\circ}\text{C}$ ) получали пеки, выходы пеков составляли величины: 37,59%; 18,2%; 13,07% [8]. Выход пека при разгонке до  $350^{\circ}\text{C}$  СПК (режим полукоксования и отбора смолы  $T=450-550^{\circ}\text{C}$ ) бурого угля Канско-Ачинского бассейна (месторождение Березовское), составлял величину 45,25% [9]. Сланцевую СПК полученную при  $T=560^{\circ}\text{C}$ , разгоняли до  $410^{\circ}\text{C}$ , был получен пек с  $T_p=55^{\circ}\text{C}$  [11]. Были получены среднетемпературные и связующие пеки из сланцевой СПК путем разгонки и выдержки при  $T=360-380^{\circ}\text{C}$  [12].

*Получение высокотемпературных пеков из СПК.* Определены перспективы получения высокотемпературных пеков из смолы полукоксования [3,13]. Пек с  $T_p=159^{\circ}\text{C}$  был получен путем разгонки тяжелой СПК до температуры  $410^{\circ}\text{C}$  при остаточном давлении 2-3 кПа [3]. Пек с  $T_p=155^{\circ}\text{C}$ , получали путем дистилляции до  $420^{\circ}\text{C}$  и выдержкой в течение 1 часа [7]. От смолы СПК бурого угля отгоняли фракции до  $250^{\circ}\text{C}$ , далее остаток подвергался термоокислению при  $T=200^{\circ}\text{C}$  в течение 8 часов в присутствии катализатора (железных солей органической кислоты) [13].

*Закключение.* При анализе литературных данных, установлено, что пеки из смолы полукоксования, полученные путем разгонки –низкотемпературные (мягкие) как в случае каменноугольной смолы, так и сланцевой смолы. Высокотемпературные пеки могут быть получены путем термоокисления смолы полукоксования так и вакуумной дистилляцией.

*Работа выполнена в рамках государственного задания ФГБНУ «Федеральный исследовательский центр угля и углехимии Сибирского отделения Российской академии наук» проект № 121031500512-7.*

#### Литература

1. Барнаков, Ч.Н. Влияние таллового масла и ультразвуковой обработки на получение пека из смолы полукоксования или антраценовой фракции / Ч.Н. Барнаков, С.Н. Вершинин и др. // Кокс и химия. -2015.- № 10.- С. 33-
2. Пактер, М.К. Перспективы получения дорожных органических вяжущих на основе твердых горючих ископаемых. II. Смолы полукоксования/ М.К. Пактер, В.И. Братчун, и др // Вестник Донбасской национальной академии строительства и архитектуры. – 2011. – № 1(87) .– С. 26-39.
3. Вихорев, А.А. Рациональное использование пека из смолы полукоксования / А.А. Вихорев, В.Н.Кротова, и др //Кокс и химия. – 1990. – № 10. – С.32-33.

4. Страмковская, К.К. Исследования смолы полукоксования торфянных топливно-плавильных материалов/ К.К. Страмковская, Л.А. Пономарева, и др.//Известия ТПИ.- 1974.-Т.198. -С. 44-47.
5. Иманбаев, С.Ш. Расчёт структурно-химических показателей для каменноугольной смолы / С.Ш. Иманбаев, М.И. Байкенов, и др. // Вестник Карагандинского университета. Серия Химия. - 2010. - №2(58). – С. 148-153.
6. Лукьянов, Н.В. Буроугольный пек - продукт термообработки высококипящих фракций смолы полукоксования бурых углей Канско-Ачинского бассейна в реакторе с твердым теплоносителем и направления использования полукокса / Н. В. Лукьянов, А. М. Сыроежко, и др.// Кокс и химия. – 2017. – № 6. – С. 19-24.
7. Пат. № 2601766 Р.Ф. Способ получения компаундного электродного пека для изготовления углеродных материалов и изделий из них/Фризоргер В. К., Пингин В. В., Маракушина Е. Н и др.; заяв.25.06.15; опубл. 11.10.16. Бюл. № 31. С.10.
8. Состав смолы термохимического разложения бурых углей Лельчицкого углепроваляния/ П. Л. Фалюшин и др. // Труды БГТУ. – 2011. – № 4. – С. 114-118.
9. Лукьянов, Н.В. Закономерности полукоксования бурых углей Канско-Ачинского бассейна в реакторе с твердым теплоносителем и направления использования дистиллятных фракций смолы / Н. В. Лукьянов, А. М. Сыроежко, и др. // Кокс и химия. – 2017. – № 4. – С. 11-21.
10. Sun, Z. Characterization of asphaltene isolated from low-temperature coal tar/ Z. Sun, D. Li, et all. // Fuel Processing Technology.- 2015.- V.138.- Pp. 413-418.
11. Лапидус, А.Л. Исследование пека и кокса, полученных из смолы полукоксования высокосернистых горючих сланцев волжского бассейна / А. Л. Лапидус, Н. Ю. Бейлина, и др.// Химия твердого топлива. – 2020. – № 1. – С. 26-29.
12. Чалик, С.М. Исследование сланцевых пеков в качестве связующего для производства анодной массы/. С.М. Чалик, В.А. Свердлин, и др // Химия твердого топлива. – 1977. – № 2. – С. 84-93.
13. А.С. № 888785/23-4. СССР. Способ получения высокотемпературного пека/Иванов К.И., Королев Е.С., и др.; заявлено 17.3.1964; опубликовано 5.2.1965. Бюл. №3.

© Ковалев Р.Ю., Никитин А.П., 2024

УДК 541.64

## ОСОБЕННОСТИ ДЕСТРУКЦИИ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА, ПЛАСТИФИЦИРОВАННОГО ДИИЗОНОНИЛАДИПИНАТОМ

Королев И.Н., Нафикова Р.Ф., Ахметханов Р.М.

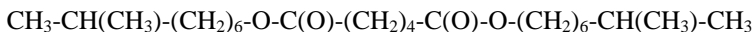
*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

На сегодняшний день поливинилхлорид (ПВХ) по объемам производства входит в тройку самых крупнотоннажных термопластов. Основная часть производимого полимера перерабатывается в различные пластифицированные материалы с использованием широкого ассортимента пластификаторов [1].

Для повышения морозостойкости пластифицированных ПВХ материалов часто используют диоктиладипинат (ДОА) добавлением к

базовому пластификатору диоктилфталату (ДОФ), либо когда это необходимо полной заменой ДОФ. Диоктиладипинат, в отличие от ДОФ, включен в список безопасных пластификаторов, разрешенных к применению при контакте с пищевыми продуктами. По этой причине помимо получения специальных материалов с повышенной морозостойкостью ДОО используется в производстве: пленок для пищевых упаковок, обуви, ПВХ профилей, шлангов, искусственной кожи, линолеума, детских игрушек, натяжных потолков, морозо- и светостойких нитролаков, многих других изделий повседневного употребления.

Из других сложных эфиров адипиновой кислоты в качестве замены диоктиладипината можно использовать диизонониладипинат (ДИА,  $C_{24}H_{46}O_4$ ) следующего строения:



Диизонониладипинат представляет собой высококипящую жидкость, практически не растворимая в воде, при обычных условиях устойчивая к гидролизу. В сравнении с ДОО диизонониладипинат обладает рядом преимуществ. Он характеризуется меньшей летучестью, меньшей токсичностью и, что не маловажно, меньшей стоимостью.

С целью сравнения свойств диизонониладипината с диоктиладипинатом и диоктилфталатом изучены закономерности термического и термоокислительного дегидрохлорирования соответствующих ПВХ пластикаторов.

В условиях термической деструкции ПВХ в присутствии ДИА при  $175^{\circ}C$  за счет известного сольватационного эффекта наблюдается снижение скорости дегидрохлорирования полимера, при этом ингибирующий эффект для ДИА меньше чем у ДОО. При содержания ДИА 10 масс.ч./100 масс.ч. ПВХ скорость дегидрохлорирования полимера достигает предельных значений и сохраняется при дальнейшем увеличении содержания пластификатора.

Показано, при термоокислительной деструкции ПВХ, пластифицированного ДИА, ДОО и ДОФ в концентрациях до 40 масс.ч./100 масс. ч. ПВХ все сложные эфиры ускоряют распад ПВХ. По ускоряющему влиянию пластификаторов на скорость дегидрохлорирования полимера их можно расположить в ряд ДИА > ДОО > ДОФ. Очевидно, это связано с более легкой окисляемостью диизонониладипината по сравнению с другими сложными эфирами, а как известно продукты окисления сложных эфиров ускоряют распад ПВХ пластика [2].

Изучена антиокислительная активность элементной серы и фуллерена  $C_{60}$  в условиях термоокислительного разложения ПВХ, пластифицированного ДИА. Показано, что элементная сера и фуллерен  $C_{60}$



значительно замедляют скорость распада ПВХ пластиката и по антиокислительной эффективности незначительно уступают промышленному антиоксиданту дифенилолпропану.

Антиокислительная активность элементной серы и фуллерена  $C_{60}$  в отношении распада ПВХ пластикатов можно связать с известным эффектом «эхо стабилизации».

При изучении действия смесей элементной серы и фуллерена  $C_{60}$  на термоокислительную деструкцию ПВХ, пластифицированного ДНА при соотношении компонентов 1:1 выявлен синергизм по показателю скорость элиминирования НСІ.

Проявление синергизма при сочетании элементной серы и фуллерена  $C_{60}$  при термоокислительной деструкции ПВХ пластиката можно объяснить различным механизмом действия каждого из антиоксидантов.

Высокая антиокислительная эффективность серы и фуллерена  $C_{60}$  в ПВХ пластикатах подтверждена на модельных рецептурах содержащие термостабилизаторы-акцепторы НСІ по показателю «время термостабильности».

Проведена оценка реологических свойств модельных ПВХ – пластикатов по показателю текучести расплава (ПТР). Показано, что в широком интервале концентраций пластифицирующая способность диизонилдипината и диоктиладипинат практически не отличаются и заметно превышают эффективность диоктилфталата.

Таким образом на основании полученных результатов можно констатировать, что ДНА можно использовать для получения пластифицированных материалов на основе ПВХ взамен ДОА.

#### Литература

1. Уилки Ч., Саммерс Дж., Даниэлс Ч. Поливинилхлорид. // Пер. с англ. под ред. Г.Е. Заикова. СПб.: Профессия 2007. 728 с
2. Минскер К.С., Абдуллин М.И. Эффект “эхо-стабилизации” при термодеструкции поливинилхлорида. Доклады АН СССР. – 1982. – Т. 263. – №1. – С. 140-143.

© Королев И.Н., Нафикова Р.Ф., Ахметханов Р.М., 2024

УДК 622.24.062

ЗАКОНОМЕРНОСТИ ГИДРОЛИЗА ПОЛИМЕРОВ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В  
СОСТАВЕ БУРОВЫХ РАСТВОРОВ

Кузьмин Д.А., Валиева О.И., Борисов И.М.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет,*

*Уфа, Россия*

*РН БашНИПИНефть*

В составе промывочных жидкостей при бурении нефтяных скважин используются различные полимерные добавки для создания требуемых эксплуатационных свойств. Промывочные буровые жидкости представляют собой многокомпонентные системы, содержащие в своем составе также достаточно агрессивные компоненты. В процессе приготовления и применения промывочных жидкостей полимеры могут подвергаться, в частности, гидролизу. В связи с этим в настоящей работе на модельных системах изучен кислотный гидролиз полиакриламида и полиакрилата натрия.

В данной работе в водный раствор полимера с массовой долей 0,25 % добавляли разное количество соляной кислоты, варьируя значение pH раствора, выдерживали в течение 30 минут, а затем потенциометрически определяли объем израсходованной кислоты с помощью раствора гидроксида натрия. Результаты представлены в таблице.

Таблица

pH раствора полимера	5	3,8	2,8	2,2
Степень гидролиза Poly mud H, %	8.14	9.65	10.69	30.72
Степень гидролиза Seurvey марки FL, %	20.95	25.6	33.7	58

Как следует из данных таблицы полимеры в разной степени подвергаются гидролизу. Однако общей тенденцией сохраняется возрастание степени гидролиза с увеличением концентрации добавленной кислоты.

Исходные образцы полимеров, не подвергнутые гидролизу имели следующие молекулярные массы: Poly mud H - 3653412 у.е; Seurvey марки FL - 206230 у.е.

© Кузьмин Д.А., Валиева О.И., Борисов И.М., 2024

УДК 622.24.062

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ГИДРОЛИЗА ПОЛИМЕРОВ НА  
РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА БУРОВЫХ РАСТВОРОВ

Кузьмин Д.А., Валиева О.И., Борисов И.М.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет,*

*Уфа, Россия*

*РН БашНИПИНефть*

При выборе состава промывочных жидкостей для бурения нефтяных скважин к используемым полимерным добавкам предъявляются такие требования, чтобы их свойства варьировались в строго определенных пределах. Более того, физико-химические свойства полимеров могут изменяться в процессе применения промывочных жидкостей. В настоящей работе изучено влияние процесса гидролиза полиакриламида и полиакрилата натрия на реологические свойства растворов, моделирующих реально применяемые промывочные растворы.

При приготовлении промывочных буровых растворов, как правило, используется минерализованная вода. В связи с этим в работе изучена совместимость негидролизованного и гидролизованного полимеров с водными растворами, содержащими  $\text{CaCl}_2$ ,  $\text{NaCl}$  и смесь  $\text{CaCl}_2 + \text{NaCl}$ . В растворе хлорида натрия растворимость сохраняется вплоть до введения 10 % массовых соли. В среде раствора хлорида кальция в концентрации 1, 5 и 10 % масс. появляется мелкий осадок даже при концентрации полимера 0,25 % масс. В более концентрированных растворах (0,5 и 1,0 % масс.) полимеров Poly mud H и Seurvey марки FL наблюдается образование белого осадка в большом количестве.

Растворимость гидролизованных полимеров сохраняет свойства совместимости с растворами солей. Гидролизованные полиакрилат натрия и полиакриламид сохраняют растворимость в среде раствора хлорида натрия. В присутствии в растворе ионов кальция образуется белый осадок.

© Кузьмин Д.А., Валиева О.И., Борисов И.М., 2024

УДК 541.64

О ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ РАСТВОРОВ  
ПОЛИСАХАРИДОВ В КАЧЕСТВЕ ЗАМЕНИТЕЛЯ СИНОВИАЛЬНОЙ  
ЖИДКОСТИ

Лаздин Р.Ю.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Остеоартрит — болезненное дегенеративное и воспалительное заболевание. В настоящее время лекарства от этого заболевания не существует, и фармакологические методы лечения ограничиваются

облегчением симптомов. Соответственно, существует потребность в новом эффективном и безопасном лечении этого заболевания с помощью вязкоструктурных добавок — по сути восстановления нормальных реологических свойств синовиальной жидкости. В последние годы для этих целей обычно использовалась гиалуроновая кислота, но она имеет некоторые ограничения, например, короткое время пребывания в полости сустава. Недавно исследования *in vitro* показали, что хитозан и его производные могут способствовать экспрессии компонентов хрящевого матрикса и уменьшать продукцию воспалительных и катаболических медиаторов хондроцитами. Таким образом, хитозан представляет собой интересный полимер для создания синовиальной жидкости для восстановления повреждений хряща.

О вязко-эластичных свойствах полимерных систем, которые способны выступать в качестве заменителей суставной жидкости можно судить исходя из двух ключевых параметров: модулю потерь и модулю накоплений [1]. Синовиальная жидкость человека при небольшой нагрузке (~0,5 Hz) должна иметь большие значения  $G''$ , а при большой — (~2,3-2,5 Hz) —  $G'$ . Время релаксации — 0,23 с. При беге такая жидкость должна защитить суставы от повреждения, а при ходьбе — смазывать их.

Проведенные исследования реологических свойств растворов полисахаридов показали [1], что они обладают удовлетворительными реологическими характеристиками, позволяющие использовать хитозан и его производные в качестве заменителя синовиальной жидкости.

#### Литература

1. Базунова М.В., Шуршина А.С., Чернова В.В., Лаздин Р.Ю., Кулиш Е.И. Влияние реологических характеристик растворов смесей натриевых солей п-сукцинилхитозана и карбоксиметилцеллюлозы на некоторые свойства материалов, получаемых из этих растворов // Высокомолекулярные соединения. Серия Б. 2023. Т. 65. № 1. С. 52-60.

© Лаздин Р.Ю., 2024

УДК 691.175.5/8

#### СРАВНЕНИЕ РАЗЛИЧНЫХ МАРОК АБС-ПЛАСТИКА ПОСРЕДСТВАМ ТЕРМОГРАВИМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА

Любина Е.П., Ионова А.Д., Яковлев И.Д.  
ФБГОУ ВО «КНИТУ», Казань, Россия

В работе методом термогравиметрического анализа (ТГА) рассматривается, изменения массы образца в зависимости от времени или температуры при нагревании в соответствии с выбранной температурной программой в заданной газовой атмосфере, АБС-пластики различных производителей.

В качестве материала используются 6 видов АБС-пластиков разных производителей: 1. Cyberfiber белого цвета; 2. Пластик узловая желтого цвета; 3. Пластик узловая синего цвета; 4. Cyberfiber черного цвета; 5. Пластик узловая бронзового цвета; 6. Рес натурального цвета.

Анализ данных ТГА показывает, что образцы содержат наполнитель. В образце №2 (Пластик узловая желтого цвета) используется органический краситель, который разлагается в температурном интервале исследования. Остальные образцы характеризуются остаточным содержанием пигмента или наполнителя.

Термическая стойкость всех образцов одного порядка. Все интенсивные деструктивные процессы начинаются при температурах выше 270°C. Поэтому рекомендованный средний диапазон температур для печати у всех производителей варьируется от 220 до 270°C

© Любина Е.П., Ионова А.Д., Яковлев И.Д., 2024

УДК 541.64

## ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ АМИКАЦИНА НА ВЯЗКОСТЬ ПЕКТИНА

Минагина А.А., Лаздин Р.Ю.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

В последние годы происходит активное изучение полисахаридов с целью их возможного применения в различных отраслях промышленности, таких как пищевая, косметическая, фармацевтическая и медицинская. Среди полисахаридов особое внимание привлекает пектин, который представляет собой растительный полисахарид, обладающий превосходными свойствами, среди которых биосовместимость, биodeградируемость, противовоспалительные свойства, способность к формированию гелей, пленочных образцов и т.д. Все это предопределило тот факт, что пектин может использоваться в качестве основы для создания различных лекарственных форм с включенными биологически активными соединениями, например, антибиотиками или гемостатиками. Но при создании таких лекарственных форм необходимо учитывать, что пектин может вступать с ними в различные взаимодействия, что повлияет на свойства формируемых лекарственных форм. Таким образом, целью данной работы является изучение влияния вводимых лекарственных веществ на вязкость растворов пектина.

В данной работе в качестве объектов исследования был выбран пектин цитрусового происхождения производства SIGMA-ALDRICH и антибиотик аминогликозидного ряда – сульфат амикацина производства ОАО «Синтез». Растворы пектина получали путем растворения в бидистиллированной воде.

В ходе исследований было показано, что введение амикацина в раствор пектина приводит к целому ряду изменений. Во-первых, имеет место

повышение вязкости вследствие введения лекарственного вещества. Во-вторых, введение амикацина приводит к существенному росту упругой составляющей вязкости. В-третьих, имеет место увеличение предела текучести. При этом, чем выше концентрация пектина в растворе, тем сильнее наблюдаемый эффект.

Таким образом, можно утверждать, что амикацин выполняет роль модификатора полимерной матрицы. Вероятно, это связано с тем, что амикацин является низкомолекулярным электролитом, а пектин, представляет собой полиэлектролит (полианион).

© Минагина А.А., Лаздин Р.Ю., 2024

УДК 678.01:541.68

## ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ГИДРОКСИДА АЛЮМИНИЯ НА РАЗРУШАЮЩЕЕ НАПРЯЖЕНИЕ КОМПОЗИТОВ PP-R/PPH-g- МАН/Al(OH)<sub>3</sub>

Мустафаева Ф.А., Кахраманов Н.Т., Абдалова С.Р.

*Институт Полимерных Материалов Министерства Науки и Образования  
Азербайджанской Республики, Сумгаит, Азербайджан*

Полипропилен является наиболее широко используемым полимером в различных областях благодаря своей доступности, отличной технологичности и относительно низкой стоимости. Однако его высокая воспламеняемость ограничивает применение. Для повышения его огнестойкости и дымоподавления в полипропилен применяется множество видов антипиренов, одним из которых является гидроксид алюминия [1, 2]. Однако, поскольку полипропилен не включает в себя никакой полярной группы в своей основной цепи, трудно получить гомогенную дисперсию гидроксида алюминия в полимерной матрице полипропилена. Важно увеличить содержание наполнителя без потери механических характеристик композитов.

Одним из наиболее эффективных решений для предотвращения образования агломератов в системах является использование компатибилизатора или связующего агента. Компатибилизаторы используются для уменьшения межфазного натяжения и увеличения межфазной адгезии между несмешивающимися фазами. Различные компатибилизаторы и добавки были оценены для улучшения взаимодействия между гидроксидом алюминия и полипропиленом. Обычно используемые компатибилизаторы представляют собой полиолефины, функционализированные реакционноспособными группами [3].

В данной работе мы изучили влияние содержания гидроксида алюминия на разрушающее напряжение в присутствии компатибилизатора, гомополипропилена, привитого малеиновым ангидридом PPH-g-МАН

(Exxelor™ PO 1020). PPH-g-МАН содержит функциональные группы малеинового ангидрида, которые значительно увеличивает полярность и, таким образом, улучшают взаимодействие полипропилена (статистический сополимер полипропилена PP-R, Torilene® R200P) с гидроксидом алюминия и дисперсию наполнителя в полимерной матрице. Уровень малеинового ангидрида находился в пределах от 0.5 до 1.0 мас.%. PPH-g-МАН способствует дисперсии и повышению совместимости между полипропиленом и гидроксидом алюминия. Улучшение совместимости приводит к улучшению механических свойств композитов.

На рисунке 1 приводятся результаты исследования влияния содержания  $\text{Al}(\text{OH})_3$  на разрушающее напряжение композиционных материалов на основе PP-R/PPH-g-МАН/ $\text{Al}(\text{OH})_3$ . При более высоком содержании  $\text{Al}(\text{OH})_3$  в композитах взаимодействие наполнитель-наполнитель усиливается, что приводит к агломерации частиц. Но как видно из рисунка, с увеличением количества наполнителя разрушающее напряжение практически не изменился. Полученные результаты указывает на то, что полипропилен упрочняется за счет равномерного диспергирования  $\text{Al}(\text{OH})_3$  в матрице. Это также объясняется усилением взаимодействия полимер-наполнитель, добавление компатибилизатора увеличивает взаимодействие.

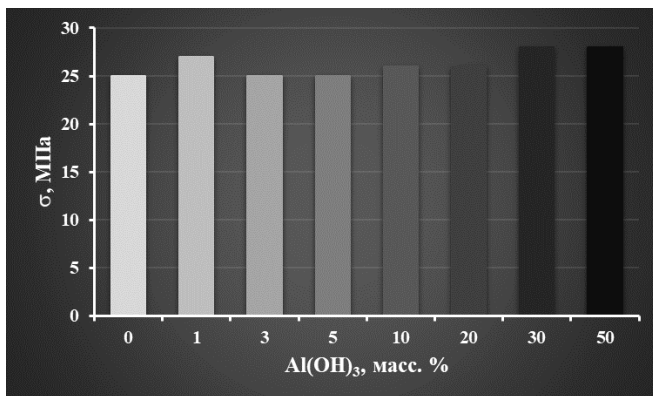


Рис. 1. Влияние содержания  $\text{Al}(\text{OH})_3$  на разрушающее напряжение композиционных материалов на основе PP-R/PPH-g-МАН/ $\text{Al}(\text{OH})_3$ .

#### Литература

1. Parida M.R., Mohanty S., Biswal M., Nayak S.K., Rai S. Influence of aluminum trihydrate (ATH) particle size on mechanical, thermal, flame retardancy and combustion behavior of polypropylene composites // Journal of Thermal Analysis and Calorimetry. 2023. –V.148. –P. 807–819.

2. Qin Z., Li D., Li Q., Yang R. Effect of nano-aluminum hydroxide on mechanical properties, flame retardancy and combustion behavior of intumescent flame retarded polypropylene // *Materials & Design*. 2016. –V. 89. –P. 988–995.
3. Sabaruddin F.A., Samat N. Effect of coupling agent on the mechanical properties of flame retardant PP/ATH nanocomposites // *Advanced Materials Research*. 2013. –V. 812. –P. 241–245.

© Мустафаева Ф.А., Кахраманов Н.Т., Абдалова С.Р., 2024

УДК 541.6

О КОНФОРМАЦИОННО-НАДМОЛЕКУЛЯРНОМ СОСТОЯНИИ В  
РАСТВОРАХ ПОЛИСАХАРИДОВ И ИХ СМЕСЕЙ В ПРИСУТСТВИИ  
ЛЕКАРСТВЕННОГО ВЕЩЕСТВА ЭЛЕКТРОЛИТНОЙ ПРИРОДЫ

Набутова К.В., Базунова М.В., Яхина Г.С.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Полимерные биологически-активные системы перспективны при использовании во многих областях жизнедеятельности человека. При разработке способов получения такого рода продукции и рекомендаций по её применению огромную роль играют сведения о сорбционных, физико-механических, транспортных и др. свойствах.

Поэтому, в качестве основы для создания биологически-активных систем перспективным представляется использование аминополисахарида хитозана и его производных, например, натриевой соли N-сукцинила хитозана (СХТЗ), обладающих комплексом уникальных свойств. Однако, материалы на основе индивидуального СХТЗ не всегда имеют оптимальный комплекс эксплуатационных и технологических свойств [1].

Известно, что введение в растворы полимеров высокомолекулярных модификаторов позволит регулировать процесс структурообразования и варьировать свойства получаемых материалов. Поэтому исследование механизмов взаимодействия высокомолекулярных соединений различной природы между собой в водных растворах и в конденсированной фазе в настоящее время остается актуальным, так как позволяет целенаправленно управлять свойствами получаемых систем и упрощает выбор полимеров.

В данной работе в качестве высокомолекулярного модификатора раствора СХТЗ выбрана натрийкарбоксиметилцеллюла (КМЦ). Использование КМЦ обусловлено тем, что это доступный полимер, имеющий полиэлектролитную природу.

В связи с вышесказанным, целью данной работы явилось изучение влияния содержания (ЛВ) (цефатоксима в виде натриевой соли) на структурообразование и размер надмолекулярных образований в растворах СХТЗ, КМЦ и их смесей и на сорбционные свойства полученных на основе растворов ранозаживляющих пленок.



Как следует из данных, представленных в таблице 1, зависимость размеров агрегатов от содержания ЛВ в разбавленных растворах полисахаридов и их смесей имеет экстермальный вид: до концентрации ЛВ 0,05-0,075 моль/л он понижается, что легко объясняется сжатием макромолекулярных клубков из-за увеличения ионной силы раствора; при более высоких концентрациях ЛВ эффект подавления полиэлектролитного набухания не проявляется.

Таблица 1

Размер агрегатов  $r$ , нм, в растворах СХТЗ (0,5%), КМЦ (0,5%) и их смесей в присутствии ЛВ

№ пп	Вид полимерной матрицы	Содержание ЛВ в формовочном растворе, моль/л				
		-	0,025	0,05	0,075	0,1
1	СХТЗ	165	110	83	69	234
2	КМЦ	1703	1086	548	270	308
3	СХТЗ-КМЦ	853	234	195	110	220

По характеру зависимости вязкости более концентрированных растворов СХТЗ, КМЦ и их смесей от содержания ЛВ (рис. 1) видно, что во-первых, при смешении СХТЗ с КМЦ меняется степень структурированности раствора, а во-вторых степень структурированности раствора зависит от содержания ЛВ. Так, увеличение ионной силы раствора за счет введения ЛВ качества растворителя приводит как к изменению конформации макромолекул, так и к изменению степени агрегации макромолекул полисахаридов в растворе. Первое приводит к снижению вязкости, а второе – к ее повышению. В результате, в разбавленных растворах размер надмолекулярных образований уменьшается при увеличении ионной силы, а в более концентрированных – больше.

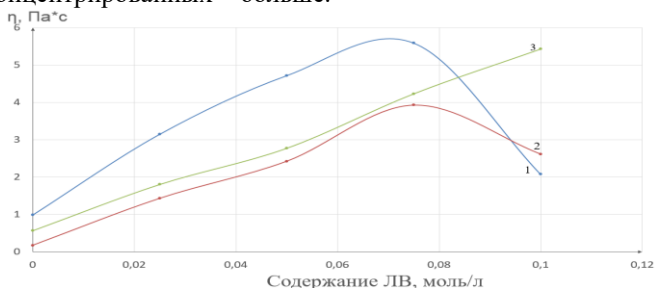


Рис. 1. Зависимость вязкости растворов СХТЗ концентрацией 1 % (1), КМЦ концентрацией 0,5 % (2) и их смесей (3) от содержания ЛВ

Различия в степенях структурированности растворов полисахаридов и их смесей в отсутствие и в присутствии ЛВ должны сохраняться и при переходе к конденсированным системам (пленкам). Например, изменения,

происходящие в структуре полимера, могут отражаться на процессе сорбции паров воды.

#### Литература

1. Базунова, М. В. Изучение особенностей формирования полиэлектролитных комплексов поливинилпирролидон-сукцинамид хитозана / М. В. Базунова, Р. А. Мустакимов, Е. И. Кулиш // Вестник Технологического университета. – 2019. – Т. 22, № 7. – С. 5-8.

© Набутова К.В, Базунова М.В., Яхина Г.С., 2024

УДК 678.01

### ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ВОЛОКНИСТОГО МИНЕРАЛА НА ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА

Нуралиева Г.Х., Кахраманов Н.Т.

*Институт Полимерных Материалов Министерства Науки и Образования, Сумгайыт, Азербайджан*

С целью улучшения комплекса свойств полиолефинов предпринимаются различные методы модификации их структуры и свойств, в результате чего представляется возможным существенным образом получить материалы с заранее заданными свойствами. Введение в состав полиолефинов различных типов наполнителей, пластификаторов, стабилизаторов, полимеров и олигомеров или физическая и химическая модификация структуры полимеров открыли перспективную возможность получения на основе одного полимера различных композитов или композиционных конструкционных материалов [1]. Полипропилен (ПП) является одним из широко используемых в промышленности полиолефинов. Высокие прочностные характеристики в сочетании с легкостью переработки методами экструзии и литья под давлением способствовали значительному расширению его производства. Вместе с тем, плохая совместимость с минеральными и природными наполнителями создали достаточно большие трудности, связанные с их механической модификацией. Одним из таких примеров является базальт, который также не проявляет склонность к смешиваемости с ПП. Поэтому, проведение исследований в направлении модификации, смешиваемости и получения высокопрочных композитов на основе ПП и базальта является важной и актуальной научно-технической проблемой.

Термомеханические исследования проводили интегральным методом, что позволяло исследовать влияние температуры на деформационные свойства композитов при постоянно действующей нагрузке. Этот метод отражают все возможные физические, физико-химические и химические

процессы, протекающие в образце в результате изменения температуры опыта и, тем самым, позволяет получить достоверную информацию о значимых для переработки полимеров температурных переходах. Термомеханические кривые охватывают всю температурную область существования полимера – стеклообразное (кристаллическое), высокоэластическое и вязкотекучее состояния. В результате проведенных исследований представляется возможным прогнозировать поведение полимерного материала в режиме расплава в материальном цилиндре перерабатывающего оборудования, а также в твердом состоянии в процессе эксплуатации при различных температурных условиях. При этом, весьма важное значение приобретают исследования, направленные на улучшение совместимости смешиваемых компонентов смеси с использованием компатибилизаторов. При изучении совместимости минерального наполнителя с полимерной матрицей метод термомеханического анализа становится весьма информативным для интерпретации деформационных процессов при различных вышеуказанных физических состояниях композита. Приводятся результаты исследования влияния температуры на деформацию композитов в зависимости от содержания базальта без компатибилизатора и с компатибилизатором. Анализ термомеханических кривых показал, что с увеличением содержания базальта от 1.0 до 30%масс. наблюдается изменение фазового перехода первого рода, выражающееся в повышении температуры размягчения композитов от 131 до 142оС. Это обстоятельство имеет важное значение, поскольку позволяет утверждать о том, что волокна базальта создают определенные стерические затруднения процессу термического распада в надмолекулярной структуре композита. И, чем больше содержание базальта, тем при более высокой температуре происходит размягчение надмолекулярной структуры композита. Дальнейшее повышение температуры в области вязкотекучего состояния характеризуется появлением искривлений на термомеханических кривых. Есть основание полагать, что появление нескольких искривлений на этих кривых свидетельствует о неравномерном распределении волокон в составе композита (ПЭВП+базальт). Совершенно очевидно, что волокна распределяются в межферролитной области ПЭВП. Высокая кристалличность исходной полимерной матрицы вносит определенные ограничения на процесс распределения наполнителя, что, по-видимому, может сопровождаться появлением дефектности в кристаллической фазе полимерной матрицы. Для того, чтобы всесторонне подойти к анализу и исследованию композитных материалов на основе ПП и базальта необходимо было осуществить поэтапный подход к исследованию их структуры и свойств. Для улучшения совместимости полимер-минеральной системы важно было использовать компатибилизаторы, представляющие собой химически модифицированный малеиновым ангидридом ПП, у

которых в боковой цепи присутствует полярные группы, а основная цепь относится к числу неполярных полимеров полиолефинового ряда. Полярные группы макроцепи компатибилизатора улучшают совместимость и адгезионный контакт на поверхности частиц наполнителя, а его основная полиолефиновая цепь совмещается с макроцепью ПП и может участвовать в формировании кристаллической фазы. Именно такой механизм работы компатибилизатора дает возможность добиться значительного улучшения прочностных характеристик композитов.

#### Литература

1. Алоев В.З., Жирикова З.М., Тарчокова М.А. Эффективность использования нанонаполнителей разных типов в полимерных композитах // Изв. вузов. Химия и хим. технология. –2020. –Т.63. №4. –С.81-85.

© Нуралиева Г.Х., Кахраманов Н.Т., 2024

УДК 544.773.432

### СИНТЕЗ ГИДРОГЕЛЕЙ В УСЛОВИЯХ ГЕТЕРОФАЗНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ В ОБРАТНОЙ ЭМУЛЬСИИ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ ПРОТИВОЭРОЗИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК

Пешкова А.С., Кушев П.О.

*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

Суперабсорбирующие полиакрилатные полимеры являются перспективными структурообразующими компонентами почвы для ее защиты от ветровой эрозии, для удерживания влаги в почве и улучшения ее физических свойств. Структура почвы стабилизируется за счет образования связи между анионными суперабсорбентами и катионными областями, находящимися в доменах на поверхности частиц почвы [1-3].

Дополнительное стабилизирующее действие оказывают связи, возникающие между анионными частицами полимера и поливалентными катионами в почве, образующиеся водородные связи и ван-дер-ваальсовы силы.

В данной работе был проведен ряд синтезов гидрогелей на основе акрилата калия, акриловой кислоты и акриламида, сшитых N,N'-метиленабисакриламидом. Синтезы проводились в условиях гетерофазной сополимеризации в обратной эмульсии, где в качестве эмульгатора выступал моностеарат сорбитан. Были оценены противоэрозионные характеристики полимерно-почвенных покрытий, образованных гидрогелевыми дисперсиями, их устойчивость к ультрафиолетовому излучению и влагоудерживающие свойства суперабсорбентов. В ходе исследования установлено, что полимерно-почвенные покрытия,

образованные гидрогелями на основе акрилата калия, акриловой кислоты и акриламида устойчивы к воздействию воздушных потоков, имеющих скорость до 38 км/ч и температуру ветра до 50 °С и разрушают спустя 30 минут воздействия УФ-лампой (ОКН-11). Прочность защитных покрытий повышается с увеличением молекулярной массы полимера. Также обнаружено, что данные гидрогели способны на 1 г полимера удерживать до 0,22 л жидкости. Установлено, что с увеличением содержания сшивающего агента влагоудерживающие свойства полимера снижаются.

#### Литература

1. Полиэлектrolитные гели для стабилизации песчаной почвы против ветровой эрозии / Панова И. Г., Ильясов И. В., Хайдапова В. В. [и др.]. // Высокомолекулярные соединения. Серия Б. – 2020. – Т. 62. – № 5. – С. 364–371.
2. Piasov L. et al. Weakly Cross-Linked Anionic Copolymers: Kinetics of Swelling and Water-Retaining Properties of Hydrogels // Polymers. – 2023. – Т. 15. – №. 15. – С. 3244.
3. Padmavathi N. C., Chatterji P. R. Structural characteristics and swelling behavior of poly (ethylene glycol) diacrylate hydrogels // Macromolecules. – 1996. – Т. 29. – №. 6. – С. 1976–1979.

© Пешкова А.С., Кушев П.О., 2024

УДК 622.24.062

### ЗАКОНОМЕРНОСТИ ГИДРОЛИЗА ПОЛИМЕРОВ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В СОСТАВЕ ПРОМЫВОЧНЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Родникова К.А., Борисов И.М.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа,  
Россия*

В составе промывочных жидкостей при бурении нефтяных скважин используются различные полимерные добавки для создания требуемых эксплуатационных свойств. Промывочные буровые жидкости представляют собой многокомпонентные системы, содержащие в своем составе также достаточно агрессивные компоненты. В процессе приготовления и применения промывочных жидкостей полимеры могут подвергаться, в частности, гидролизу. В связи с этим в настоящей работе на модельных системах изучен кислотный гидролиз полиакриламида разной марки.

В данной работе в водный раствор полимера с массовой долей 0,25 % добавляли разное количество соляной кислоты, варьируя значение pH раствора, а затем потенциометрически определяли объем израсходованной кислоты с помощью раствора гидроксида натрия. Результаты представлены в таблице.

Таблица

рН раствора полимера	5	2,8	2,2	1,8
Степень гидролиза Seurvey марки D1, %	0,097	0.157	0,396	0,240
Степень гидролиза Petro cap, %	0.033	0.064	0,212	0,078

Как следует из данных таблицы, разные марки полиакриламида, синтезированные разными производителями, в разной степени подвергаются гидролизу. Однако общей тенденцией сохраняется возрастание степени гидролиза с увеличением концентрации добавленной кислоты, но при достижении определенного значения она уменьшается. Также стоит отметить, что у двух марок акрилового полимера степень гидролиза имеет общую тенденцию, но численные значения отличаются.

Исходные образцы полимеров, не подвергнутые гидролизу имели следующие молекулярные массы: Seurvey марки D1- 12482700 у.е.; Petro cap - 10442500 у.е.

© Родникова К.А., Борисов И.М., 2024

УДК 541.64

## ГЕЛЕВЫЕ ЛЕКАРСТВЕННЫЕ ФОРМЫ НА ОСНОВЕ СУКЦИНИЛ ХИТОЗАНА

Рыбченко Д.Е.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Сукцинил хитозана (СХТЗ) представляет собой водорастворимое производное хитозана, являющегося природным полисахаридным полимером, полученным путём деацетилирования хитина - вещества, содержащегося в экзоскелете ракообразных. Благодаря различным полезным свойствам, таким как способность к биологическому разложению, биосовместимость, нетоксичность и антимикробная активность, СХТЗ привлек значительное внимание в области медицины. Уникальная химическая структура позволяет СХТЗ инкапсулировать и эффективно доставлять лекарства [1] в определенные участки организма. Такая система адресной доставки помогает повысить биодоступность и эффективность препарата, в то же время снижая возможные побочные эффекты. Кроме того, СХТЗ обладает антиоксидантными и противовоспалительными свойствами, а при местном применении он может способствовать восстановлению тканей, уменьшать воспаление и предотвращать инфекцию, что делает его полезным компонентом в составе раневых повязок, бинтов, а также хирургических имплантатов.

Получение гелевых форм на основе СХТЗ представляет собой многообещающую область исследований, которая может привести к

разработке новых материалов с уникальными свойствами и широким спектром применения. Для получения гелей на его основе применяются различные методы, которые позволяют контролировать структуру и свойства гелей (пористость, механическую прочность, термостабильность и водопоглощение): химическая модификация, гидрогелирование и физико-химическая сшивка. Такие гели могут быть использованы в различных областях, таких как биомедицина, фармацевтика, пищевая промышленность и технологии наноматериалов. Они могут служить в качестве носителей лекарственных веществ, материалов для тканевой инженерии, пищевых добавок и наполнителей для нанокompозитов.

В целом, СХТЗ является универсальным и ценным соединением в медицине с широким спектром применений, начиная от систем доставки лекарств и заканчивая заживлением ран и регенерацией тканей.

#### Литература:

1. Шуршина А.С., Галина А.Р., Лаздин Р.Ю., Чернова В.В., Кулиш Е.И. Влияние модифицирующих добавок на процесс высвобождения лекарственных веществ из жидких лекарственных форм // Химическая физика. 2021. Т. 40. № 7. С. 58-66.

© Рыбченко Д.Е., 2024

УДК 541.64

## СПОСОБЫ УМЕНЬШЕНИЯ ЖЁСТКОСТИ ПЛЁНОЧНЫХ ОБРАЗЦОВ НА ОСНОВЕ ПЕКТИНА

Саликаева С.В., Лаздин Р.Ю.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Полисахарид природного происхождения пектин является очень перспективным для применения в фармакологии и медицине. Причина – в комплексе полезных свойств, которыми обладает пектин. Биоразлагаемая и биосовместимая природа этого полисахарида приводит к тому, что пектин представляет особый интерес для применения в качестве пленочных материалов для защиты ран. К сожалению, плёнки на основе пектина хорошо растворяются в воде, а это значит, что они недолго прослужат в качестве защитного раневого покрытия. Однако, эта проблема легко устраняется за счет введения в процессе приготовления пленки в раствор пектина ионов поливалентных металлов, например, ионов кальция [1].

Введение модифицирующей добавки в раствор пектина, действительно, приводит к тому, что пленки пектина перестают растворяться в воде. Однако, жесткость пектина (значение его модуля упругости) и без того достаточно большая, возросла. В связи с этим, в работе были рассмотрены способы уменьшения значений модуля упругости пленочных образцов.

Пленки пектина были получены из исходного раствора полимера с концентрацией 3г/дл, содержащего 0,08 моль лактата кальция на моль полимера. Проблема повышенной жесткости пленок была решена за счет введения в раствор пектина глицерина. Как показали проведенные исследования, введение уже 0,5 моль глицерина на моль полимера приводит к существенному (больше, чем в 10 раз) уменьшению жесткости пленочного материала. Увеличение содержания глицерина в пленочном образце до 1,5 моль на моль полимера, практически не приводило к дальнейшему снижению жесткости материала.

Таким образом, добавление в растворы пектина 0,08 моль лактата кальция и 0,5 моль глицерина, приводило к получению мягких, эластичных пленок не растворимых в воде, которые могут стать основой для создания защитных раневых покрытий.

#### Литература

1. Shurshina A., Afanasyeva M., Chernova V. Lazdina M., Kulish E. On the possibility of obtaining soft dosage forms based on polyanionic polysaccharides with prolonged yield of drugs. *Macromol. Res.* (2023).

© Саликаева С.В., Лаздин Р.Ю., 2024

УДК 541.64:536

## ПОЛИСАХАРИДЫ В КАЧЕСТВЕ ОСНОВЫ ДЛЯ СОЗДАНИЯ МЯГКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ

Сафина П.И.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

На сегодняшний день одной из востребованных областей применения полимеров является медицина. В частности, полимеры могут использоваться в системах доставки. Одним из широко применяемых полимеров является натриевая соль карбоксиметилцеллюлозы.

Натриевая соль карбоксиметилцеллюлозы (НКМЦ)-это полимер, получаемый из целлюлозы растительного происхождения. К преимуществам НКМЦ относят: биосовместимость ,биodeградируемость , способность к пленкообразованию, гелеобразованию, антимикробная активность.

Этим обусловлен тот факт, что НКМЦ широко используется в производстве оральных фармацевтических препаратов и препаратов для наружного применения, в первую очередь для повышения вязкости мазей, паст как гидрогелевой основы, а также препаратов для парентерального применения. Ее также используют как связывающее и разрыхляющее вещество в производстве таблеток. Применяется при лечении проблемных ран, для удаления раневого содержимого, экссудатов, а также для регулирования кинетики высвобождения действующих веществ[1].



Для получения мягких лекарственных форм на основе НКМЦ используются различные технологии. Одним из распространенных методов является смешение НКМЦ с другими компонентами, такими как вода, активные фармацевтические ингредиенты и стабилизаторы. Затем полученная смесь подвергается обработке, например, с помощью нагревания или смешивания, чтобы образовать гель[2]. Мягкие лекарственные формы на основе НКМЦ имеют несколько преимуществ. Во-первых, они обладают хорошей стабильностью и длительным сроком годности. Во-вторых, они обеспечивают удобство применения благодаря своей мягкой текстуре и легкости в использовании. Кроме того, они могут быть адаптированы для различных способов применения, таких как глазные капли, назальные спреи, гелевые пластыри и другие.

#### Литература

- 1.Kulich E.I., Lazdin R.Y., Shurshina A.S.,Kolesov S.V., Zakharova E.M.,Zakharov V.P.Structure formations a method of forming physicochemical characteristics of films obtained from aqueous solutions of certain polysaccharides–Polymer Science, Series A.2021.Т.63. №1. С.54-62
- 2.КраснюкИ.И. Фармацевтическая технология. Технология лекарственных форм: учебник / И.И. Краснюк, С.А. Валевко, Г.В. Михайлова. – М: Академия, 2006. – 592 с.

© Сафина П.И., 2024

УДК 544.773.432

## ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОГЛОЩЕНИЯ И ВЫСВОБОЖДЕНИЯ КОМПЛЕКСА БОРНОЙ КИСЛОТЫ И ГЛИЦЕРИНА АКРИЛОВЫМ ГИДРОГЕЛЕМ

Скорлуханова А.В., Кушев П.О.

*Воронежский Государственный Университет, Воронеж, Россия*

Акриловые гидрогели являются абсорбентами, состоящими из гидрофильных сеток, которые способны увеличиваться в размерах, поглощая значительные объемы воды или водных растворов.

Сферы применения таких гидрогелей крайне разнообразны: нефтедобыча, медицина, домашний быт, растениеводство и сельское хозяйство.

В сельском хозяйстве акриловые гидрогели применяются для сокращения расхода воды на полив. Гранулы суперабсорбента помещаются в почву на этапе посева, в непосредственной близости с корневой системой растения. Помимо влагоудержания, гидрогели могут быть дополнительными источниками необходимых микроэлементов, например: железа, марганца, бора, натрия, цинка, меди, молибдена, хлора, никеля, кремния и хлора. Для этого можно добавить микроэлементы на этапе синтеза.

В данной работе в качестве такого микроэлемента исследуется бор, источником которого была выбрана борная кислота. Борат-ионы способствуют увеличению завязей плодово-ягодных культур, стимулируют образование новых точек роста, увеличивают содержание сахара, азота и витаминов в выращиваемых культурах, а также повышают их устойчивость к неблагоприятным метеорологическим условиям [1, 2].

Разработка и производство удобрений именно на основе бора представляют наибольшие сложности из-за малой растворимости этого микроэлемента в воде (растворимость ортоборной кислоты 4,87 г в 100 мл воды) [2]. По этой причине было решено исследовать комплекс бора с глицерином, так как растворимость ортоборной кислоты в глицерине намного больше, чем в воде.

Синтезирован сополимер на основе акрилата калия и акриламида согласно методике представленной в статье [3] и изучены его свойства, такие как: влагопоглощение (1 г гидрогеля поглотил 240 мл воды), поглощение и высвобождение борат-ионов с помощью УФ-спектрофотометра (UV-1600PC).

Для оценки поглощения и высвобождения комплекса борат-ионов методом фотометрии был использован краситель Азаметин-АШ, синтезированный по методике [4]. Найдено, что исследуемый сополимер массой 0,1 г практически не способен поглощать ни бор в чистом виде из раствора борной кислоты с концентрацией бора 1 мг/л, ни комплекс бора с глицерином из раствора ортоборной кислоты с концентрацией бора 1 мг/л и массовым соотношением борная кислота : глицерин = 1 : 4,5 [2]. Концентрации определялись с помощью градуировочного графика [4], исследование проводилось в течение 2 часов.

В связи с тем, что борат-ионы не абсорбируются полимером из раствора, их добавили на этапе синтеза по рецептуре аналогичной базовому гидрогелю. Единственное отличие состояло в том, что крахмал добавляли в раствор орто-борной кислоты с глицерином с концентрацией бора 2 мг/л. Исследование процесса высвобождения показало, что при таком методе загрузки борат-ионов происходит их высвобождение в раствор в количестве 98% от добавленного. Исследование проводили в течение двух часов. Концентрацию борат-ионов определяли с помощью метода фотометрии.

#### Литература

1. Дорошенко Т.Н., Чумаков С.С., Захарчук Н.В. Влияние микроэлементов на повышение заморозкоустойчивости яблони // Энтузиасты агрономной науки. В.12. Краснодар. 2010. С. 100-101.
2. Использование растворов борной кислоты в органических жидкостях в качестве борсодержащих микроудобрений. Влияние на урожайность и химический

состав зерна озимой и яровой пшеницы / Н.А. Кодочилова, А.О. Иваненкова, Т.С. Бузынина и др. // Вестник ЮУрГУ, Серия “Химия”. – 2021. Т. 13, №2

3. Кузнецов В.А., Селеменов В.Ф., Семенов В.Н., Бакалова М.В. Способ получения гидрофильно сшитого полимера со свойствами суперабсорбента. Патент РФ № 2574722. Оpubл. 10.02.2016. Б.И. № 4.

4. РД 52.24.389-2011 “Массовая концентрация бора в водах. Методика выполнения измерений фотометрическим методом с азометином-АШ”.

© Скорлуханова А.В., Куцев П.О., 2024

УДК 541.124:542.952.6:547.313

## ЭЛЕКТРОПРОВОДИМОСТЬ ТОНКОПЛЕЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИСАХАРИДОВ И НАНОЧАСТИЦЫ ЙОДИДА СЕРЕБРА ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ АММИАКА

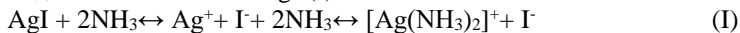
Терегулов Т.Б.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Мировым трендом развития современной электроники является создание технологии полимерных наноэлектронных устройств регистрирующие химические соединения. Достоинством электронных органических сенсоров, является их физическая гибкость и энергоэффективность, что подходит для биосовместимых приложений, например, в сфере биомедицины и биоэлектронике. В качестве сенсоров вредного вещества – аммиак, предлагаются органические сенсоры, например, высокопроводящие полимеры и композиты на основе полимеров [1, 2].

Сенсоры — это прибор, преобразует физические или химические показатели свойств контролируемой среды в сигнал. В основе работы полупроводниковых сенсоров лежит явление изменения электропроводности в результате адсорбции анализируемого газа. Основные проблемы практического использования полупроводниковых сенсоров связаны с недостаточно хорошей временной стабильностью их сенсорных свойств и низкой селективностью.

В основе работы на детектирование аммиака лежит реакция присоединения аммиака к AgI (I):



В данной работе были приготовлены и использованы коллоидные частицы AgI, образующиеся при смешении исходных растворов KI и AgNO<sub>3</sub> с концентрацией 0,01 моль/л при объёмном соотношении равном 7 : 10. При таком подходе получаются частицы с небольшим размером (40-60 нм), входящим в интервал истинно-коллоидных систем, что обеспечивает максимально возможную удельную поверхность раздела фаз. Из-за того, что

размер коллоидных частиц меньше толщины пленки, то AgI находятся не только на поверхности, но и в объеме плёночного материала.

Процесс определения начинается с адсорбции анализируемого газа на плёнке, соответственно на чувствительность работы будут влиять факторы, связанные с увеличением адсорбции на сенсоре. В случае плёночных образцов топография и морфология поверхности зависит от структуры композита, детерминированные условиями получения [4, 5].

Материалы, полученные из растворов СХТЗ с концентрацией 1 % и менее обуславливаются структурой, состоящей из мелких зерен надмолекулярных образований с размером порядка нанометров. При увеличении концентрации до 2% приобретают форму продолговатых зернистых структур с размерами в несколько микрон. Влияние наноструктуры йодида серебра на морфологию и топографию поверхности пленок более значительно при 1 %-ных исходных растворов СХТЗ.

Можем утвердить, что образцы, с наиболее выраженным рельефом и площадью поверхности, обладают максимальной чувствительностью к изменению концентрации аммиака, это видно в изменении электропроводности (электрического сопротивления). Отмечу, что пленки на основе полимеров при взаимодействии с аммиаком изменений в параметрах, не выявлено.

Таблица 1

Динамика электропроводимости от концентрации NH<sub>3</sub>. 1 - КМЦ(0,5%) + AgI, 2 – ХТЗ(1%)+AgI, 3 – КМЦ(2%) +AgI.

1	NH <sub>3</sub> ,мг/м <sup>3</sup>	20	50	150	500	750	1000			
	R,Мом	3	2,4	2,3	2,2	2,3	2,3			
2	NH <sub>3</sub> ,мг/м <sup>3</sup>	16	50	100	150	200	500	800	900	1000
	R,Мом	15	14,9	14,7	14,4	14,1	13,9	13,7	13,6	13,4
3	NH <sub>3</sub> ,мг/м <sup>3</sup>	16	50	100	150	200	300	400	500	600
	R,Мом	14,6	14,6	14,1	13,7	13,4	13,1	12,9	12,6	12,3

Как видно из таблицы, при увеличении концентрации электропроводимость увеличивалась. У некоторых образцов, как в случае 1 диапазон чувствительности не большой.

#### Литература

1. Патент РФ 2038590 Россия МПК G 01 N 27/12 Датчик концентрации аммиака. / Крутоверцев С. А. и др. - Заявл. 24.09.92. Оpubл. 27.06.95;
2. Salikhov R.B., Biglova Y.N, Mullagaliev I. N., Salikhov T.R., Mustafin A.G. Letters on Materials. 2021. V. 1 № 2. P. 140–145.

3. Bazunova M. V., Mustakimov R. A., Salikhov R. B., Mullagaliev I. N. Film materials based on polymer mixtures of the sodium salt of N-succinyl chitosan with poly-N-vinylpyrrolidone. Journal of Applied Chemistry. 2022. V. 95. № 6. P. 741-749.
4. Shurshina A. S., Bazunova M. V., Chernova V. V., Galina A. R., Lazdin R. Y. Influence of supramolecular organization on some characteristics of chitosan succinamide films produced from aqueous solutions Polymer Science, Series. 2020. V. 62. № 4. P. 422-429.

© Терегулов Т.Б., 2024

УДК 541.64

## ПРИМЕНЕНИЕ НАТРИЕВОЙ СОЛИ КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ В МЕДИЦИНЕ

Уельданова Э.С.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

В связи с бурным ростом химии высокомолекулярных соединений и развитием технологии увеличивается роль полимеров в жизни человека. Полимеры находят широкое применение в самых разнообразных отраслях, включая медицину.

В медицине, в частности в фармакологии, полимеры применяются, как вспомогательные вещества в составе мазей, гелей, инъекционных растворов, трансдермальных систем и т.д., так и как активные компоненты. Кроме того, полимеры могут использоваться в качестве имплантатов, шовных нитей, клеев и т.д.

Особый интерес для применения в медицине находят физиологически активные полимеры. Одним из них является анионный полисахарид - натриевая соль карбоксиметилцеллюлозы (КМЦ). Она обладает такими свойствами, как биосовместимость, биodeградируемость, антимикробная активность, способность формировать вязкие растворы, которые долго сохраняют пластичность, способность к пленко- и гелеобразованию и т.д. Все это предопределяет широкое применение КМЦ в различных областях медицины.

КМЦ используется в системах доставки лекарств и тканевой инженерии. Так, в работах [1, 2] была показана эффективность использования КМЦ для адресной доставки препаратов в составе пленочных и назальных систем доставки. КМЦ успешно используется для доставки лекарств в желудочно-кишечный тракт, в ткани слизистой оболочки [1].

Гидрогели на основе КМЦ перспективны для использования в качестве перевязочных средств при лечении ран различной этиологии. Кроме того, благодаря наличию функциональных групп в структуре КМЦ они могут инкапсулировать различные лекарственные препараты и также выступать в качестве систем доставки.

## Литература

1. Sangamesh G. Kumbar, Cato T. Laurencin, Meng Deng Natural and Synthetic Biomedical Polymers. - Elsevier Inc., 2014.
2. Кулиш Е.И., Лаздин Р.Ю., Шуршина А.С., Колесов С.В., Захарова Е.М., Захаров В.П. Структурообразование как способ формирования физико-механических характеристик пленок, полученных из водных растворов некоторых полисахаридов // Высокомолекулярные соединения. Серия А. 2021. Т. 63. № 1. С. 57-65.  
© Уельданова Э.С., 2024

УДК 541.64

### ОСОБЕННОСТИ ВЫСВОБОЖДЕНИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ ИЗ ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЫ В УСЛОВИЯХ ФЕРМЕНТАТИВНОГО ГИДРОЛИЗА Фазылов В.Х.

*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Одной из актуальных задач в условиях современной реальности является разработка пленочных покрытий для защиты и лечения ран различной этиологии. Разрабатываемые покрытия должны удовлетворять ряду требований, таких как биосовместимость, биodeградируемость, влагопоглощающая способность, бактериостатичность, паро- и газопроницаемость и т.д. Таким образом, разрабатываемые покрытия позволят сократить время лечения и облегчить процедуры смены повязок.

Интерес в качестве основы для создания таких покрытий представляют полимеры природного происхождения и искусственные, например, хитозан и его производные, целлюлоза и ее производные. Данные полимеры, во-первых, обладают собственной биологической активностью. Во-вторых, имеют в своей структуре функциональные группы, что позволит с одной стороны закрепить биологически активное вещество на полимерной матрице, а с другой - провести модификацию с целью создания пролонгированных форм.

При создании таких систем необходимо учитывать их область применения. При использовании данных покрытий на открытой ране необходимо учитывать наличие на ране ферментов, что приведет к процессу ферментативного гидролиза. Ферментативный гидролиз способствует эффективному высвобождению лекарственного вещества из лекарственных форм, обеспечивая быстрое и равномерное его распределение в организме. Процесс высвобождения лекарственного вещества в данном случае имеет несколько ключевых преимуществ:

1. Улучшение биодоступности. Ферментативный гидролиз позволяет максимально расщепить лекарственную форму препарата, обеспечивая полное высвобождение лекарственного вещества.

2. Ускорение начала действия. Благодаря ферментативному гидролизу лекарственное вещество освобождается более быстро и эффективно. Это позволяет ускорить начало действия препарата, что особенно важно в случаях неотложного лечения и срочной медицинской помощи.

Таким образом, ферментативный гидролиз играет важную роль в обеспечении оптимального высвобождения лекарственного вещества из различных лекарственных форм. Понимание и оптимизация этого процесса являются ключевыми задачами в разработке новых лекарственных форм и повышении их эффективности и безопасности.

© Фазылов В.Х., 2024

УДК 691.175.3

### ВЛИЯНИЕ ПЕНОСТЕКЛА НА ПЛОТНОСТЬ КОМПОЗИЦИОННЫХ СОСТАВОВ

Фараизов И.И., Тимофеев В.П., Махмутов А.Р., Ковшов А.Ю., Талипов Р.Ф.  
*ООО "Автопласт", Нефтекамск, Россия*

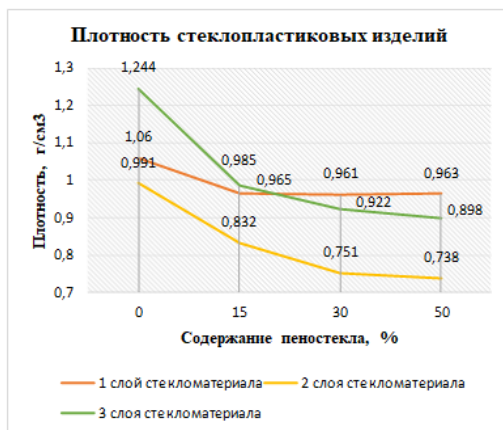
При производстве различных деталей из полимерных композиционных материалов (ПКМ) все более широкое распространение получают полиармированные материалы, к которым относятся ПКМ, состоящие из матрицы (ненасыщенные полиэфирные смолы) с распределенными в ней армирующими компонентами различных видов.

При изготовлении полиармированных ПКМ широкое распространение получили стеклянные волокна (СтВ), которые получили широчайшее применение при производстве стеклопластиковых изделий (СПИ). По сравнению с другими типами волокон, например, с углеродными, СтВ уступают им по физико-механическим показателям. Однако, невысокая стоимость СтВ привела к тому, что по объему потребления они существенно опережают другие типы волокнистых наполнителей.

При изготовлении СПИ на качество влияют различные факторы: качество сырьевых материалов, параметры технологического производства и взаимодействие различных составляющих в композиции. Одним из таких факторов является использование пеностекла (ПСт), который оказывает существенное влияние на плотность СПИ.

Результаты исследований показали, что увеличение количества ПСт приводит к снижению плотности СПИ. Полученные результаты представлены на графике 1.

График 1



Это объясняется рыхлой открытой структурой ПСт, что уменьшают общую массу изделия при сохранении его объема.

Так же, было определено, что увеличение количества стекломата приводит к увеличению плотности СПИ. Это интерпретируется тем, что стеклофиламенты, стекломата, уплотняют структуру, что приводит к увеличению плотности СПИ.

Оптимальное сочетание этих компонентов позволяет добиться необходимых технических характеристик СПИ. Полученные результаты могут быть использованы при разработке новых технологий производства СПИ с требуемыми свойствами.

#### Литература

1. ГОСТ 11262-2017 Пластмассы. Метод испытания на растяжение/Изд. официальное. – Москва: Стандартинформ, 2018.
  2. ГОСТ 57921-2017 Композиты полимерные методы испытаний. Общие требования/Изд. официальное. – Москва: Стандартинформ, 2017.
- © Фараилов И.И., Тимофеев В.П., Махмутов А.Р., Ковшов А.Ю., Талипов Р.Ф., 2024

УДК 691.175.3

### ИНТУМЕНСЕНТАЯ СИСТЕМА В СОСТАВЕ КОМПОЗИТНОГО СТЕКЛОПЛАСТИКОВОГО МАТЕРИАЛА

Фараилов И.И., Тимофеев В.П., Махмутов А.Р., Ковшов А.Ю.  
*ООО "Автопласт", Нефтекамск, Россия*

Фактор, которые сдерживают применение полимерных композиционных материалов (ПКМ) в некоторых промышленных отраслях, является их относительно низкая огнестойкость. Горючесть материалов является важным аспектом в области безопасности труда и предотвращения



пожаров. Для определения горючих свойств ПКМ применяются стандартизированные испытания, которые позволяют получить количественные данные о поведении материалов при воздействии высоких температур.

Одним из эффективных путей снижения пожарной опасности ПКМ является применение интумесцентного огнезащитного покрытия на основе полифосфата аммония (ПФА), меламина и пентаэритрита (ПЭр).

Для интумесцентной системы главной проблемой является ПФА, так как при длительном воздействии воды, наблюдается его миграция на поверхностный слой ПКМ, в следствии этого огнезащитные свойства ПКМ резко снижаются за счет вымывания данного компонента. Для решения данной проблемы проводят гидрофобизацию ПФА кремнийорганическими соединениями.

В данной работе была подобрана рецептура вспучивающей системы, изготовлен ПКМ, армированный эмульсионным стекломатом плотностью 400 г/м<sup>2</sup>, и были исследованы огнезащитные свойства.

Огнезащитная вспучивающая композиция включает себя ненасыщенную полиэфирную изо-фталевую смолу, интумесцентный состав и термоокисленный графит (ТОГ). Отверждение состава проводилось при нормальных условиях, используя в качестве ускорителя – октоат кобальта (6%), и инициатора - пероксида метилэтилкетон (МЭКП) (с содержанием активного кислорода 8,8 - 9,3 %). Композицию гомогенизируют в лабораторном смесителе при 4000 об/мин до достижения степени перетирания – 70 мкм, не допуская нагрева состава более 40<sup>0</sup>С. Композицию наносят на матрицу (декоративно-защитный слой (ДЗС)) кистью, либо распылением пневмопистолетом. Стекловолокно в виде рубленного ровинга и огнезащитная композиция аэрозольным факелом наносятся (напыляются) на отвержденную поверхность ДЗС формы-шаблона изделия. Испытания проводятся на универсальной установке ОТМ-КТ по ГОСТ 12.1.044-89 п. 4.3.

Образец ПКМ, изготовленный из огнезащитной интумесцентной композиции в комбинации с ТОГ, испытывали при постоянной температуре пламени горелки Бунзена:

- продолжительность времени испытания 5 мин.;
- начальная температура дымовых газов пламени горелки после введения образца в испытательную камеру 200<sup>0</sup>С;
- максимальная температура дымовых газов 218<sup>0</sup>С на 5 минуте испытания;
- образец ПКМ без источника пламени горелки Бунзена мгновенно затухает, огонь не поддерживает.

Графическая интерпретация результатов эксперимента по определению группы горючести ПКМ представлен на графике 1.

График 1



Комбинация интумесцентной системы с термоокисленным графитом, образует более вспененную структуру с повышенными огнестойкими свойствами. С введением интумесцентного состава в композит удастся получить самозатухающий материал.

Композит, изготовленный из термоокисленного графита и из интумесцентного состава, относится к группе “Трудновоспламеняемые” и “Трудногорючий”.

#### Литература

1. ГОСТ 57921-2017 Композиты полимерные методы испытаний. Общие требования/Изд. официальное. – Москва: Стандартинформ, 2017.
2. ГОСТ 12.1.044-89 Система стандартов безопасности труда. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения.

© Фараизов И.И., Тимофеев В.П., А Махмутов.Р., Ковшов А.Ю., 2024

УДК 691.175.3

### ПОЛИМЕРНАЯ КОМПОЗИЦИЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ БЕЗГАЛОГЕНОВЫХ АНТИПИРЕНОВ НА ОСНОВЕ ФОСФОРА И АЗОТА

Фараизов И.И., Тимофеев В.П., Махмутов А.Р., Ковшов А.Ю., Талипов Р.Ф.  
*ООО “Автопласт”, Нефтекамск, Россия*

Композитный материал – неоднородный материал, состоящий из двух и более компонентов, включая армирующие элементы, которые обладают необходимыми свойствами материала, и матрицу, обеспечивающую совместную работу армирующих элементов.

Наибольший интерес для трудногорючих композиционных материалов представляют смешанные антипирены на основе фосфора и азота. Исследование синергизма фосфор - азот - содержащих антипиренов является одним из перспективных направлений, так как на основе данных

наполнителей получают менее токсичные материалы. Для достижения наилучших показателей по огнестойкости, разработка идет на основе смешанных в различных соотношениях фосфор- и азотсодержащих компонентов.

В зависимости от химического строения, огнестойкие антипирены наполнители могут подавлять процессы горения в конденсированной и в газовой фазе. Одновременно могут влиять на стадию пиролиза, распространения пламени, токсичности и воспламенения. Именно данные показатели определены в федеральном законе «Технический регламент о требованиях пожарной безопасности» от 22.07. 2008г. N 123-ФЗ (Статья 134. Требования пожарной безопасности к применению строительных материалов в зданиях и сооружениях).

Композиционный стекловолокно наполненный пластиковый материал, включает себя ненасыщенную полиэфирную смолу, отличающийся тем, что он дополнительно содержит фосфорсодержащий замедлитель горения (сложный эфир, являющийся производным фенола и ортофосфорной кислоты), азотсодержащий замедлитель (производное меламина), кристаллогидраты оксидов цинка и бора и гидроксид трёхвалентного металла.

Испытания проводились в соответствии ГОСТ 12.1.044-89 п 4.3 “Система стандартов безопасности труда. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов” на универсальной установке ОТМ-КТ для определения группы горючести материалов.

Значения температур дымовых газов по времени, огнестойкого наполненного композитного состава при проведении испытания (график 1), по сравнению с ненаполненным композитным составом (график 2), представлены ниже.

График 1

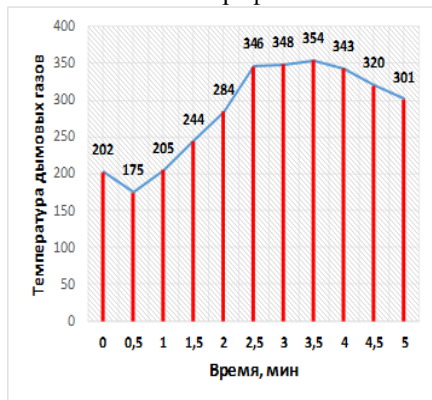
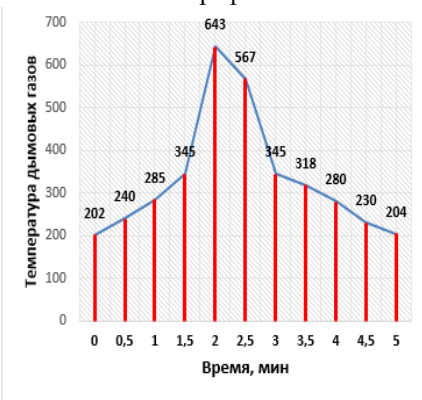


График 2



Полученные результаты при испытании образцов стеклопластиковых образцов позволяет сделать заключение о том, что введение в состав смешанных фосфор- и азотсодержащих антипиренов улучшают показатели по огнестойкости композитного материала – снижая максимальную температуру дымовых газов почти в 2 раза ( $\Delta 289^{\circ}\text{C}$ ) и увеличивая время достижения максимальной температуры при горении (до 3,5 мин.).

#### Литература

1. ГОСТ 57921-2017 Композиты полимерные методы испытаний. Общие требования/Изд. официальное. – Москва: Стандартинформ, 2017.
2. ГОСТ 12.1.044-89 Система стандартов безопасности труда. Пожаровзрывоопасность веществ и материалов. Номенклатура показателей и методы их определения.

© Фараизов И.И., Тимофеев В.П., Махмутов А.Р., Ковшов А.Ю., Талипов Р.Ф., 2024

УДК 691.175.2:691.175.3

#### ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТЕКЛОПЛАСТИКОВОГО МАТЕРИАЛА, НАПОЛНЕННОГО ПЕНОСТЕКЛОМ

Фараизов И.И., Махмутов А.Р., Тимофеев В.П., Ковшов А.Ю., Талипов Р.Ф.  
*ООО “Автопласт”, Нефтекамск, Россия*

Пеностекло (ПСт) является уникальным и перспективным материалом, обладающим высокими теплоизоляционными свойствами, механической прочностью, огнестойкостью и долговечностью.

В зависимости от содержания ПСт в составе композита, могут меняться его свойства, что позволяет адаптировать материал под конкретные требования и условия эксплуатации.

Композитный материал был изготовлен на основе ненасыщенной ортофталевой полиэфирной смолы марки Attshield OP 145A производство компании “Аттика”.

Испытания образцов проводились в соответствии с ГОСТ 11262-2017 с использованием образца типа 1 (“лопатка”) на универсальной испытательной машине фирмы “SHIMADZU AGS-X” (Shimadzu, Япония). Погрешность определения значений результатов составляет не более 1%. Тип устройства зажимов для образцов – клиновидные. Расстояние между зажимами 120 мм. Скорость испытания образцов, наполненных ПСт – 1 мм/мин при определении модуля упругости и 5 мм/мин при определении других характеристик. В процессе подготовки к испытанию образцы кондиционировались согласно ГОСТ 12423-66 при температуре 23 °С и при влажности 50%. Результаты испытаний образцов представлены в таблице 1.

Таблица 1

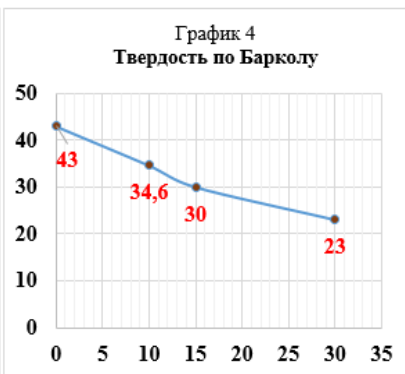
№	Содержание ПСт, %	Количество стекломатериала (400 г/см <sup>3</sup> )	Толщина, мм	Ширина, мм	Модуль упругости при растяжении, МПа	Прочность при растяжении, МПа	Деформация при разрыве, %
1	0	2	2,87	10,54	2931,35	1106,59	36,65
2	15	2	3,14	10,45	2813,66	1514,20	45,89
3	30	2	3,47	10,45	3091,34	1532,33	42,3272
4	50	2	3,99	10,45	2893,22	1311,06	31,5159
5	0	3	3,67	10,32	3397,43	2239,26	59,5927
6	15	3	3,58	10,45	3683,495	2017,92	53,9206
7	30	3	4,47	3377,81	2211,8	47,3955	

В продолжение нашего тезиса представляем графическую интерпретацию результатов исследования физико-механических свойств стеклопластиковых изделий с различным содержанием ПСт. Графическая интерпретация дает нам наглядное представление о зависимости физико-механических свойств стеклопластиков от содержания ПСт.

На основании проведенных испытаний можно сделать вывод, что с увеличением содержания ПСт в составе композита, его деформация при разрыве снижается (график 2). Добавление 15% масс. ПСт в состав композиционного материала приводит к существенному увеличению его модуля упругости при растяжении. Однако, при дальнейшем увеличении доли ПСт до 30% масс., наблюдается снижение данного параметра (график 1).



Прочность при растяжении композиционного материала с добавлением 15% масс. ПСт уменьшается. Тем не менее, при увеличении доли ПСт до 30% масс. наблюдается обратный эффект (график 3). При увеличении содержания ПСт в композиционном материале наблюдается уменьшение его твердости по Барколу (график 4).



#### Литература

1. ГОСТ 11262-2017 Пластмассы. Метод испытания на растяжение/Изд. официальное. – Москва: Стандартинформ, 2018.

© Фараизов И.И., Тимофеев В.П., Махмутов А.Р., Ковшов А.Ю., Талипов Р.Ф., 2024

УДК 544.773.433

### СИНТЕЗ ГИДРОГЕЛЕВОЙ МЕМБРАНЫ НА ОСНОВЕ ЖЕЛАТИНА, МОДИФИЦИРОВАННОГО СИЛИЛИРУЮЩИМ АГЕНТОМ, ДЛЯ ХИМИЧЕСКИХ СЕНСОРОВ

Фомина Е.Д., Лунева К.В., Рябков Е.Д.

*МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

Гибкая электроника – развивающаяся область техники, включающая в себя ряд дисциплин, в том числе химию и химическую технологию. Большую популярность в данной области получили работы по синтезу полимерных материалов как функциональных элементов устройств различных применений: гибкие дисплеи, носимые медицинские датчики. В данной работе рассматривается синтез гидрогелевой мембраны на основе полимера природного происхождения желатина, которая может быть использована как функциональный элемент химического сенсора. Гидрогели представляют собой сшитые трехмерные полимерные сетки, способные значительно набухать в воде и формировать нерастворимую структуру. Такие их особенности, как способность самовосстанавливаться, высокий модуль Юнга, биосовместимость и нетоксичность некоторых гелей, способность воспроизводить сложную геометрическую форму, простота функционализации и множество способов функционализации, делают эти материалы наиболее перспективными кандидатами для использования их в

гибкой электронике, а также в биоинженерии, медицине и химических анализах [1].

В качестве модификатора желатина используется (3-изоцианатопропил)триэтоксисилан. Синтез осуществляли путем взаимодействия (3-аминопропил)триэтоксисилана (АГМ-9) с диэтилкарбонатом в присутствии этилата натрия и дальнейшим нагревом реакционной смеси до 220 °С.

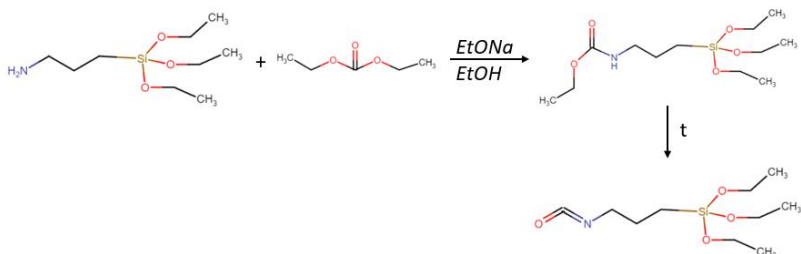


Рис. 1. Механизм получения (3-изоцианатопропил)триэтоксисилана.

(3-Изоцианатопрпирил)триэтоксисилан взаимодействует с лизиновыми боковыми цепями желатина в присутствии N,N-диизопропилэтиламина с образованием полимера с боковыми силоксановыми группами. Модифицированный желатин растворяли в натрий-фосфатном буфере. Сшивку проводили в присутствии фторида натрия в течение трех часов [2].

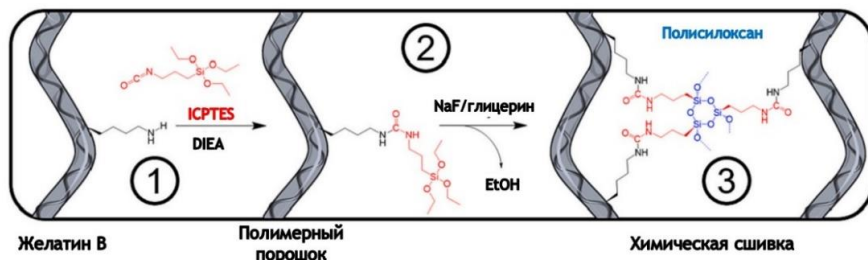


Рис. 2. Схема синтеза гидрогеля на основе модифицированного желатина (ICPTES - (3-изоцианатопропил)триэтоксисилан; DIEA - N,N-диизопропилэтиламин).

За счет образования силоксановых связей был получен жесткий гидрогель. Полученный материал характеризуется биосовместимостью, что делает возможным использование данного материала в качестве мембраны медицинского сенсора.

Важно отметить, что для работы был выбран желатин типа В, отличающийся низкой силой цветения и малым содержанием эндотоксинов, которые являются цитоксическими липополисахаридами. Эти свойства

определяют возможность использования данного типа желатина в промышленных и биоинженерных целях.

В дальнейшей работе будет рассмотрена возможность функционализации материала за счет введения в него проводящих элементов (углеродных нанотрубок) и исследования адгезии гидрогеля к различными поверхностям.

#### Литература

1. Hu, L., Chee, P. L., Sugiarto, S., Yu, Y., Shi, C., Yan, R., Yao, Z., Shi, X., Zhi, J., Kai, D., Yu, H. D., & Huang, W. (2023). Hydrogel-Based Flexible Electronics. *Advanced materials* (Deerfield Beach, Fla.), 35(14), e2205326
2. Simon, M., Maumus, M., Legrand, B., Sole, L., Dufaud, M., Mehdi, A., Jorgensen, C., Noël, D., & Subra, G. (2023). Gelatin modified with alkoxysilanes (GelmSi) forms hybrid hydrogels for bioengineering applications. *Biomaterials advances*, 147, 213321.

© Фомина Е.Д., Лунева К.В., Рябков Е.Д., 2024

УДК: 544.773.432

### ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПОГЛОЩЕНИЯ И ВЫСВОБОЖДЕНИЯ КОМПЛЕКСА СУЛЬФАТА МАРГАНЦА И ГЛИЦИНА АКРИЛОВЫМ ГИДРОГЕЛЕМ

Юткина А.И., Кушев П.О.

*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

Традиционные методы орошения сельскохозяйственных земель не всегда являются эффективными и экономически оправданными. Для преодоления данной проблемы предложено использовать суперабсорбенты (СА). Помимо способности поглощать большие объемы водных растворов, важным свойством СА является возможность пролонгированного высвобождения удобрений. Одним из микроэлементов, дополнительно вносимых в почву для нормального развития растений, является марганец. Эффективность использования органических комплексных соединений микроэлементов в качестве удобрений намного выше по сравнению с применением их неорганических солей.

В данной работе были рассмотрены сорбционные свойства гидрогеля на основе акрилата калия, акриламида и акриловой кислоты, полученного в результате радикальной сополимеризации в растворе. В качестве биodeградируемого компонента при синтезе СА использовали крахмал, сшивающий агент – метилен-бис-акриламид, инициатор – персульфат калия.

Для изучения процессов поглощения и высвобождения водорастворимого аминокислотного комплекса бисглицината марганца описанным ранее гидрогелем пользовались методом ограниченного объема. Эксперименты были проведены в различных гидродинамических режимах: в



статическом (без перемешивания раствора) и динамическом (при постоянном перемешивании раствора со скоростью 600 оборотов/мин).

Было установлено, что процесс поглощения бисглицината марганца протекает быстрее и интенсивнее при постоянном перемешивании: в статических условиях гидрогель поглотил 37,4% или 2,00 мг Mn из 5,35 мг; в динамических условиях – 56,8% или 3,05 мг Mn из 5,37 мг (рис. 1).

Данные о высвобождении марганца приведены на рис.2 и рис.3. Их необъективно сравнивать между собой, поскольку поглощение вещества гидрогелем изначально происходило при разных гидродинамических условиях. В статическом режиме гидрогель высвободил 7,5% или 0,15 мг Mn из 2,00 мг, в динамическом режиме - 4,9% или 0,15 мг Mn из 3,05 мг. Важно отметить, что независимо от режима перемешивания, процесс высвобождения достигал равновесия примерно на 50 минуте от начала эксперимента.

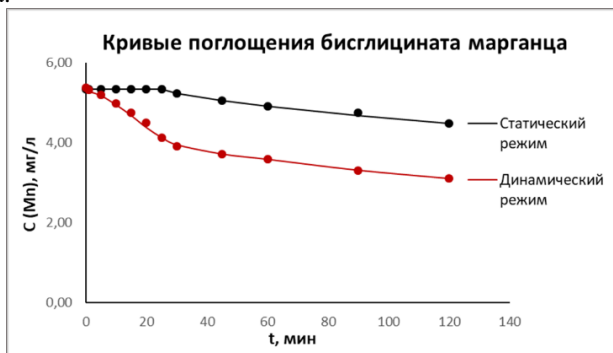


Рис. 1. График зависимости количественного поглощения марганца гидрогелем от времени в разных гидродинамических.

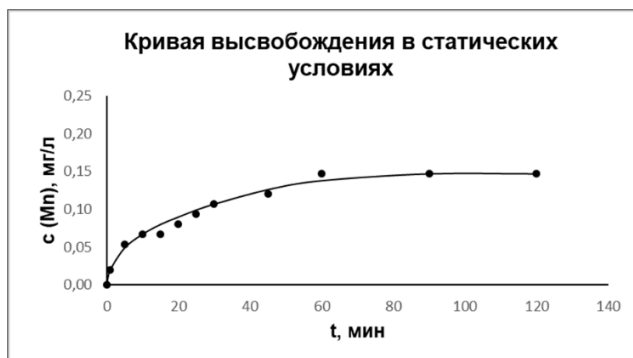


Рис. 2. График зависимости количественного высвобождения марганца от времени в статических условиях.

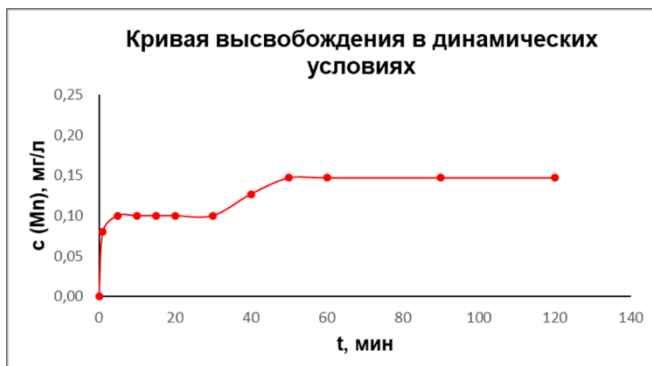


Рис.3. График зависимости количественного высвобождения марганца от времени в динамических условиях.

#### Литература

1. Зенищева А.В., Семенов В. Н., Кузнецов В. А., Кущев П. О. Синтез и гидратационные свойства суперабсорбента «Твердая вода» // Текст: электронный. 2020. Vol. 22, № 1.
2. Кадырова Р.Г., Кабиров Г.Ф., Муллахметов Р.Р. Биологические свойства и синтез комплексных солей  $\alpha$ -аминокислот биогенных металлов. Монография. Казань: Казан.гос. энерг. ун-т., 2014. 108 с.
3. Сафронов А.П., Терзиян Т.В. Образование химической сетки гидрогелей акриламида и акриловой кислоты, инициированное персульфатом аммония // Высокомолек. соед. Сер. Б. 2015. Vol. 57, № 5. С. 338–345.
4. Шатохин А.Ю. Влияние новых форм удобрений на основе комплекса микроэлементов с аминокислотами на урожайность растений картофеля при капельном орошении в условиях Астраханской области // Всероссийский научно-исследовательский институт агрохимии имени Д.Н. Прянишникова. 2018. с. 210–212.

© Юткина А.И., Кущев П.О., 2024

## СОДЕРЖАНИЕ

### СЕКЦИЯ «НЕОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

О ПЕРСПЕКТИВАХ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МАРГАНЦЕВЫХ РУД ЦЕНТРАЛЬНОГО КАЗАХСТАНА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ОКСИДНЫХ ФАЗ МАРГАНЦА Байкенов Е.А., Жандильденова А.К., Сафаров Р.З.....	4
ИССЛЕДОВАНИЕ МИКРОСТРУКТУРЫ И ФАЗОВОГО СОСТАВА НАНОЧАСТИЦ КАРБОНАТА МЕДИ, СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ МЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗОЙ Блинов А.В., Ясная М.А., Гвозденко А.А., Серов А.М., Татов А.В.....	6
СИНТЕЗ И СТРУКТУРА ТИТАНСУРЬМЯНОЙ КИСЛОТЫ Волокитина Е.О., Гусакова Ю.Н., Бурмистров В.А. ....	8
КВАНТОВОХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ХЕЛАТНЫХ БИСФЕНИЛАЛАНИНСОДЕРЖАЩИХ N,O-КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ Галимов М.Н., Берестова Т.В. ....	9
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НАНОРАЗМЕРНОГО ОКСИДА МЕДИ С ХИТОЗАНОМ Голик А.Б., Блинов А.В., Пирогов М.А., Тараванов М.А., Леонтьев П.С....	12
СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ЦЕОЛИТОВ $BaX$ – АДсорбЕНТОВ ДЛЯ ПРОЦЕССОВ РАЗДЕЛЕНИЯ ИЗОМЕРОВ КСИЛОЛА Котова А.О., Павлова И.Н., Алехина И.Е. ....	15
ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТОДА СИНТЕЗА НАНОЧАСТИЦ СЕЛЕНА В СРЕДЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ Рехман З.А., Блинова А.А., Блинов А.В., Пирогов М.А., Назаретова Е.Д....	17
СИНТЕЗ НАНОПОРОШКОВ СОСТАВА $Y_{3-x}Nd_xAl_5O_{12}$ Шидловская П.К., Белая Е.А.....	19

### СЕКЦИЯ «ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

ОКИСЛЕНИЕ ФЕНОЛА ПЕРСУЛЬФАТОМ АММОНИЯ В УСЛОВИЯХ РЕАКЦИИ ЭЛЬБСА Акназарова Н.В., Хазимуллина Ю.З., Гимадиева А.Р.....	22
---	----

ПОИСК НОВЫХ ИНГИБИТОРОВ ЯНУС-КИНАЗ JAK1/JAK2/JAK3/ТYК2, СОДЕРЖАЩИХ В СВОЕМ СОСТАВЕ ФРАГМЕНТ АДАМАНТАНА Алмазова А.В., Белякова О.А., Мастерова Ю.Ю., Кострюков С.Г. ....	23
3-МЕТИЛ-4-((4-ОКСО-4 <i>H</i> -ХРОМЕН-3-ИЛ)МЕТИЛЕН)ИЗОКСАЗОЛ-5(4 <i>H</i> )- ОН: СИНТЕЗ И РЕАКЦИЯ ТИОНИРОВАНИЯ Арязмова Е.М., Мажукина О.А., Егорова А.Ю. ....	25
СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ПРОИЗВОДНЫХ 5-АЦИЛ- 1,3-ДИОКСАНОВ Артамонова Я.С., Султанова Р.М. ....	27
СИНТЕЗ ХИНОЛИНОВЫХ ОСНОВАНИЙ В ПРИСУТСТВИИ СИЛИКАГЕЛЯ, МОДИФИЦИРОВАННОГО ОКСИДАМИ МЕТАЛЛОВ Артемьева А.С., Алибаев И.Д., Григорьева Н.Г. ....	28
ПЕРОКСИДНАЯ АНТИБАКТЕРИАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ ПОДСОЛНЕЧНИКОВОГО МЕДА Бахтиёр Р., Гаянова А.А., Еникеев А.А., Канчурина М.М., Талипов Р.Ф. ...	29
ЛИПИДЫ И ЛИПОФИЛЬНЫЕ КОМПОНЕНТЫ ВЕГЕТАТИВНЫХ ОРГАНОВ <i>PULMONARIA OBSCURA</i> (сем. <i>BORAGINACEAE</i> ) Бахтияров Д.Р., Ерастов А.С., Юнусова С.Г. ....	31
ПРОГНОЗ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ 4- АМИНОПРОИЗВОДНЫХ ТИЕТАНСОДЕРЖАЩИХ ПИРАЗОЛОВ Бикбаева Н.А., Шепилова С.О., Клен Е.Э. ....	32
N-АМИНОАРИЛПИРРОЛ-2-ОН В РЕАКЦИЯХ АЗОСОЧЕТАНИЯ С КВЕРЦЕТИНОМ Вавилова В.В., Амальчиева О.А., Егорова А.Ю. ....	34
ИЗУЧЕНИЕ ПРОДУКТОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ТРИ-ПАРА- ТОЛИЛСТИБИНА С ТРИХЛОРУКСУСНОЙ КИСЛОТОЙ Вахитов В.Р., Шаталин Л.А., Гуштин А.В. ....	36
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ КАТИОНИТА VENJON DVC 8 UPS В СИНТЕЗЕ МОНОЭФИРОВ ЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ Войнов В.А., Шарифов М.Х., Борисова Ю.Г. ....	38

ВЛИЯНИЕ САХАРОЗЫ НА ФЕРМЕНТАТИВНЫЙ СИНТЕЗ ПОЛИНУКЛЕОТИДОВ В УСЛОВИЯХ ПОЛИМЕРАЗНОЙ ЦЕПНОЙ РЕАКЦИИ Галеева П.С., Гарафутдинов Р.Р., Купова О.Ю. ....	39
ПЕРСУЛЬФАТНОЕ ОКИСЛЕНИЕ 3-ГИДРОКСИПИРИДИНА Гилимханова А.А., Хазимуллина Ю.З. ....	41
ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ГЛИЦИРРИЗИНОВОЙ И ГЛУТАМИНОВОЙ КИСЛОТ В ВОДНО-СПИРТОВЫХ РАСТВОРАХ Гимазетдинова Д.О, Файзрахманов И.С., Иванов С.П.....	42
ДИАЗОКЕТОН С МАЛЕОПИМАРИМИДНЫМ ФРАГМЕНТОМ В СИНТЕЗЕ НОВОГО 3,4,5-ТРИЗАМЕЩЕННОГО 1Н-ПИРАЗОЛА. Гиндуллина Г.М., Горшкова Ю.К., Сахаутдинов И.М.....	43
СИНТЕЗ N-АЦЕТИЛ-6-АМИНО-7-ГИДРОКСИ-2,2,4-ТРИМЕТИЛ-4- ФЕНИЛ-1,2,3,4-ТЕТРАГИДРОХИНОЛИНА Грибанова Я.А., Потапов А.Ю., Карелина К.О.....	44
СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ 3-ГИДРОКСИ-1,4,5,6-ТЕТРАГИДРО-1,2,4- ТРИАЗИНДИОНА-5,6 Кудаярова И.Р., Кудаярова Р.Р. ....	45
СИНТЕЗ АМИДОВ 3-β-АЦЕТОКСИГЛИЦИРРЕТОВОЙ КИСЛОТЫ НА ОСНОВЕ АРОМАТИЧЕСКИХ АМИНОВ Джураев А.Ж., Эсанов Р.С., Гафуров М.Б., Матчанов А.Д.....	46
ОПТИМИЗАЦИЯ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ 5-(R-БЕНЗИЛИДЕН)-2- ТИОКСОДИГИДРОПИРИМИДИН-4,6(1Н,5Н)-ДИОНОВ С ДИМЕТИЛФОСФИТОМ Елифанцева В.Э., Егоров Д.М.....	48
4-АРИЛИДЕН-2-ФЕНИЛ-5(4Н)-ОКСАЗОЛОНЫ В РЕАКЦИЯХ С ЭТИЛЕНДИАМИНОМ Зубкова С.Л., Амальчиева О.А., Егорова А.Ю.....	50
НОВЫЙ ПОДХОД К СИНТЕЗУ НЕНАСЫЩЕННЫХ (Z,Z)-1,5- ДИЕНОВЫХ МАКРОЦИКЛИЧЕСКИХ ДИОЛИДОВ Исламов И.И., Гайсин И.В. ....	51

ПОТЕНЦИАЛЬНО ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ НА ОСНОВЕ 3-ГИДРОКСИТЕТГИДРОФУРАНА Исхакова А.И., Охиров Ш.М., Кутлулолова Г.А., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф.....	52
КИСЛОТНО-КАТАЛИЗИРУЕМАЯ ИЗОМЕРИЗАЦИЯ ПРОИЗВОДНЫХ 2-АЗАСПИРО[4.5]ДЕКАНА Калязин В.А., Безрукова Е.В., Кострюков С.Г.....	54
СИНТЕЗ НОВОЙ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ 10А-ГИДРОКСИ- 6,6,8-ТРИМЕТИЛ-4-НИТРО-7,8-ДИГИРО-6Н-ПИРАНО[2,3,4- С,D]ПИРИДО[3,2,1-Н,1]ИНДОЛ-10(10АН)-ОНА Карелина К.О., Потапов А.Ю., Шихалиев Х.С. ....	57
ОКИСЛЕНИЕ МОНОТЕРПЕНОВЫХ ОЛЕФИНОВ НАДУКСУСНОЙ КИСЛОТОЙ Коваленко А.А., Выдрина В.А., Яковлева М.П. ....	60
ВЛИЯНИЕ МИКРОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ НА РЕАКЦИЮ NH-АЛКИЛИРОВАНИЯ 2-ЗАМЕЩЕННЫХ ИМИДАЗОЛИНОВ Кулешина Г.З., Хуснутдинова Н.С., Султанова Р.М.....	61
СИНТЕЗ 3-ЗАМЕЩЕННЫХ 1Н-ФОСФОЛАНОКСИДОВ РЕАКЦИЕЙ АЛЮМОЛАНОВ С $PBr_3/H_2O$ Куликова А.М., Алехина И.Е., Махаматханова А.Л.....	62
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ 3-ЗАМЕЩЕННЫХ (БЕНЗО)ПИРАНОНОВ С РЕАКТИВОМ ЛАВЕССОНА Куренкова Д.Х., Арязмова Е.М., Мажукина А.О.....	63
ХИМИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ АРИЛИДЕНОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ОКСАЗОЛО-5(4Н)-ОНОВ В РЕАКЦИЯХ С БИНУКЛЕОФИЛЬНЫМИ РЕАГЕНТАМИ Курилкина О.Е., Амальчиева О.А., Егорова А.Ю.....	65
ЭФИРЫ ЖИРНЫХ КИСЛОТ <i>RUTA GRAVEOLENS</i> L И <i>HAPLOPHYLLUM</i> <i>PERFORATUM</i> (М.ВІЕВ.) VVED Мамарозиков У.Б., Хидирова Н.К., Тураева С.М., Закирова Р.П., Асилбекова Д.Т.....	66

СИНТЕЗ (E,Z)-3-[[((5-МЕТИЛ-1 <i>H</i> -ПИРАЗОЛ-3-ИЛ)АМИНО)-МЕТИЛИДЕН]-5-АРИЛФУРАН-2(3 <i>H</i> )-ТИОНОВ Мамлеева Ж.В., Тихомолова А.С., Егорова А.Ю. ....	68
СИНТЕЗ N-АРОИЛ(ГЕТЕРОИЛ)ЗАМЕЩЁННЫХ СПИРОПИРАЗОЛИНКАРБОНИТРИЛОВ И 1-Н-ПИРАЗОЛОВ НА ОСНОВЕ ГИДРАЗИДОВ В УСЛОВИЯХ УЛЬТРАЗВУКОВОЙ АКТИВАЦИИ Мещерякова А.А., Константинова Е.А., Видлацкая Д.В., Пятунин Б.Н., Сорокин В.В. ....	70
IN SILICO ДИЗАЙН НОВЫХ ИНГИБИТОРОВ ТИРОЗИНКИНАЗЫ VSR-ABL1 С МУТАЦИЕЙ T315I, СОДЕРЖАЩИХ СТРУКТУРНЫЙ ФРАГМЕНТ МОЧЕВИНЫ Мишкин Д.В., Мещерякова А.В., Ямашкин Д.И., Кострюков С.Г. ....	71
АЛКИЛИРОВАНИЕ БРОМИСТЫМ БЕНЗИЛОМ СПИРТОВ, СОДЕРЖАЩИХ 1,3-ДИОКСОЛАНОВЫЙ ФРАГМЕНТ Мусин А.И., Джумаев Ш.Ш., Борисова Ю.Г., Раскильдина Г.З. ....	74
РЕАКЦИИ ГИДРАЗИНИРОВАНИЯ 4-ГИДРОКСИ-3-(3-ОКСО-1-АРИЛ-3-(4-АМИНОФЕНИЛ)ПРОПИЛ)-2 <i>H</i> -ХРОМЕН-2-ОНОВ Мухомодьярова Д.М., Вахрушина В.А., Ибрагимова Д.Н. ....	75
РЕАКЦИИ 2-АМИНОХРОМЕН-3-КАРБОНИТРИЛОВ С УЧАСТИЕМ РАЗЛИЧНЫХ РЕАКЦИОННЫХ ЦЕНТРОВ Никулин А.В., Смолькина А.А., Кривенько А.П. ....	77
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРОЙНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЭССЕНЦИАЛЬНОГО МИКРОЭЛЕМЕНТА ЖЕЛЕЗА С ВИТАМИНОМ С И НЕЗАМЕНИМЫМИ АМИНОКИСЛОТАМИ Блинов А.В., Гвозденко А.А., Голик А.Б., Облогин Я.А., Вакуленко М.В., Аскерова А.С. ....	79
ОСОБЕННОСТИ СПЕКТРОВ ЯМР <sup>1</sup> N И <sup>13</sup> C ТЕТРАГИДРО-8 <i>A</i> ,4 <i>A</i> - (ЭПОКСИМЕТАНООКСИМЕТАНО)БЕНЗО[1.3]ДИОКСАНА Охиров Ш.М., Исакова А.И., Лобов А.Н., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф. ....	81

ТРАНСФОРМАЦИИ ЦИКЛОГЕКСАНОНА В НАПРАВЛЕНИИ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ Охиров Ш.М., Исхакова А.И., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф.....	83
ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ МАГНИТНЫХ НАНОЧАСТИЦ МОЛЕКУЛАМИ ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА Положенцева Е.А., Лебедев Ю.А., Кинзябулатов Р.Р.....	84
ПРОТИВОРАКОВЫЙ ПОТЕНЦИАЛ ФУНКЦИОНАЛЬНО ЗАМЕЩЕННЫХ ГИДРОХИНАЗОЛИНОВ Пузанов Д.А., Кривенько А.П. ....	85
СРАВНЕНИЕ ЭНЕРГИЙ СТАБИЛИЗАЦИИ ПЕРЕХОДНЫХ СОСТОЯНИЙ РЕАКЦИИ ПРИНСА В ПОЛОСТЯХ ЦЕОЛИТОВ РАЗНОГО ДИАМЕТРА Рахманов Д.А., Вакулин И.В.....	85
СИНТЕЗ БИСАМИНОВ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ АНИЛИНА Ремезова Г.В., Петрова А.О., Сахаутдинов И.М. ....	89
СИНТЕЗ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ АНАЛОГОВ МЕТИЛОВОГО ЭФИРА ФУЗИДОВОЙ КИСЛОТЫ Салимова Е.В., Головнина Д.А., Куковинец О.С., Парфенова Л.В.....	90
СИНТЕЗ 5-(ГИДРОКСИМЕТИЛ)-2-ФУРФУРИЛАМИНОВ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ АНИЛИНА Сахаутдинова Г.Ф., Сабирова А.Э., Сахаутдинов И.М., Мустафин А.Г.....	92
ПРОМЕЖУТОЧНЫЕ ПРОДУКТЫ ТЕРМОКАТАЛИТИЧЕСКОЙ ДЕСТРУКЦИИ УГЛЕВОДОРОДОВ, МОДЕЛИРУЮЩИХ КОМПОНЕНТЫ ТЯЖЕЛЫХ НЕФТЯНЫХ ОСТАТКОВ Сахибгареев С.Р., Султанова М.Р., Андреева Ю.С., Кравченко К.Д., Чирко О.Н. ....	93
ПИНАКОЛИНОВАЯ ПЕРЕГРУППИРОВКА ЛАППАКОНИТИНА И ЕГО ПРОИЗВОДНЫХ Саяхов Р.Р., Габбасов Т.М., Цырлина Е.М., Юнусов М.С.....	94
СИНТЕЗ И ПРОТИВОВИРУСНАЯ АКТИВНОСТЬ 1,2,3-ТРИАЗОЛЬНЫХ ГЛИКОКОНЪЮГАТОВ ДИТЕРПЕНОВЫХ КИСЛОТ Смирнова А.А., Третьякова Е.В. ....	96



О РЕАКЦИЯХ N-МЕТИЛАКРИДИНИЕВЫХ СОЛЕЙ С НЕКОТОРЫМИ СН-КИСЛОТАМИ Стульников Д.В., Козлов А.Ш., Малов Н.А., Кострюков С.Г.....	98
ВЛИЯНИЕ ДИЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ НА ПРОТЕКАНИЕ ПЦР Субханкулова Э.И., Гарафутдинов Р.Р. ....	99
ЭНЕРГЕТИЧЕСКАЯ ЭФФЕКТИВНОСТЬ СЛОЖНЫХ КОЛОНН ПРИ РАЗДЕЛЕНИИ ПРОДУКТОВ ПИРОЛИЗА Тихонова А.А., Рудаков Д.Г., Тимошенко А.В. ....	100
СИНТЕЗ И КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА 2-(R-ФЕНИЛ)-6-ФЕНИЛ- 1,3-ТИАЗОЛО[3,2-b][1,2,4]ТРИАЗОЛОВ Тошмуродов Т.Т., Зияев А.А., Окманов Р.Я.....	101
СИНТЕЗ 4-ХЛОРФЕНИЛХЛОРАЦЕТАТА И ЕГО РЕАКЦИИ С ТИОЦИАНАТ КАЛИЯ Утаева С.М., Чориев А.У., Мирзаева С.К., Нормуродов И.У. ....	103
СИНТЕЗ 2,3-ИЗОКСАЗОЛА ХОЛЛОНГДИОНА Фатхутдинова Р.В., Миннибаева Э.М., Галимова З.И., Смирнова И.Е.....	104
ПЕРСУЛЬФАТНОЕ ОКИСЛЕНИЕ В РЯДУ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ Хазимуллина Ю.З., Гилимханова А.А. ....	105
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ НА ОСНОВЕ ДИПИРИДИЛОВ Хикматова М.М. ....	106
СИНТЕЗ 1-(2-(НАФТИЛОКСИ)-2-ОКСОЭТИЛ)- 1,3,5,7- ТЕТРААЗААДАМАНТАН -1-ИЙ ХЛОРИДА Чориев А.У., Кахарова М.Ф., Абдушукуров А.К., Нахатов И. ....	108
ОКИСЛЕНИЕ 2-АМИНОФЕНОЛА ПЕРСУЛЬФАТОМ АММОНИЯ В ЩЕЛОЧНОЙ СРЕДЕ Шайдуллина Г.А., Гимадиева А.Р.....	109
СИНТЕЗ КАТИОННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ЭКДИСТЕРОИДОВ Шаймухаметова А.Ф., Савченко Р.Г. ....	110

СИНТЕЗ КОНЪЮГАТОВ БЕТУЛИНОВОЙ КИСЛОТЫ С ПРИРОДНЫМИ НЕПРЕДЕЛЬНЫМИ КИСЛОТАМИ  
Шакирова Р.А., Яковлева М.П., Ишмуратов Г.Ю., Петухова Н.И.....112

О РЕАКЦИЯХ 1,3-ДИПОЛЯРНОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ АРИЛАЛЬДИМИНОВ ЭТИЛОВОГО ЭФИРА ГЛИЦИНА К БИС(СТИРИЛ)СУЛЬФОНАМ  
Шерстнев Н.С., Калязин В.А., Безрукова Е.В., Черноярова А.О., Кострюков С.Г.....113

ОЦЕНКА СПЕЦИФИЧНОСТИ НИКАЗЫ N.Bst9I В УСЛОВИЯХ ИЗОТЕРМИЧЕСКОЙ АМПЛИФИКАЦИИ  
Якшибаева Г.Р., Гарафутдинов Р.Р. ....114

ИССЛЕДОВАНИЕ СВЯЗЫВАНИЯ НИКУЮЩЕЙ ЭНДОНУКЛЕАЗЫ N.BspD6I С ПЕНТАНУКЛЕОТИДАМИ МЕТОДОМ МОЛЕКУЛЯРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ  
Якшибаева Г.Р., Купова О.Ю., Гарафутдинов Р.Р. ....115

СИНТЕТИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ  $\beta$ -СИТОСТЕРОЛА ПО ЦИКЛУ А Янтилина Э.З, Миннибаева Э.М., Петрова А.В. ....116

### **СЕКЦИЯ «АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»**

РАЗРАБОТКА СЕНСОРА НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНО ИМПРИНТИРОВАННОГО ПОЛИПИРРОЛА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ  
Абдуллин Я.Р., Назыров М.И.....119

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЛЕВОФЛОКСАЦИНА С ПОМОЩЬЮ СЕНСОРА НА ОСНОВЕ ОКСИДА ГРАФЕНА И ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОГО Фуллерена В ПРОДУКТАХ ПИТАНИЯ  
Абрамов И.А., Гайнанова С.И.....120

ИССЛЕДОВАНИЕ ГРУППОВОГО СОСТАВА НЕФТЯНЫХ СУЛЬФОКСИДОВ И СУЛЬФОНОВ МЕТОДОМ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОГО РАЗДЕЛЕНИЯ НА СИЛИКАГЕЛЕ  
Аврамович Д.Д., Шарифуллин А.В., Гимадетдинова Р.Ф., Зарифянова М.З.....121

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ВАЛОВОГО СОДЕРЖАНИЯ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ В ПОЧВАХ ПРИСУЛАКСКОЙ НИЗМЕННОСТИ АТОМНО-АБСОРБЦИОННОЙ СПЕКТРОМЕТРИЕЙ Азиева Д.С., Каспарова М.А.....	121
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ФРАГМЕНТОВ МОЛЕКУЛ НЕФТЯНЫХ АСФАЛЬТЕНОВ МЕТОДОМ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ Амангельда А.А., Турышева А.И., Ширяева Р.Н.....	124
ОПРЕДЕЛЕНИЕ КАРОТИНА И ЛЮТЕИНА В ТЫКВЕ МЕТОДОМ ТОНКОСЛОЙНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ Андреева И.И., Гайнуллина Ю.Ю.....	126
УСТАНОВЛЕНИЕ КАРОТИНОИДНОГО СОСТАВА ТЫКВЫ РОССИЯНКА Андреева И.И., Гайнуллина Ю.Ю.....	127
ИССЛЕДОВАНИЕ КАРОТИНОИДНОГО СОСТАВА ТЫКВ ВИДА CUCURBITA MAXIMA МЕТОДОМ ТОНКОСЛОЙНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ Андреева И.И., Гайнуллина Ю.Ю.....	128
КАРОТИНОИДНЫЙ СОСТАВ КРУПНОПЛОДНОГО ВИДА ТЫКВ Андреева И.И., Гайнуллина Ю.Ю.....	129
ИССЛЕДОВАНИЕ КАРОТИНОИДНОГО СОСТАВА ТЫКВ ТВЁРДОКОРОГО ВИДА МЕТОДОМ ТОНКОСЛОЙНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ Андреева И.И., Гайнуллина Ю.Ю.....	130
ИССЛЕДОВАНИЕ КАРОТИНОИДНОГО СОСТАВА ТЫКВ МУСКАТНОГО ВИДА МЕТОДОМ ТОНКОСЛОЙНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ Андреева И.И., Гайнуллина Ю.Ю.....	131
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ДРЕВЕСНОЙ ЗОЛЫ В КАЧЕСТВЕ УДОБРЕНИЯ ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ВИДОВ СУБСТРАТОВ Аникаева О.А., Трубачева Л.В. ....	132

ОКСИТЕРМОГРАФИЯ – НОВАЯ СТУПЕНЬ В РЕШЕНИИ ПРОБЛЕМЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОРБЦИОННОЙ ЁМКОСТИ ПОРИСТЫХ МАТЕРИАЛОВ	
Воробьёва М.Ю., Зуев Б.К., Философов Д.В.....	134
СЕНСОР НА ОСНОВЕ ПАСТОВОГО ЭЛЕКТРОДА МОДИФИЦИРОВАННОГО КОМПЛЕКСНЫМ СОЕДИНЕНИЕМ НИКЕЛЯ (II) С ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫМИ ЛИГАНДАМИ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ И РАСПОЗНАВАНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ АТЕНОЛОЛА	
Зекиева А.Ф., Терес Ю.Б., Волкова А.....	136
ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР НА ОСНОВЕ ГРАФИТИРОВАННОЙ САЖИ CARBOBLACK С И НАНОРАЗМЕРНОГО ЦЕОЛИТА MFI ДЛЯ РАСПОЗНАВАНИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ ТРИПТОФАНА	
Зекиева А.Ф., Сычева М.А., Терес Ю.Б.....	138
ТРЕБОВАНИЯ К ПРИГОДНОСТИ ХРОМАТОГРАФИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ (РАЗРЕШЕНИЕ) ПРИ КОНТРОЛЕ КАЧЕСТВА ЛЕКАРСТВЕННОГО ПРЕПАРАТА МНН ФАВИПИРАВИР	
Зотова М.А., Ускова Е.Н., Долганов А.В.....	138
ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ УРАНА (VI) С ПРИМЕНЕНИЕМ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИ АКТИВИРОВАННЫХ SCREEN PRINTED ЭЛЕКТРОДОВ	
Исакова Д.Т., Аронбаев Д.М., Аронбаев С.Д. ....	142
КИНЕТИКА СОРБЦИИ СТЕРОИДНОГО САПОНИНА <i>TRIBULUS</i> <i>TERRESTRIS</i> НА ХИТОЗАНЕ	
Ищенко У.С., Мироненко Н.В., Селеменев В.Ф.....	144
ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЖЕЛЕЗА (III) И ВАНАДИЯ (V) В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ПРИ СОВМЕСТНОМ ПРИСУТСТВИИ НА ЗОЛОТОУГЛЕРОДСОДЕРЖАЮЩЕМ ЭЛЕКТРОДЕ	
Ковалева Ю.Н., Фомина А.Э., Нипрук О.В.....	147
РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ АНТИБИОТИКОВ ТЕТРАЦИКЛИНОВОГО РЯДА В ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМАХ	
Лобанова Е.Е., Ускова Е.Н.....	148

ВЛИЯНИЕ УФ-ИЗЛУЧЕНИЯ НА СТАБИЛЬНОСТЬ ЛЕКАРСТВЕННОГО ПРЕПАРАТА МНН ФАВИПИРАВИР Минькин В.С., Зотова М.А., Ускова Е.Н.....	151
ВОЛЬТАМПЕРАМЕТРИЧЕСКАЯ СЕНСОРНАЯ ПЛАТФОРМА НА ОСНОВЕ ЗОЛОТОГО ЭЛЕКТРОДА, МОДИФИЦИРОВАННОГО ПОЛИАНИЛИНОМ С МОЛЕКУЛЯРНЫМИ ОТПЕЧАТКАМИ, ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АНТИБИОТИКОВ Мухамедьянова А.А., Попова А.А., Перфилова Ю.А..	153
НОВЫЕ ХИРАЛЬНЫЕ МОДИФИКАТОРЫ ДЛЯ СЕЛЕКТИВНОГО РАСПОЗНАВАНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ ТРИПТОФАНА Мухаметдинов Ч.Р., Терес Ю.Б.....	154
ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНО ИМПРИНТИРОВАННОГО ПОЛИ-3,4-ЭТИЛЕНДИОКСИТИОФЕНА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ ТРИПТОФАНА Назыров М.И., Умутбаев Н.С., Абдуллин Я.Р.....	157
ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОФЕИНА С ПОМОЩЬЮ ЭЛЕКТРОДА МОДИФИЦИРОВАННОГО ЛИГНОСУЛЬФОНАТОМ Речкалов А.С., Агеенко Е.И. ....	158
ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ АМИНОКИСЛОТНЫХ КОМПЛЕКСОВ МЕДИ И ЦИНКА ДЛЯ РАСПОЗНАВАНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ НАПРОКСЕНА Сычева М.А. ....	159
ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОФЕИНА С ПОМОЩЬЮ ЭЛЕКТРОДА, МОДИФИЦИРОВАННОГО КОМПЛЕКСОМ Cu (II) С 8-ОКСИХИНОЛИНОМ Толстых С.А., Агеенко Е.И. ....	160
ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЖЕЛЕЗА (III) И ХРОМА (VI) В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ МЕТОДОМ ДОБАВОК НА МОДИФИЦИРОВАННОМ УГЛЕРОДСОДЕРЖАЮЩЕМ ЭЛЕКТРОДЕ Фомина А.Э., Ковалева Ю.Н., Нипрук О.В. ....	161
ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ПЕНИЦИЛЛАМИНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ СЕНСОРА НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА Хайретдинова А.А., Перфилова Ю.А.....	162

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СТАБИЛЬНОСТИ ЛП МНН ФАВИПИРАВИР В УСЛОВИЯХ СТРЕСС-ИСПЫТАНИЙ МЕТОДОМ ВЭЖХ Щукина Ю.Н., Зотова М.А., Ускова Е.Н. ....	163
--	-----

### **СЕКЦИЯ «ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»**

СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С МЕРКАПТОПУРИНОМ Абдуллина А.З. ....	167
ВЛИЯНИЕ НЕИОНОГЕННОГО И АНИОННОГО ФЛОКУЛЯНТОВ НА ЦЕМЕНТАЦИЮ КАДМИЯ ПОРОШКОМ ЦИНКА Агеенко Е.И., Колесников А.В. ....	168
СОРБЦИЯ ПРОИЗВОДНЫХ БЕНЗОТРИАЗОЛА И 1,2,4-ТРИАЗОЛА В УСЛОВИЯХ ОФ ВЭЖХ Алексеев Н., Курбатова С.В. ....	169
DFT ИССЛЕДОВАНИЕ РЕГИОИЗОМЕРОВ ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ ГАЛОГЕНМЕТИЛКЕТОНОВ К ФУЛЛЕРЕНУ Алексеева О.Л., Саттарова А.Ф. ....	171
ИССЛЕДОВАНИЕ ЭКСТРАКЦИИ ЦИНКА ИЗ РАСТВОРОВ СОЛЯНОЙ КИСЛОТЫ ДИГЕКСИЛСУЛЬФОКСИДОМ Афзалетдинова Н. Г., Цыкалова М.М., Гайнуллина Ю.Ю. ....	173
КИНЕТИКА ОЗОНИРОВАННОГО ОКИСЛЕНИЯ ОРОТОВОЙ КИСЛОТЫ В ВОДНОЙ СРЕДЕ Бадретдинова Ю.И., Борисова Н.С., Зимин Ю.С. ....	174
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПОДГОТОВКИ АЛЮМИНИЕВОЙ ФОЛЬГИ НА СИНТЕЗ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК НА ЕЁ ПОВЕРХНОСТИ Барков А.Г., Мишинкин В.Ю., Кузьмина Е.В., Колосницын В.С. ....	175
СТРУКТУРНАЯ ИЗОМЕРИЗАЦИЯ ГЕКСААДДУКТА НА ОСНОВЕ ФУЛЛЕРЕНА C <sub>60</sub> И КАМФОРЫ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАЗВУКА Боровик Е.В., Кинзябаева З.С., Ахметов А.Р., Алехина И.Е. ....	177
НОВЫЙ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЙ КОМПЛЕКС ДВУХВАЛЕНТНОГО ЕВРОПИЯ С КОРИЧНОЙ КИСЛОТОЙ Василук К.С., Якупова С.М. ....	179

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ 5-ФТОРУРАЦИЛА И ОРОТОВОЙ КИСЛОТЫ С $\alpha$ -, $\beta$ - И $\gamma$ -ЦИКЛОДЕКСТРИНАМИ Гадиева Э.А., Фатхулова А.М. ....	180
МОДИФИКАЦИЯ АНОДОВ НА ОСНОВЕ ОКСИДОВ МАРГАНЦА И КОБАЛЬТА ОКСИДАМИ ВОЛЬФРАМА И МОЛИБДЕНА ДЛЯ ЭЛЕКТРОЛИЗА РАЗБАВЛЕННЫХ ХЛОРИДНЫХ РАСТВОРОВ Ганган Ю.В, Щитовская Е.В.....	181
ПРИМЕНЕНИЕ СЕРНИСТОГО АНГИДРИДА В КАЧЕСТВЕ РАСТВОРИТЕЛЯ В СОСТАВЕ ЛИТИЕВЫХ ЭЛЕКТРОЛИТОВ Гарипов Д.Р., Мишинкин В.Ю., Голубятникова Л.Г., Кузьмина Е.В.....	183
РАСПРЕДЕЛЕНИЕ ЭФФЕКТИВНЫХ ЗАРЯДОВ НА АТОМАХ БОР-НИТРИДНЫХ НАНОТРУБОК (5,0) И (3,3) В ПОСТОЯННОМ ЭЛЕКТРИЧЕСКОМ ПОЛЕ Томилин О.Б., Родионова Е.В., Родин Е.А., Голякова Е.А.....	185
ВЛИЯНИЕ СЕРЕБРА НА ФАЗОВЫЙ СОСТАВ СФЕРИЧЕСКОГО ПОРОШКА ИЗ СТАЛИ 03X17H10M2 Горбенко А.Д., Каплан М.А.....	186
ИССЛЕДОВАНИЕ ТРИТЕРПЕНОВЫХ ЛУПАНОВЫХ НИТРОНОВ МЕТОДОМ ЭПР. Гумеров Э.И., Садыков Р.А., Орлов А.В., Комиссарова Н.Г., Алехина И.Е..	188
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ АЦЕТИЛСАЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ С ОКИСЛЕННОЙ ФРАКЦИЕЙ АРАБИНОГАЛАКТАНА Давлетшина Д.Т., Васильева Ю.А. ....	190
ТОПОЛОГИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ АРОМАТИЧЕСКИХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ Брылева Е. А., Дудукин А.А., Колосова Е.А.....	191
ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ ВОДОРАСТВОРИМЫХ ПОЛИМЕРОВ, ДОПИРОВАННЫХ УГЛЕРОДНЫМИ ТОЧКАМИ Заворотько А.Э., Арменков К.В., Крупин А.С., Галеева А.И., Галяметдинов Ю.Г.....	193

РАТИОМЕТРИЧЕСКИЙ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЙ ТЕРМОСЕНСОР НА ОСНОВЕ АНИЗОМЕТРИЧНОГО КОМПЛЕКСА ЕВРОПИЯ(III) И КВАНТОВЫХ ТОЧЕК	
Зиятдинова Р.М., Сагдеев Д.О., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г. ....	195
ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЙ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЙ МАТЕРИАЛ НА ОСНОВЕ ПОЛИСТИРОЛА, ДОПИРОВАННОГО АНИЗОМЕТРИЧНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ $Eu^{3+}$ И $Tb^{3+}$	
Зиятдинова Р.М., Крупин А.С., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г. ....	197
ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ 1-БЕНЗИЛ-4-ОКТИЛ-1,2,3-ТРИАЗОЛА С ХЛОРИДОМ МЕДИ(II) В АЦЕТОНЕ	
Иванов К.С., Алехина И.Е., Пышкин А.А., Лобов А.Н., Хамитов Э.М., Иванов С.П. ....	198
КОМПЛЕКСЫ ДИГИДРОКВЕРЦЕТИНА С ИОНАМИ ДВУХВАЛЕНТНЫХ БИОГЕННЫХ МЕТАЛЛОВ	
Исмагилова И.И. ....	199
СОРБЦИЯ ИОНОВ ХРОМА (VI) НА КОМПОЗИТЕ ПОЛИ-О- ТОЛУИДИН/УГЛЕРОДНЫЕ НАНОТРУБКИ	
Исхакова Л.И., Садыков Т.Т. ....	200
ПРОТОННАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ПОЛИСУРЬМЯНОЙ КИСЛОТЫ, ДОПИРОВАННОЙ ИОНАМИ НИОБИЯ	
Карабельникова Е.С., Коваленко Л.Ю., Бурмистров В.А. ....	201
МИКРОЭМУЛЬСИЯ АОТ/ВОДА/ИЗОПРОПИЛМИРИСТАТ ДЛЯ ДОСТАВКИ ЦИТОХРОМА С	
Константинова М.А., Саутина Н.В., Галяметдинов Ю.Г. ....	204
ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ И ОСВЕЩЕНИЯ СИНТЕЗА НА ПРОЦЕССЫ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ ОКСИГИДРОКСИДА ЦИРКОНИЯ.	
Криволапова А.Д., Куваева А.О. ....	205
КОМПЛЕКСНОЕ СОЕДИНЕНИЕ ОКСИМЕТИЛУРАЦИЛА С $\beta$ -ЦИКЛОДЕКСТРИНОМ И ЕГО ПРОТИВОЯЗВЕННАЯ АКТИВНОСТЬ	
Латыпова А.Р., Борисова Н.С., Зимин Ю.С., Гимадиева А.Р. ....	207



ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ ТОЧЕК, ДОПИРОВАННЫЕ ИОНАМИ ЕВРОПИЯ Максимова И.Д., Заворотько А.Э., Крупин А.С., Галяметдинов Ю.Г.....	208
ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ СУБМИКРОННОГО ДОЛОМИТА ПО ОТНОШЕНИЮ К ИОНАМ МЕДИ (+2) МЕТОДОМ СТАТИКИ Ильясова Р.Р., Маркелова С.В.....	210
ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ НАНОУГЛЕРОДА ПО ОТНОШЕНИЮ К ИОНАМ ЛАНТАНА (III) Мухаметдинова А.Я., Ильясова Р.Р. ....	211
ЭЛЕКТРОННЫЕ И ЭМИССИОННЫЕ СВОЙСТВА ДЕФЕКТНЫХ ОДНОСТЕННЫХ ОТКРЫТЫХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК Мякишев А.Ю., Родионова Е.В., Родин Е.А., Томилин О.Б. ....	212
ПАЛЛАДИЙ-ХРОМОВЫЕ КАТАЛИЗАТОРЫ СЕЛЕКТИВНОГО ГИДРИРОВАНИЯ АЦЕТИЛЕНА Никуленко Т.А., Мельников Д.П. ....	213
АДСОРБЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОЛИСУРЬМЯНОЙ КИСЛОТЫ ПО ОТНОШЕНИЮ К КРАСИТЕЛЮ МЕТИЛЕНОВОМУ СИНЕМУ Нуждина Ю.В., Коваленко Л.Ю. ....	214
ИЗОТЕРМЫ СОРБЦИИ КРАСИТЕЛЯ ПРЯМОГО АЛОГО ПРИРОДНЫМИ МАТЕРИАЛАМИ ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ Пигида Н.В., Горбачев А.С., Лысенко А.В.....	216
РАЗРАБОТКА СОСТАВА ГЕЛЯ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ С АНТИСЕПТИЧЕСКИМИ И АНАЛЬГЕЗИРУЮЩИМИ СВОЙСТВАМИ Попова Е.А., Фокина А.И.....	219
ОТНЕСЕНИЕ ПОЛОС ПОГЛОЩЕНИЯ ИК-СПЕКТРА $\pi$ -КОМПЛЕКСА 5-(1-ПЕНТИЛ-4-МЕТИЛ-1,2,3-ТРИАЗОЛ-4-ИЛ)-6-МЕТИЛУРАЦИЛА С ХЛОРИДОМ МЕДИ(II) Пышкин А.А., Сайтгареева Е.И., Файзрахманов И.С., Хамитов Э.М., Иванов С.П. ....	220

QSAR-МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНГИБИТОРОВ 15-ЛИПОКСИГЕНАЗЫ В РЯДУ ПРОИЗВОДНЫХ 3-ЗАМЕЩЕННЫХ ПИРАЗОЛОВ И 4-ЗАМЕЩЕННЫХ ТРИАЗОЛОВ Рассказова Я.О., Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р.....	222
ВЛИЯНИЕ НИТРОПРУССИДА НАТРИЯ НА БИОХИМИЧЕСКИЕ ПОКАЗАТЕЛИ ПШЕНИЦЫ ПРИ ДЕЙСТВИИ ЦИНКА Рахматуллина С.Р.....	223
КОМПЛЕКСЫ ЛАНТАНОИДОВ С 1,2,3 – ТРИАЗОЛАМИ: ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ И БИОАКТИВНЫЕ СВОЙСТВА Селиванова Н.М., Рыбакова А.И., Семенов В.Э.....	225
ЭЛЕКТРИЧЕСКАЯ ПРОВОДИМОСТЬ ВОДНО-АЦЕТОНИТРИЛЬНЫХ РАСТВОРОВ ПРОИЗВОДНЫХ ХИНОЛИНА Сенокосова А., Финкельштейн Е.Е.....	226
ВЛИЯНИЕ ФЛОКУЛЯНТОВ НА ЭЛЕКТРОЛИЗ ЦИНКА В КИСЛОЙ СРЕДЕ Смородина Л.А., Шайкина Д.А., Агеенко Е.И., Колесников А.В.....	228
ФЕНОТИАЗИНЫ В КАЧЕСТВЕ ИНГИБИТОРОВ РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОГО ОКИСЛЕНИЯ 1,4-ДИОКСАНА Султанова А.Д., Шареева К.С., Сафарова И.В., Шайморданова Г.М.....	228
ЯНУС НАНОТРУБКИ ХИРАЛЬНОСТИ (5,0) и (3,3) СОСТАВА $(\text{BN})_x\text{C}_{2x}$ И ИХ ЭМИССИОННЫЕ СВОЙСТВА Томилин О.Б., Родионова Е.В., Родин Е.А., Киселева Е.А.....	230
ПРИМЕНЕНИЕ ЯВЛЕНИЯ ФОТОПЕРЕНОСА ПРОТОНА ДЛЯ СОЗДАНИЯ ОПТИЧЕСКОГО СЕНСОРА КИСЛОТНОСТИ СРЕДЫ Устинова К.А., Наумова А.О., Мельников П.В.....	231
КИНЕТИКА РЕАКЦИИ ДИЛЬСА-АЛЬДЕРА ТИОФЛУОРЕНОНА С <i>ТРАНС,ТРАНС</i> -1,4-ДИФЕНИЛБУТАДИЕНОМ-1,3 З.А. Фазылова, Д.А. Корнилов, А.Г. Мустафин.....	232
МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ ПРОИЗВОДНЫХ 3,4-ДИГИДРОПИРИМИДИН-2-ТИОНА В АКТИВНЫЙ ЦЕНТР 5-ЛИПОКСИГИНАЗЫ Хайруллина В.Р., Мартынова Ю.З., Максимов Л.С.....	233

QSAR-МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНГИБИТОРОВ ВИРУСА ТАБАЧНОЙ МОЗАИКИ Хамитова Г.М., Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р., Насретдинова Р.Н.....	235
ВЛИЯНИЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА НА ХАРАКТЕРИСТИКИ ОПТИЧЕСКОГО СЕНСОРА МОЛЕКУЛЯРНОГО КИСЛОРОДА Ходкина А.С., Наумова А.О., Мельников П.В.....	236
ОСОБЕННОСТИ СМАЧИВАНИЯ ПОЛИМЕРНЫХ ПОВЕРХНОСТЕЙ СИСТЕМАМИ НА ОСНОВЕ МОНОДОДЕЦИЛОВОГО ЭФИРА ТЕТРАЭТИЛЕНГЛИКОЛЯ С УГЛЕРОДНЫМИ ТОЧКАМИ Хуснутдинова Р.И., Галеева А.И., Крупин А.С., Галяметдинов Ю.Г.....	238
ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА $ZnIn_2S_4$ В ПРИСУТСТВИИ КИСЛОРОДА Шамилов Р.Р., Музипов З.М., Галяметдинов Ю.Г. ....	240
КИНЕТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОГО ОКИСЛЕНИЯ 1,4-ДИОКСАНА В ПРИСУТСТВИИ 3-ГИДРОКСИТЕТРАГИДРОФУРАНА Шараева К.С., Сафарова И.В., Охиров Ш.М., Латыпова Э.Р. ....	242
QSAR-МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНГИБИТОРОВ 5-ЛИПОКСИГЕНАЗЫ В РЯДУ ПРОИЗВОДНЫХ N-ГИДРОКСИМОЧЕВИНЫ Шарипова Р.Р., Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р.....	243
ИЗУЧЕНИЕ СЕЛЕКТИВНОСТИ ЗАМЕЩЕНИЯ 2,4-ДИХЛОРПИРИМИДИНА В РЕАКЦИЯХ КРОСС-СОЧЕТАНИЯ Швецов А.Б., Семёнов А.В.....	245
ВЛИЯНИЕ ПРИСУТСТВИЯ СОКА ПЛОДОВ ОБЛЕПИХИ НА СКОРОСТЬ РЕАКЦИЙ ОКИСЛЕНИЯ ЭТИЛБЕНЗОЛА Юрьева А.О., Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н.....	247
СОНОХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИЯ РАСТВОРОВ АРОМАТИЧЕСКИХ ЛЮМИНОФОРОВ В ПРИСУТСТВИИ БИС-(2,4-ДИНИТРОФЕНИЛ) ОКСАЛАТА Якшембетова Л.Р., Абдрахманов А.М., Гареев Б.М., Шарипов Г.Л. ....	248

## **СЕКЦИЯ «ХИМИЯ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ»**

**КОМПОЗИЦИОННЫЙ ДЕЭМУЛЬГАТОР ДЛЯ ПОДГОТОВКИ ТЯЖЕЛОЙ  
ВЫСОКОВЯЗКОЙ НЕФТИ**

Амангельда А.А., Турышева А.И., Ширяева Р.Н.....251

**МЕТОДИКА ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ ЗАМЕСТИТЕЛЕЙ В  
ГИДРОКСИПРОПИЛМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЕ С ПОМОЩЬЮ ЯМР <sup>1</sup>H  
СПЕКТРОСКОПИИ**

Асфандеев А.Ю., Калязин В.А., Яшина Е.Е., Кострюков С.Г.....252

**ХИТОЗАН КАК ОСНОВА ДЛЯ СОЗДАНИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ**

Бадыркеева Л.Д. ....254

**ПЕРЕРАБОТКА ПОЛИМЕРОВ**

Бакиров И.Р., Судакова О.М.....255

**ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ МАТЕРИАЛОВ НА  
ОСНОВЕ ПОЛИКАПРОЛАКТОНА И ЛЕКАРСТВЕННОГО ВЕЩЕСТВА**

Бакирова Э.Р., Сунаргулов А.Б., Гарипова Л.Г. ....256

**ПОДХОДЫ К СОЗДАНИЮ МЯГКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ НА  
ОСНОВЕ ПЕКТИНА**

Брызгалова М.Е., Афанасьева М.А., Лаздин Р.Ю.....257

**КОНТРАСТНЫЕ РЕАГЕНТЫ НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСОВ  
ГИПЕРРАЗВЕТВЛЕННОГО**

**ПОЛИЭФИРОПОЛИБЕНЗОИЛТИОКАРБАМАТА ДОПИРОВАННОГО  
ИОНАМИ Dy(II) И Gd(II)**

Вагапова А.И., Кутырев Г.А.....258

**ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ НА МИЦЕЛЛООБРАЗОВАНИЕ  
ПОЛИМЕРНОГО ПАВ PLURONIC P123**

Газарян Д.А., Слепцова О.В.....259

**ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ ХИТОЗАНА В МЕДИЦИНЕ**

Валиахметова Л.Р. ....261

РАНЕЗАЖИВЛЯЮЩИЕ ПЛАСТИНЫ НА ОСНОВЕ СМЕСЕЙ НАТРИЕВЫХ СОЛЕЙ СУКЦИНИЛХИТОЗАНА И КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ Гареева З.Д., Алмаев Б.Ф.....	262
РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИКАПРОЛАКТОНА И ЛЕКАРСТВЕННОГО ВЕЩЕСТВА Гарипова Л.Г., Бакирова Э.Р., Сунаргулов А.Б.....	264
ОСОБЕННОСТИ ОСАЖДЕНИЯ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА В НАНОГЕЛИ НА ОСНОВЕ ПОЛИ-N-ВИНИЛКАПРОЛАКТАМА С.А. Гомозова, Т.А. Бесчетнова, О.В. Слепцова .....	265
ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ 1-НАФТИЛАМИНА ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ ЭЛЕКТРОПРОВОДЯЩЕГО ПОЛИМЕРА Гордеев Д.Н., Гимадиева А.Р., Мустафин А.Г.....	266
ТЕРМОДЕФОРМАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА БАЗАЛЬТОПЛАСТИКОВ НА ОСНОВЕ МОДИФИЦИРОВАННОГО ПОЛИЭТИЛЕНА ВЫСОКОЙ ПЛОТНОСТИ Гулиева О.М., Кахраманов Н.Т. ....	267
МЕТАЛЛСОДЕРЖАЩИЕ НАНОКОМПОЗИТНЫЕ ТЕРМОЭЛАСТОПЛАСТЫ НА ОСНОВЕ ИЗОТАКТИЧЕСКОГО ПОЛИПРОПИЛЕНА Гулиева Т.М., Курбанова Н.И. ....	269
СРАВНЕНИЕ РАЗЛИЧНЫХ МАРОК АБС-ПЛАСТИКА ПОСРЕДСТВАМ ДИФФЕРЕНЦИАЛЬНОЙ СКАНИРУЮЩЕЙ КАЛОРИМЕТРИИ. Ионова А.Д., Любина Е.П., Яковлев И.Д. ....	270
ПЕРСПЕКТИВА ПРИМЕНЕНИЯ ПОЛИМЕРОВ РАСТИТЕЛЬНОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ В СОСТАВЕ ЖИДКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ. Исаева А.В.....	271
ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ ПОЛИМЕРОВ В МЕДИЦИНЕ Исмагилова Э.Ш.....	272
ИССЛЕДОВАНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИКАПРОЛАКТОНА С АМИКАЦИНОМ Казыргалин А.И., Якупов М.Р., Бакирова Э.Р. ....	273

ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА С АМИКАЦИНОМ Казыргалин А.И., Якупов М.Р., Бакирова Э.Р.....	274
ИЗУЧЕНИЕ СКОРОСТИ ГИДРОЛИТИЧЕСКОЙ ДЕСТРУКЦИИ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ВТОРИЧНОГО ПОЛИПРОПИЛЕНА, НАПОЛНЕННОГО ДРЕВЕСНОЙ МУКОЙ Калсева В.В. ....	275
МЕТОДИКА ВЫДЕЛЕНИЯ ПЕКА ИЗ СМОЛЫ ПОЛУКОКСОВАНИЯ СРЕДНЕМЕТАМОРФИЗИРОВАННОГО УГЛЯ Ковалев Р.Ю., Никитин А.П. ....	278
ПОЛУЧЕНИЕ ПЕКОВ ИЗ СМОЛЫ ПОЛУКОКСОВАНИЯ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ СВОЙСТВ Ковалев Р.Ю., Никитин А.П.....	280
ОСОБЕННОСТИ ДЕСТРУКЦИИ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА, ПЛАСТИФИЦИРОВАННОГО ДИИЗОНОНИЛАДИПИНАТОМ Королев И.Н., Нафикова Р.Ф., Ахметханов Р.М.....	282
ЗАКОНОМЕРНОСТИ ГИДРОЛИЗА ПОЛИМЕРОВ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В СОСТАВЕ БУРОВЫХ РАСТВОРОВ Кузьмин Д.А., Валиева О.И., Борисов И.М. ....	285
ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ГИДРОЛИЗА ПОЛИМЕРОВ НА РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА БУРОВЫХ РАСТВОРОВ Кузьмин Д.А., Валиева О.И., Борисов И.М.....	286
ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОЙ АКТИВНОСТИ О ВОЗМОЖНОСТИ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ РАСТВОРОВ ПОЛИСАХАРИДОВ В КАЧЕСТВЕ ЗАМЕНИТЕЛЯ СИНОВИАЛЬНОЙ ЖИДКОСТИ Лаздин Р.Ю. ....	286
СРАВНЕНИЕ РАЗЛИЧНЫХ МАРОК АБС-ПЛАСТИКА ПОСРЕДСТВАМ ТЕРМОГРАВИМЕТРИЧЕСКОГО АНАЛИЗА Любина Е.П., Ионова А.Д., Яковлев И.Д.....	287
ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ АМИКАЦИНА НА ВЯЗКОСТЬ ПЕКТИНА Минагина А.А., Лаздин Р.Ю.....	288

ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ГИДРОКСИДА АЛЮМИНИЯ НА РАЗРУШАЮЩЕЕ НАПРЯЖЕНИЕ КОМПОЗИТОВ PP-R/PPH-g- МАН/Al(OH) <sub>3</sub> Мустафаева Ф.А., Кахраманов Н.Т., Абдалова С.Р.....	289
О КОНФОРМАЦИОННО-НАДМОЛЕКУЛЯРНОМ СОСТОЯНИИ В РАСТВОРАХ ПОЛИСАХАРИДОВ И ИХ СМЕСЕЙ В ПРИСУТСТВИИ ЛЕКАРСТВЕННОГО ВЕЩЕСТВА ЭЛЕКТРОЛИТНОЙ ПРИРОДЫ Набутова К.В., Базунова М.В., Яхина Г.С.....	291
ВЛИЯНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ВОЛОКНИСТОГО МИНЕРАЛА НА ТЕРМОМЕХАНИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА Нуралиева Г.Х., Кахраманов Н.Т. ....	293
СИНТЕЗ ГИДРОГЕЛЕЙ В УСЛОВИЯХ ГЕТЕРОФАЗНОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ В ОБРАТНОЙ ЭМУЛЬСИИ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ ПРОТИВОЭРОЗИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК Пешкова А.С., Кущев П.О.....	295
ЗАКОНОМЕРНОСТИ ГИДРОЛИЗА ПОЛИМЕРОВ, ИСПОЛЬЗУЕМЫХ В СОСТАВЕ ПРОМЫВОЧНЫХ ЖИДКОСТЕЙ Родникова К.А., Валиева О.И., Борисов И.М.....	296
ГЕЛЕВЫЕ ЛЕКАРСТВЕННЫЕ ФОРМЫ НА ОСНОВЕ СУКЦИНИЛ ХИТОЗАНА Рыбченко Д.Е. ....	297
СПОСОБЫ УМЕНЬШЕНИЯ ЖЁСТКОСТИ ПЛЁНОЧНЫХ ОБРАЗЦОВ НА ОСНОВЕ ПЕКТИНА Саликаева С.В., Лаздин Р.Ю.....	298
ПОЛИСАХАРИДЫ В КАЧЕСТВЕ ОСНОВЫ ДЛЯ СОЗДАНИЯ МЯГКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ Сафина П.И.....	299
ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССОВ ПОГЛОЩЕНИЯ И ВЫСВОБОЖДЕНИЯ КОМПЛЕКСА БОРНОЙ КИСЛОТЫ И ГЛИЦЕРИНА АКРИЛОВЫМ ГИДРОГЕЛЕМ Скорлуханова А.В., Кущев П.О.....	300

ЭЛЕКТРОПРОВОДИМОСТЬ ТОНКОПЛЕЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИСАХАРИДОВ И НАНОЧАСТИЦЫ ЙОДИДА СЕРЕБРА ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ АММИАКА Терегулов Т.Б.....	302
ПРИМЕНЕНИЕ НАТРИЕВОЙ СОЛИ КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ В МЕДИЦИНЕ Уельданова Э.С.....	304
ОСОБЕННОСТИ ВЫСВОБОЖДЕНИЯ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ ИЗ ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЫ В УСЛОВИЯХ ФЕРМЕНТАТИВНОГО ГИДРОЛИЗА Фазылов В.Х.....	305
ВЛИЯНИЕ ПЕНОСТЕКЛА НА ПЛОТНОСТЬ КОМПОЗИЦИОННЫХ СОСТАВОВ Фараизов И.И., Тимофеев В.П., Махмутов А.Р., Ковшов А.Ю., Талипов Р.Ф.....	306
ИНТУМЕНСЦЕНТАЯ СИСТЕМА В СОСТАВЕ КОМПОЗИТНОГО СТЕКЛОПЛАСТИКОВОГО МАТЕРИАЛА Фараизов И.И., Тимофеев В.П., Махмутов А.Р., Ковшов А.Ю.....	307
ПОЛИМЕРНАЯ КОМПОЗИЦИЯ С ПРИМЕНЕНИЕМ БЕЗГАЛОГЕНОВЫХ АНТИПИРЕНОВ НА ОСНОВЕ ФОСФОРА И АЗОТА Фараизов И.И., Тимофеев В.П., Махмутов А.Р., Ковшов А.Ю., Талипов Р.Ф.....	309
ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА СТЕКЛОПЛАСТИКОВОГО МАТЕРИАЛА, НАПОЛНЕННОГО ПЕНОСТЕКЛОМ Фараизов И.И., Тимофеев В.П., Махмутов А.Р., Ковшов А.Ю., Талипов Р.Ф.....	311
СИНТЕЗ ГИДРОГЕЛЕВОЙ МЕМБРАНЫ НА ОСНОВЕ ЖЕЛАТИНА, МОДИФИЦИРОВАННОГО СИЛИЛИРУЮЩИМ АГЕНТОМ, ДЛЯ ХИМИЧЕСКИХ СЕНСОРОВ Фомина Е.Д., Лунева К.В., Рябков Е.Д.....	313
ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ПОГЛОЩЕНИЯ И ВЫСВОБОЖДЕНИЯ КОМПЛЕКСА СУЛЬФАТА МАРГАНЦА И ГЛИЦИНА АКРИЛОВЫМ ГИДРОГЕЛЕМ Юткина А.И., Кущев П.О.....	315



При подготовке электронного издания использовались следующие программные средства:

- Adobe Acrobat – текстовый редактор;
- Microsoft Word – текстовый редактор.

Все права защищены. Книга или любая ее часть не может быть скопирована, воспроизведена в электронной или механической форме, в виде фотокопии, записи в память ЭВМ, репродукции или каким-либо иным способом, а также использована в любой информационной системе без получения разрешения от издателя. Копирование, воспроизведение и иное использование книги или ее части без согласия издателя является незаконным и влечет уголовную, административную и гражданскую ответственность.

*Научное издание*

## **ДОСТИЖЕНИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ: ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ**

***Сборник тезисов  
IX Всероссийской молодежной конференции  
(г. Уфа, 23 – 24 мая 2024 г.)***

*Электронное издание сетевого доступа*

*За достоверность информации, изложенной в статьях,  
ответственность несут авторы.  
Статьи публикуются в авторской редакции*

Подписано к использованию 01.07.2024 г.  
Гарнитура «Times New Roman». Объем 13,04 Мб.  
Заказ 31.

*ФГБОУ ВО «Уфимский университет науки и технологий»  
450008, Башкортостан, г. Уфа, ул. Карла Маркса, 12.*

Тел.: +7-908-35-05-007  
e-mail: ric-bdu@yandex.ru