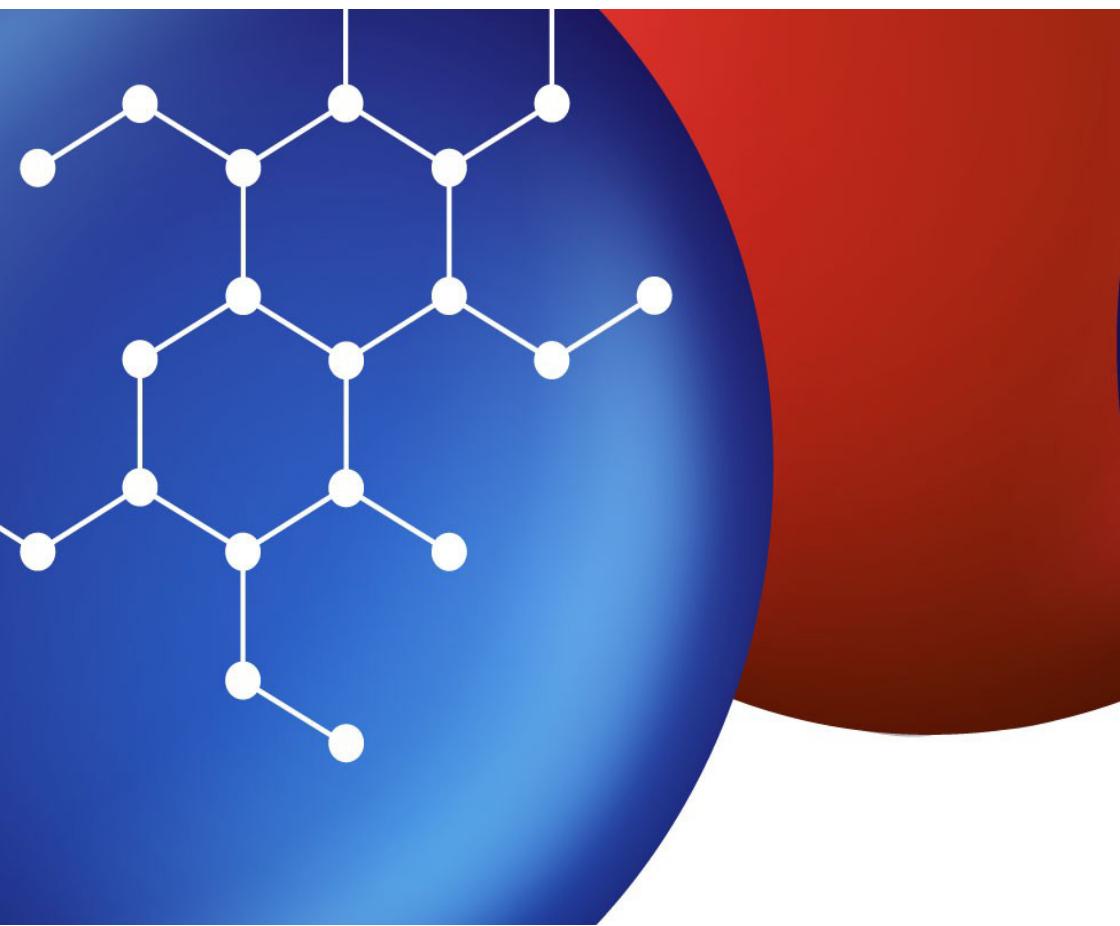


ПРОБЛЕМЫ И ДОСТИЖЕНИЯ ХИМИИ КИСЛОРОД- И АЗОТСОДЕРЖАЩИХ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Сборник тезисов
IX Всероссийской молодежной конференции
(г. Уфа, 20–21 ноября 2025 г.)



Министерство науки и высшего образования РФ
Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Уфимский университет науки и технологий»

**ПРОБЛЕМЫ И ДОСТИЖЕНИЯ ХИМИИ
КИСЛОРОД- И АЗОТСОДЕРЖАЩИХ
БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ**

*Сборник тезисов
IX Всероссийской молодежной конференции
(г. Уфа, 20–21 ноября 2025 г.)*

Научное электронное издание сетевого доступа

Уфа
Уфимский университет
2025

УДК 547

ББК 24.2

П78

*Публикуется по решению кафедры органической
и биоорганической химии УУНиТ.
Протокол № 10 от 18.11.2025 г.*

Редакционная коллегия:

д-р хим. наук, профессор Э.Р. Латыпова (отв. ред.);

д-р хим. наук, профессор Р.Ф. Талипов;

д-р хим. наук, профессор А.Г. Мустафин;

д-р хим. наук, профессор Ю.С. Зимин;

д-р хим. наук, профессор И.В. Вакулин;

канд. хим. наук, доцент А.Х. Фаттахов;

канд. хим. наук, доцент И.В. Сафарова;

канд. хим. наук, доцент Т.Т. Садыков;

канд. хим. наук, доцент А.Ф. Саттарова

П78 **Проблемы и достижения химии кислород- и азотсодержащих биологически активных соединений:** сборник тезисов IX Всероссийской молодежной конференции (г. Уфа, 20–21 ноября 2025 г.) / отв. ред. Э.Р. Латыпова [Электронный ресурс] / Уфимск. ун-т науки и технологий. – Уфа: Уфимский университет, 2025. – 335 с. – URL: <https://uust.ru/media/documents/digital-publications/2025/354.pdf> – Загл. с титула экрана.

ISBN 978-5-7477-6286-2

В сборнике представлены материалы конференции, которая проводилась 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 химии кислород- и азотсодержащих биологически активных соединений.

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

Тексты воспроизводятся с представленных авторами оригиналов.

УДК 547

ББК 24.2

ISBN 978-5-7477-6286-2

© Уфимский университет, 2025

Пленарные доклады

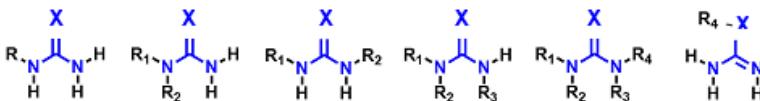
УДК 541.14: 547.1-304.2

ЗАМЕЩЕННЫЕ МОЧЕВИНЫ И ИХ ИЗОСТЕРИЧЕСКИЕ АНАЛОГИ – ПЕРСПЕКТИВНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ.

Бутов Г.М.

*Волжский политехнический институт (филиал) Волгоградского
государственного технического университета,
г. Волжский Волгоградской обл., Россия*

Мочевина и ее изостерические аналоги (тио- и селено-) зарекомендовали себя как универсальные вещества и перспективные кандидаты для разработки новых терапевтических средств против различных заболеваний. В докладе раскрываются аспекты органической и медицинской химии производных (O-, S-, Se-)мочевин.



$\text{X} = \text{O}, \text{S}, \text{Se}$

Представлены общие подходы к синтезу мочевин, их физико-химическим свойствам и природой заместителей, влияющих на биологическую активность.

Особый акцент сделан на производные мочевин, содержащих адамантильный заместитель с спейсерами различного строения, а также с заместителями различной природы в узловых и мостиковых положениях адамантана.

Приводятся методы синтеза (O-, S-, Se-)мочевин, а также прекурсоров для их получения, прежде всего изо(O-, S-, Se-)цианатов и аминов адамантанового ряда.

Получены QSAR-зависимости физико-химических свойств (растворимость в воде, температуры плавления, LogPi), ингибирующей активности от строения мочевин, природы атома халькогена.

Методами молекулярного динамического моделирования и докинга с биологическими мишениями: растворимой эпоксидгидролазой человека hsEH, циклооксигеназой ЦОГ-2 и другими, рассмотрены механизмы связывания в ингибиторах.

Показаны медико-биологические аспекты применения мочевин в таких направлениях, как противовоспалительные и обезболивающие средства, противовирусные и противопаразитарные препараты, противоопухолевые средства и другие.

Работа выполнена за счет средств программы развития ВолгГТУ «Приоритет 2030», в рамках научного проекта № 45/645-24.

© Бутов Г.М., 2025

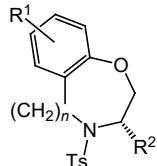
УДК 547.895

БЕНЗОКСАЗЕПИНЫ И БЕНЗОКСАЗОЦИНЫ: СПОСОБЫ
ПОЛУЧЕНИЯ, БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ ПРЕДСТАВИТЕЛИ,
СТРУКТУРНАЯ И ПРОСТРАНСТВЕННАЯ ИЗОМЕРИЯ

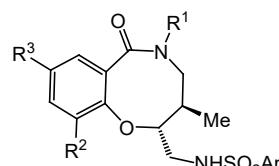
Гатауллин Р.Р.

Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

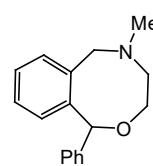
В докладе рассматриваются семи- и восьмичленные бензоконденсированные *N*, *O*-гетероциклы. Среди этих соединений обнаружены представители с высокими показателями биологической активности: регуляторы некоторых клеточных и нейрофизиологических процессов, ингибиторы ферментов или антитромботики. Планирование схемы получения и процесс синтеза, изучение свойств этих арилконденсированных гетероциклов является привлекательным направлением исследований в органической химии. В докладе обсуждаются правила нумерации атомов и буквенных обозначений сторон молекулы в названиях. Упоминаются наиболее часто используемые подходы к синтезу таких соединений.



antithrombotic agents

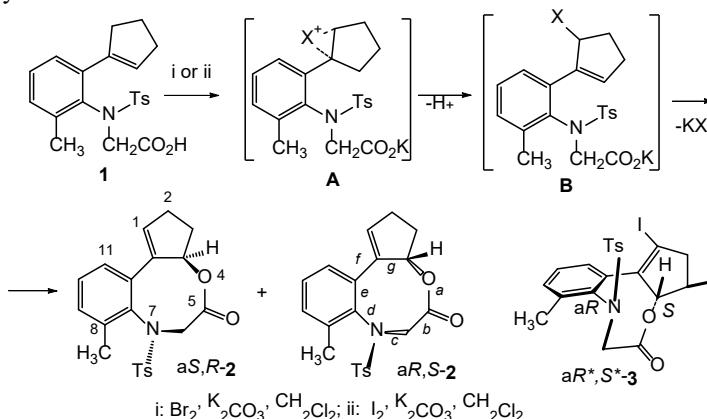


inhibitors of cellular receptors



non-opioid analgesic

Большое внимание уделено исследованиям, проведённым в УФИХ УФИЦ РАН по синтезу и изучению структурных особенностей таких молекул.



© Гатауллин Р.Р., 2025

УДК 544

ВОДОРАСТВОРИМЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ФУЛЛЕРена: ДИЗАЙН,
СИНТЕЗ И ПРИМЕНЕНИЕ В БИОМЕДИЦИНЕ И ФОТОВОЛЬТАИКЕ
Краевая О.А.,¹ Большикова В. С.,¹ Перегудов А.С.,² Зарубаев В.В.,³
Костюк С.В.,⁴ Шестаков А.Ф.,¹ Трошин П.А.^{5,1}

¹ ФИЦ Проблем химической физики и медицинской химии РАН,
Черноголовка, Россия

² Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова
РАН, Москва, Россия

³ НИИ эпидемиологии и микробиологии имени Пастера, Санкт-
Петербург, Россия

⁴ Медико-генетический научный центр имени академика Н.П. Бочкова,
Москва, Россия

⁵ Zhengzhou Research Institute of HIT, Чжэнчжоу, Китай

Фуллерены C_{60} и C_{70} , уникальные молекулярные формы углерода, долгое время считаются перспективной основой для создания новых лекарственных препаратов благодаря их выраженной антиоксидантной, противовирусной и противоопухолевой активности. Однако их практическое применение в медицине было невозможным из-за абсолютной нерастворимости в воде. Существующие методы синтеза растворимых соединений, как правило, дают низкий выход продукта и основаны на сложных методиках, что делает их непригодными для промышленного масштабирования.

Нами разработаны эффективные методы синтеза ранее неизвестных водорастворимых производных фуллеренов, основанные на реакциях хлорфуллеренов $C_{60}Cl_6$ и $C_{70}Cl_8$ с различными нуклеофилами [1-5]. Высокий выход целевых продуктов открывает путь к их крупномасштабному получению. Показано, что новые производные фуллеренов обладают целым комплексом полезных свойств, включая способность бороться с вирусами, опухолями, окислительным стрессом, а также стимулировать дифференцировку адипоцитов в клетки мышечной ткани и подавлять образование амилоидных фибрилл. Кроме того, такие соединения нашли свое применение в качестве пассивирующих слоев в первовскитных солнечных батареях. Таким образом, полученные результаты имеют практическую значимость и создают основу для разработки на основе фуллеренов новых материалов и лекарственных препаратов.

Работа поддержана проектом РНФ 25-73-10277.

Литература

1. Kraevaya O.A., Bolshakova V.S., Slita A.V., Esaulkova I.L., Zhilenkov A.V., Mikhalsky M.G., Sinegubova E.O., Voronov I.I., Peregudov A.S.,

- Shestakov A.F., Zarubaev V.V., Troshin P.A. Buckyballs to fight pandemic: Water-soluble fullerene derivatives with pendant carboxylic groups emerge as a new family of promising SARS-CoV-2 inhibitors // Bioorganic Chemistry. 2025. V. 154. P. 108097.
2. Kraevaya O.A., Peregudov A.S., Shestakov A.F., Troshin P.A. Synthesis of Cs-symmetrical C60 tetra-adducts via reactions of C60Cl₆ with CH-acids and enol silyl ester // Organic & Biomolecular Chemistry. 2024. V. 22. P. 374.
3. Bolshakova V.S., Kraevaya O.A., Esaulkova Y.L., Peregudov A.S., Khakina E.A., Slesarenko N.A., Shestakov A.F., Zarubaev V.V., Troshin P.A. Facile synthesis of amino acid decorated water-soluble fullerene derivatives with anti-influenza activity // Chinese Journal of Chemistry. 2023. V. 41, № 15. P. 1803-1808.
4. Bolshakova V.S., Kraevaya O.A., Peregudov A.S., Markov V.Yu., Kostyuk S.V., Schols D., Shestakov A.F., Troshin P.A. A regioselective step-by-step C60Cl₆ functionalization approach affords a novel family of C60Ar₅ThⁿH^m fullerene derivatives with promising antiviral properties // Chemical Communications. 2023. V. 59. P. 3882-3885.
5. Kraevaya O.A., Bolshakova V.S., Peregudov A.S., Chernyak A.V., Slesarenko N.A., Markov V.Yu., Lukonina N.S., Martynenko V.M., Sinegubova E.O., Shestakov A.F., Zarubaev V.V., Schols D., Troshin P.A. Water-Promoted Reaction of C60Ar₅Cl Compounds with Thiophenes Delivers a Family of Multifunctional Fullerene Derivatives with Selective Antiviral Properties // Organic Letters. 2021. V. 23, № 18. P. 7226-7230.

© Краевая О.А., Больщакова В. С., Перегудов А.С., Зарубаев В.В.,
Костюк С.В., Шестаков А.Ф., Трошин П.А., 2025

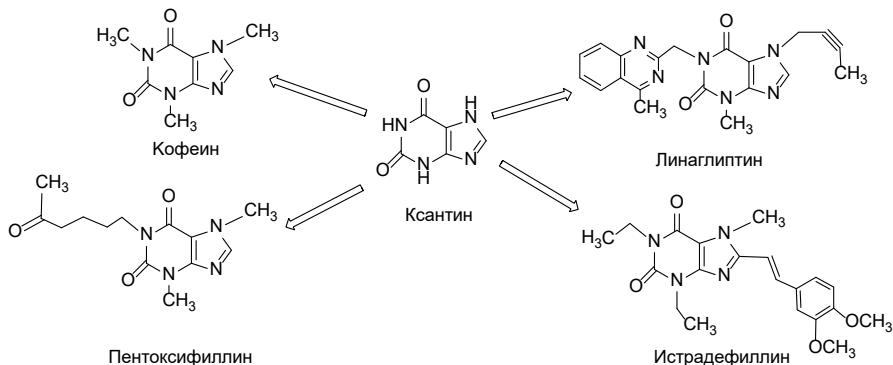
УДК 54

КСАНТИНЫ КАК ОСНОВА ДЛЯ СОЗДАНИЯ ЛЕКАРСТВ К НОВЫМ
МИШЕНИЯМ

Халиуллин Ф.А.

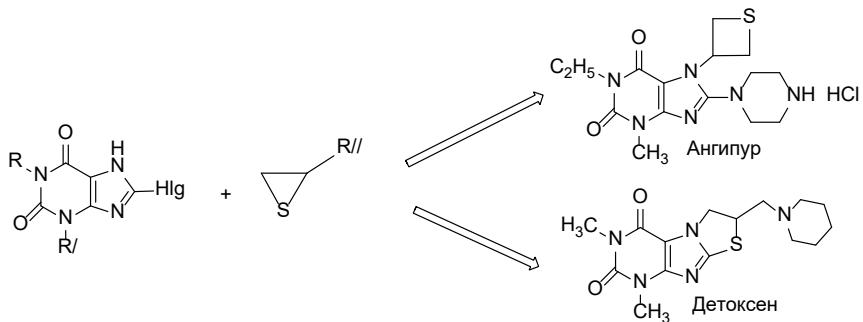
ФГБОУ ВО Башкирский государственный медицинский университет
Минздрава России, Уфа, Россия

Алкалоиды кофеин, теобромин, теофиллин являются производными пурин-2,6-диона (ксантин). Высокая фармакологическая активность природных алкалоидов стимулировала синтез большого ряда биологически активных аналогов, эффект которых реализуется через ингибирование фосфодиэстераз или antagonизм к аденоzinовым рецепторам. Созданы лекарственные препараты пентоксифиллин, дипрофиллин, истрадефиллин и др.



В последние десятилетия выявлены новые мишени, на которые действуют производные ксантина. Результатом стало создание инновационного препарата для лечения диабета: Линаглиптина – ингибитора фермента дипептидилпептидазы-4 [1]. Поиск мишеней действия ксантинов продолжается [2].

Нами разработано новое направление поиска биологически активных ксантинов на основе их реакций с тиiranами, в рамках которого созданы высокоеффективные фармакологически активные молекулы, проходящие клинические исследования: антиагрегант Ангипур [3] (3 фаза) – блокатор IIb/IIIa рецепторов тромбоцитов и гепатопротектор Детоксен [4] (1 фаза) – индукторmonoоксигеназной системы печени.



Работа выполнена в рамках реализации программы «Приоритет-2030»

Литература

- Thieme Pharmaceutical Substances. URL: <https://pharmaceutical-substances.thieme.com/ps/>
- Abu-Hashem A.A., Hakami O., El-Shazly M. et al. Chem. Biodiversity, 2024, 21, e202400050.

3. Лукьянов С.В. и др. Кардиологический вестник, 2023, 18, 61.
4. Белоусов М.В., Юсубов М.С., Халиуллин Ф.А. и др. Патент № 2660653 РФ, 2018.

© Халиуллин Ф.А., 2025

УДК 538.97

ВЛИЯНИЕ ХИМИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ НА ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ ОРГАНИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ

Юсупов А.Р.

*Башкирский государственный педагогический университет
им. М. Акмуллы, Уфа, Россия*

Современная электроника обладает широким спектром устройств, сконструированных на основе классической полупроводниковой электроники и органических материалах. Казалось бы, не особо известная обычайству область (органическая электроника), за последние десятилетия активно и эффективно внедряемая в различных отраслях экономики, становится одной из наиболее быстро развивающихся направлений исследования во всем мире. Возможность моделирования новых соединений и модификация их химической структуры является отличительной особенностью органической электроники, а применение технологий струйной печати – их преимуществом по сравнению с полупроводниковой электроникой.

Широкий класс полимерных материалов синтезируется и изучается в Республике Башкортостан. В частности, одним из активно исследуемых классов являются полигетероарилены – полимеры, в которых повторяющееся звено макромолекулы содержит как ароматические карбоциклы, так и гетероциклы. Исследования их электрофизических свойств [1] показали, что полимеры данного класса обладают уникальными свойствами, имеющими перспективы прикладного применения.

Научные исследования под руководством А.Н. Лачинова показали важную закономерность в области полимерной электроники: целенаправленное изменение структуры исходного мономера позволяет управлять электронными характеристиками получаемых полимерных материалов.

Механизм управления электрофизическими свойствами реализуется через модификацию двух ключевых элементов структуры мономера: скелетную часть молекулы и боковые фрагменты.

В докладе будут представлены основные направления исследования влияния химической структуры на свойства материалов, а также перспективы развития органической электроники.

Литература

1. Лачинов А.Н., Воробьева Н.М. Успехи физических наук. 2006. Т. 176, № 12. С. 1249-1266.

© Юсупов А.Р., 2025

Секция I. Синтез и превращения кислород- и азотсодержащих органических соединений

УДК 547.814:547.024

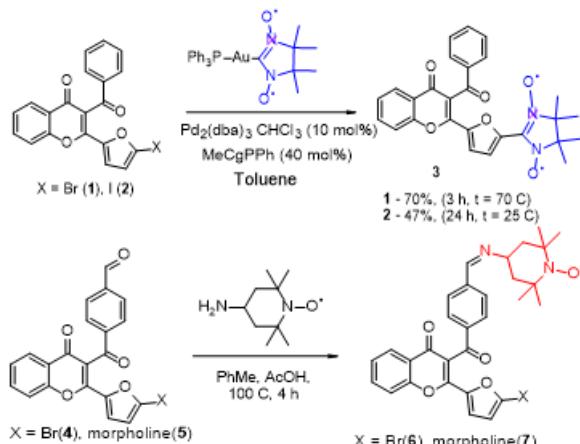
СИНТЕЗ 3-АЦИЛ-2-ГЕТАРИЛХРОМОНОВ С НИТРОКСИЛЬНЫМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ

Аглиулин К.В.^{1,2}, Степанов А.В.¹, Яровенко В.Н.¹, Краюшкин М.М.¹, Третьяков Е.В.¹

¹Институт органической химии им. Н. Д. Зелинского РАН, Москва, Россия

²НИЦ «Курчатовский институт», Москва, Россия

Известно, что 3-ацил-2-фуранилхромоны под действием УФ-облучения способны перегруппировываться во флуоресцирующие продукты. Работа посвящена созданию ранее неизвестных гибридных хромонов с нитроксильными заместителями в фурановом (**3**) и ацильном (**6** и **7**) фрагментах, реагирующих как на ультрафиолетовое облучение, так и магнитное воздействие. Изучено взаимодействие хромонов **1**, **2**, **4** и **5** с золотоорганическим производным 4,4,5,5-тетраметил-2-имидаэолин-3-оксид-1-оксилом и 4-Amino-TEMPO, а также исследовано поведение продуктов реакций под действием УФ-света и магнитного воздействия.



Литература

1. Аглиулин К.В., Степанов А.В., Заякин И.А., Яровенко В.Н., Краюшкин М.М., Третьяков Е.В., Насырова Д.И., Айт А.О., Валова Т.М. Синтез, структура и исследование фото трансформации 3-ацил-2-

гетарилхромонов с нитроксильными заместителями. // Известия Академии наук. сер. Химическая. 2024. Т. 73. № 11. С. 3342-3351.

© Агиулин К.В., Степанов А.В.,
Яровенко В.Н., Краюшкин М.М., Третьяков Е.В., 2025

УДК 547-316

СИНТЕЗ N1-(4-ХЛОРБЕНЗИЛ)-N1-(ФУРАН-2-ИЛМЕТИЛ)-N3,N3-ДИМЕТИЛПРОПАН-1,3-ДИАМИНА И ПРЕДСКАЗАНИЕ ЕГО АНТИБАКТЕРИАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ

Акимова Е.С., Султанова Р.М.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа,
Россия*

Конденсацией п-хлорбензальдегида **1** с *N^l,N^l*-диметилпропан-1,3-диамином **2** в бензоле, в присутствии катализатора при температуре 80°C был получен имин **3** с выходом 48%. Дальнейшее восстановление **3** проводилось NaBH₄-CH₃COOH при пониженной температуре в бензоле. Соединение **5** было получено конденсацией вторичного амина **4** с фурфуролом.

Виртуальный скрининг антибактериальной активности полученных соединений **3-5** был выполнен с использованием веб-сервиса AntiBag Pred [1]. Положительное значение разницы двух вероятностей Pa и Pi указывает на то, что соединения можно рассматривать как потенциально ингибирующие рост грамположительных и грамотрицательных бактерий.

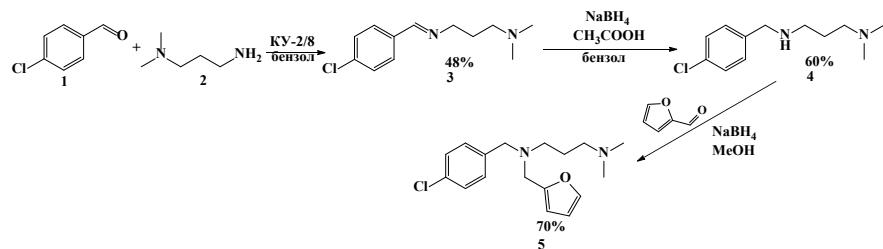


Рис. 1. Схема синтеза

Работа выполнена при финансовой поддержке программы развития УГНТУ «Приоритет-2030» (Лидерский проект 2025 года №Б17619)

Литература

1. Pogodin P.V., Lagunin A.A., Rudik A.V., Druzhilovskiy D.S., Filimonov D.A., Poroikov V.V. AntiBac-Pred:na web application for predicting antibacterial activity of chemical compounds // Journal of Chemical Information and Modeling. 2019. Vol. 59, no. 11. P. 4513-4518.

© Акимова Е.С., Султанова Р.М., 2025

УДК 546.185 + 547.787.1

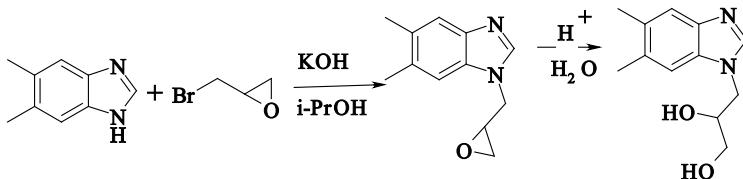
СИНТЕЗ 3-(5,6-ДИМЕТИЛ-1Н-БЕНЗИМИДАЗОЛ-1-ИЛ)-
ПРОПАН-1,2-ДИОЛА.

Акимова К.А., Цикалов В.В., Баевский М.Ю.

Крымский Федеральный университет им. В.Вернадского
Институт биотехнологии, экологии и фармации, Симферополь, Россия

N-пропандиольная функциональная группа часто используется в синтезе рентгеноконтрастных препаратов таких как «Иогексол», повышая гидрофильность препарата и соответственно облегчая доступ препарата к опухоли. Как правило, данная группировка вводится в молекулу в результате алкилирования амидного азота 3-хлорпропан-1,2-диолом в щелочной среде. В связи с тем, что в настоящее время в АО ВНИИ Иодобром в качестве неликвида хранится около 30 тонн 2,3-дигидропропан-1-ола, который легко может быть превращен в эпивормгидрин, кислотный гидролиз которого приводит к образования 3-бром-пропан-1,2-диола. Который в свою очередь может быть успешно использован в качестве алкилирующего агента, аналогичному соответствующему хлорпроизводному. Предварительное изучение процесса кислотного гидролиза эпивормгидрина показал, что гидролиз протекает не селективно. В ходе процесса, по данным хроматомасс спектроскопии образовывалась смесь продуктов.

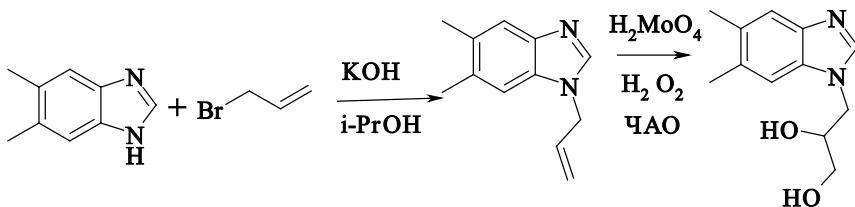
В связи с этим нами на примере 5,6-диметил-1Н-бензимидазола был изучен процесс N-алкилирования эпивормгидрином с последующим кислотным гидролизом Алкилирование проводилось в среде пропан-2-ола в присутствии гидроксида калия.



Кроме того, был изучен процесс синтеза соответствующего бензимидазольного производного включающий две стадии –

1. N-алкилирование 5,6-диметил-1Н-бензимидазола аллилбромидом

2. Окисление 1-аллил-5,6-диметил-1Н-бензимидазола раствором 33% пероксида водорода в условиях межфазового катализа с использованием в качестве катализатора молибденовой кислоты и трибутил аммоний бромида (ЧАО)



Проведено сравнение выходов целевого продукта в вышеописанных реакциях с процессом алкилирования 5,6-диметил-1*H*-бензимидазола 3-хлор-1,2-пропандиолом.

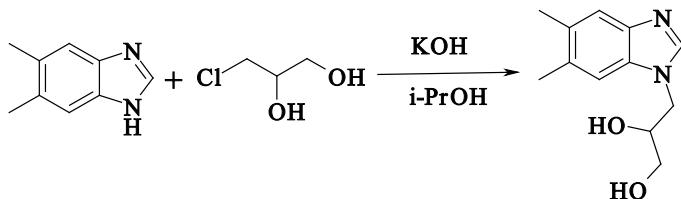


Таблица 1

Синтез 1-пропил-2,3-диол-5,6-диметил-1*H*-бензимидазола

| № | Алкилирующий агент | Выход на первой стадии % | Выход на второй стадии % | Суммарный выход % |
|---|-----------------------|--------------------------|--------------------------|-------------------|
| 1 | 3-Хлорпропан-1,2-диол | 64 | - | 64 |
| 2 | Эпивормгидрин | 95 | 90 | 85,5 |
| 3 | Аллил бромид | 95 | 80 | 76 |

В результате проведенных предварительных исследований установлено, что эпивормгидрин может быть использован в качестве алкилирующего агента в синтезе соответствующих N-2,3-гидропропильных производных

© Акимова К.А., Цикалов В.В., Баевский М.Ю., 2025

УДК 547.853+544.165

СИНТЕЗ И МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРРОЛИДИНА – ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ИНГИБИТОРОВ ЯНУС-КИНАЗЫ JAK1

Алмазова А.В., Кострюков С.Г.

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

Янус-киназы или JAK представляют собой семейство внутриклеточных тирозинкиназ, которые функционируют как медиаторы

в процессе передачи сигналов многих цитокиновых рецепторов. Благодаря своей главной роли во врожденном и в адаптивном иммунитете, а также в кроветворении, янус-киназы являются привлекательными мишениями для ряда терапевтических показаний [1]. Большинство одобренных ингибиторов янус-киназ являются АТФ-конкурентными ингибиторами, например, тофатиниб, барицитиниб, руксолитиниб, делгоцитиниб и другие. Обязательным элементом этих ингибиторов является фрагмент 7Н-пирроло[2,3-d]пиrimидина.

При поиске новых ингибиторов янус-киназы JAK1 были выбран соединения **1a-c**, полученные следующим образом: реакцией 1,3-диполярного присоединения арил/гетероарилальдиминов метилового эфира глицина к акрилонитрилу были синтезированы метиловые эфиры 4-циано-5-арил/гетероарилпирролидин-2-карбоновых кислот **2a-c**, которые после гидролиза до карбоновых кислот по реакции с дициклогексилкарбодимином и аденином были превращены в соединения **1a-c**.

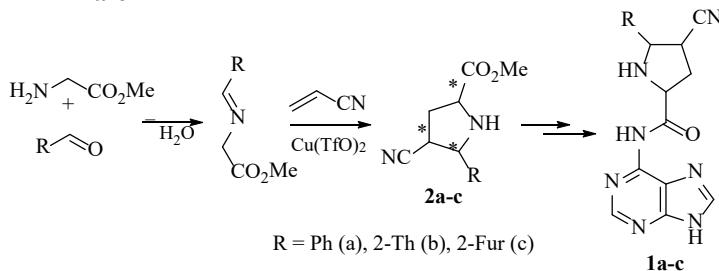


Рис. 1. Схема синтеза потенциальных ингибиторов янус-киназы JAK1

Потенциал ингибиторной активности соединений оценивали с помощью молекулярного докинга (Schrödinger, Maestro). Для расчётов была использована трехмерная структура комплекса янус-киназы JAK1 (3EYG) с тофацитинибом. На рисунке 2 представлены величины свободной энергии связывания (Docking score) тофацитиниба и соединений **1a-c** с янус-киназой JAK1.

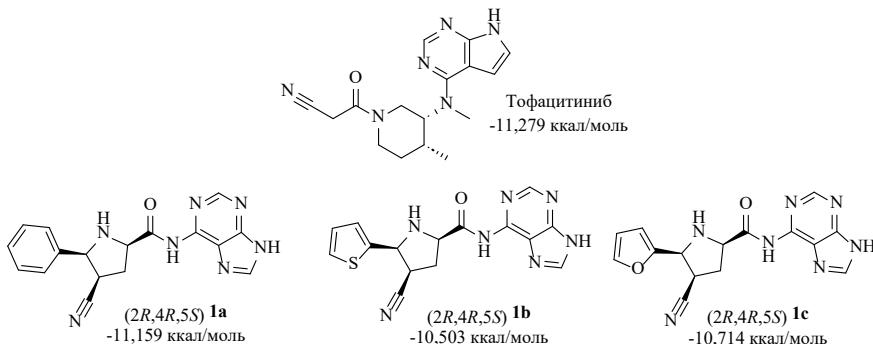


Рис. 2. Значения свободной энергией связывания (Docking score) тофацитиниба и соединений-лидеров **1a–c** с янус-киназой JAK1

Следует отметить, что продукты реакции 1,3-диполярного присоединения альдиминов метилового эфира глицина к акрилонитрилу образуются в виде смеси стереоизомеров, строение которых было установлено с помощью корреляционной ЯМР-спектроскопии. Обнаружено, что нужные (2R,4R,5S)-изомеры являются основными в реакционных смесях.

С помощью ресурса SwissADME [2] была проведена оценка физико-химические дескрипторов, прогноз параметров ADME, фармакокинетических свойств и «Drug-likeness» для соединений **1a–c**. Изучение результатов показывают, что соединения **1a–c** подчиняются правилу Липински (имеют суммарно не более 10 атомов-акцепторов водородной связи, менее 5 атомов-доноров водородной связи, липофильность менее 5 и обладают молекулярной массой менее 500 Да). Более того, соединения **1b–c** демонстрируют хорошую всасываемость через ЖКТ (прогноз методом «BOILED-Egg» [3]).

Литература

- Clark J.D., Flanagan M.E., Telliez J.B. Discovery and development of Janus kinase (JAK) inhibitors for inflammatory diseases // Journal of medicinal chemistry. 2014. V. 57, Iss. 12. P. 5023-5038.
- 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.
- Daina A., Zoete V. A BOILED-Egg To Predict Gastrointestinal Absorption and Brain Penetration of Small Molecules // ChemMedChem. 2016. V. 11, Iss. 11. P. 1117-1121.

УДК 678.043.52

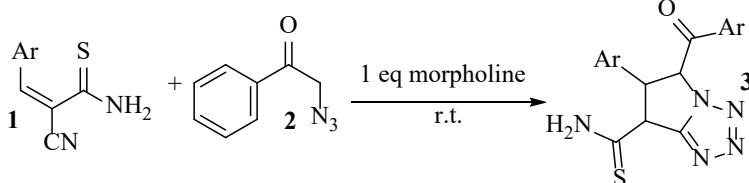
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ α -АЗИДОКЕТОНОВ И ЦИАНТИОАЦЕТАМИДА

Ачмиз Р.Г., Левашов А.С., Доценко В.В.

ФГБОУ ВО Кубанский государственный университет, Краснодар,
Россия

Согласно литературным данным азидокетоны могут быть в синтезе биологически активных соединений [1, 2]. В рамках нашего исследования было исследовано влияние серо- и кислородсодержащими акцепторами Михаэля на α -азидокетоны, в качестве акцепторов выступили циантиоацетамид и малононитрил. Были проведены реакции между азидометилфенилкетоном и замещенными цианотиоамидаами в присутствии одного эквивалента основного катализатора (схема 1).

Схема 1



Ar = 4-OMeC₆H₄ (3a), 4-ClC₆H₄ (3b), 2,4-Cl₂C₆H₂ (3c)

Реакцию проводили при комнатной температуре в этаноле, контроль за ходом реакции осуществляли методом ТСХ.

Для оценки рисков токсичности и физико-химических параметров, был использован сервис OSIRIS Property Explorer, согласно которому соединения данного ряда обладают выраженным мутагенным, канцерогенным, раздражающим свойствами, а также влияют на репродуктивную функцию. Однако по оценке физико-химических параметров (clogP, logS, MW, TPSA) можно отметить, что итоговые соединения имеют высокий показатель Drug likeness (2,5-3,6) и Drug score (30-55%), что делает дальнейшее исследование свойств актуальным.

Литература

1. Design, synthesis and antibacterial studies of potent pyrazolinyltriazoles/Sivasubramaniyan A., Ranganathan, R., Murugan, D. [et. al] // Research on Chemical Intermediates. 2016. Vol. 45. № 4. P. 1-20.
2. Selected Methodologies Convenient for the Synthesis of N,5-Diaryloxazole-2-amine Pharmacophore/

УДК 678.043.52

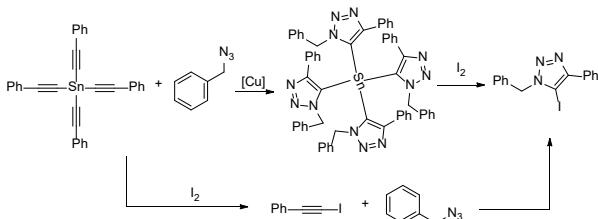
СИНТЕЗ ЗАМЕЩЕННЫХ 1,2,3 ТРИАЗОЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕТРАФЕНИЛЭТИНИЛОВА

Ачмиз Р.Г., Левашов А.С., Доценко В.В.

ФГБОУ ВО Кубанский государственный университет, Краснодар,
Россия

Как известно, производные 1,2,3-триазола обладают широким спектром биологической активности [1, 2]. Увеличение тех или иных свойств часто сопровождается введением различных заместителей, однако функционализация положения «5» представляет значительные трудности. Для решения этой проблемы нами был осуществлен синтез оловосодержащих триазолов, которые могли бы послужить субстратами для реакций кросс-сочетания по Стилле. В ходе работы было установлено, что целевые стяннаны неустойчивы и легко гидролизуются. Для подтверждения их образования была разработана методика с *in situ* введением йода. Обработка реакционной смеси йодом привела к образованию смеси 1-бензил-4-фенил-1Н-1,2,3-триазола и 1-бензил-5-йод-4-фенил-1Н-1,2,3-триазола в соотношении ~50:50, согласно данным ЯМР-спектроскопии. Это доказывает, что исходно образуется тетракис-(1-бензил-4-фенил-1Н-1,2,3-триазол-5-ил)стяннан, который в данных условиях даёт наблюдаемую смесь продуктов. Предложены два возможных механизма данной реакции (схема 1).

Схема 1



В нашем случае данная реакция происходит по пути 1, поскольку после внесения йода йодфенилацетилен не был обнаружен методом ГХМС.

Литература

1. Application of Huisgen ([3+2]) cycloaddition reaction: Synthesis of 1-(2,3-dihydrobenzofuran-2-yl-methyl [1,2,3]-triazoles and their antitubercular evaluations / Tripathi, R. P., Yadav, A. K., Ajay, A. [et. al] // European Journal of Medicinal. 2010. Vol. 45. № 1. P. 142-148.

2. 1,2,3-Triazoles as Amide Bond Mimics: Triazole Scan Yields Protease-Resistant Peptidomimetics for Tumor Targeting / I.E. Valverde, A. Bauman, C. Kluba [et. al] // Angewandte Chemie International Edition. 2013. Vol. 34. № 52. P. 8957-8960.

© Ачмиз Р.Г., Доценко В.В., Левашов А.С., 2025

УДК 546.26

СИНТЕЗ АДДУКТА НА ОСНОВЕ ФУЛЛЕРена И НОРАДРЕНАЛИНА
ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАЗВУКА

Байкова Р.А., Кинзябаева З.С., Сабиров Д.Ш.

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Контролируемое присоединение на каркас фуллерена C_{60} гетероатомов (O, S, N) активно исследуется для получения производных с интересными физическими, химическими и биологическими свойствами [1].

Исследована селективная функционализация фуллерена C_{60} по связям $C_{\text{фуллерен}}\text{-гетероатом}$ (O, N) на примере реакции с норадреналином. Показано, что под действием ультразвука фуллерен C_{60} реагирует с норадреналином **1** при комнатной температуре на воздухе в системе толуол/ДМФА с образованием морфолинового моноаддукта **2**, аннелированного по [6-6]-связи (Схема 1). Реакция проходит при мольном соотношении $C_{60}\text{:}1 = 1:4$ с максимальным выходом продукта **2** 43%. Продемонстрирована ключевая роль ультразвука и ДМФА для протекания процесса. Установлено, что механизм включает активацию N-H и O-H групп в **1** ультразвуком с одноэлектронным переносом и генерацией анион-радикала $C_{60}\cdot^-$ (идентифицирован по спектру ЭПР). Строение аддукта **1** подтверждено комплексом физико-химических методов (одно- и двумерной ЯМР ^1H , ^{13}C , УФ, масс-спектрометрия). Предложенный метод открывает путь к новым производным фуллерена с биологически активными молекулами.

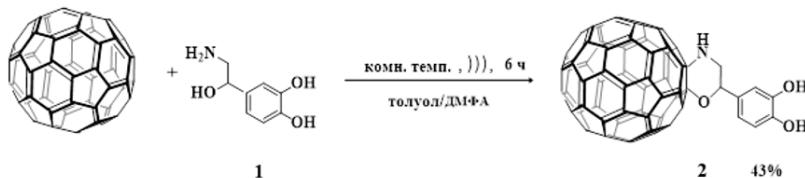


Рис. 1. Схема 1

Литература

1. Zieleniewska A., Lodermeier F., Roth A., Guldi D. M. Fullerenes – how 25 years of charge transfer chemistry have shaped our understanding of (interfacial) interactions // Chem. Soc. Rev. 2018, 47, 702–714.

© Байкова Р.А., Кинзябаева З.С., Сабиров Д.Ш., 2025

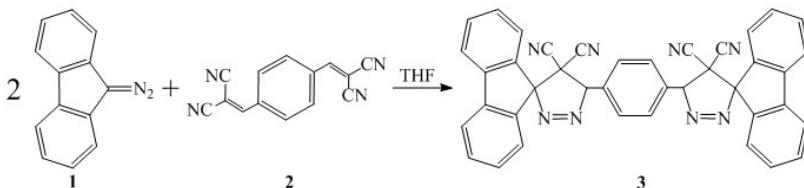
УДК 547.771

СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРАЗОЛИНА НА ОСНОВЕ 1,4-ДИВИНИЛБЕНЗОЛА, АКТИВИРОВАННОГО НИТРИЛЬНЫМИ ГРУППАМИ.

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

ФГБОУ ВО «МГУ им. Н.П. Огарёва», Саранск, Россия

В литературе есть примеры взаимодействия 9-диазофлуорена с алкенами, активированными акцепторами [1], однако реакций с 1,4-дивинилбензолами, активированными акцепторными группами, описано не было.



Взаимодействие 9-диазофлуорена с алкеном **2** протекает с образованием соединения с двумя Δ^1 -пиразолиновыми циклами.

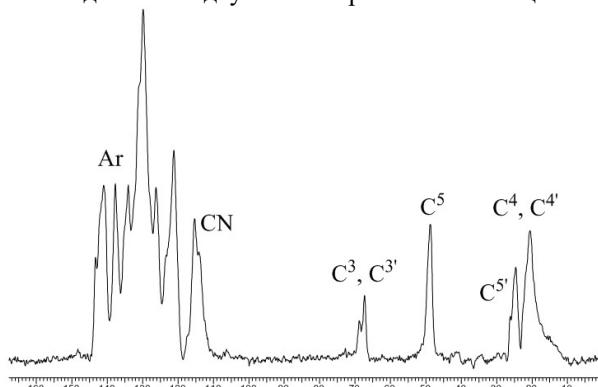


Рис. 1. CP-MAS ^{13}C ЯМР спектр соединения **3**

Структура соединения **3** подтверждалась на основании CP-MAS ^{13}C ЯМР спектроскопии (рис.1) при сопоставлении с литературными данными [2] и модельными спектрами.

Литература

1. Franck-Neumann M., Miesch M. Synthèse de diméthyl-5,5-pyrazolénines, précurseurs de vinylcarbènes isoprénoides, par oxydation directe de Δ^2 -pyrazolines // Tetrahedron, 1983. V. 39. P. 1247-1254.
2. Nakano Y.A. Synthetic route to bicyclic pyrazolenines via 3-chloropyrazolenines and the ring opening of pyrazolenines to diazoalkenes // J. Org. Chem. 1989. V. 54. P. 5912-5919.

© Безрукова Е.В., Черноярова А.О., Калязин В.А., Кострюков С.Г., 2025

УДК 547.841

СИНТЕЗ α,β -НЕПРЕДЕЛЬНЫХ КЕТОНОВ СОДЕРЖАЩИХ 1,3-ДИОКСАННЫЙ ФРАГМЕНТ
И ИХ СЕЛЕКТИВНОЕ ВОССТАНОВЛЕНИЕ

Березняк Я.С., Султанова Р.М.

Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Уфа, Россия

Синтез на основе доступного нефтехимического сырья – перспективная стратегия получения новых биологически активных, в том числе бактерицидных, соединений [1]. Ключевыми этапами синтеза являются конденсация 5-ацил-5-метил-1,3-диоксана с альдегидами и последующее хемоселективное восстановление образующихся α,β -ненасыщенных кетонов, позволяющее направленно получать непредельные спирты или предельные кетоны.

Результаты предварительного скрининга подтверждают перспективность создания новых противомикробных средств на основе структурно новых 1,3-диоксанов [2].

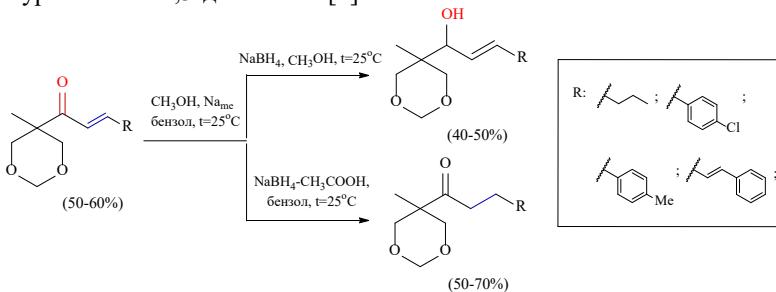


Рис. 1. Синтез α,β -непредельных кетонов и их хемоселективное восстановление

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России в сфере научной деятельности, номер для публикаций FEUR – 2025-0001 «Нефтехимические реагенты, добавки и материалы».

Литература

1. Борисова Ю.Г. и др. Гидрирование замещенных 5-ацил-1, 3-диоксанов в присутствии катализатора Pd/C //Журнал общей химии. 2021. Т. 91. № 9. С. 1328-1332.
2. <http://www.pharmaexpert.ru/passonline/>

© Березняк Я.С., Султанова Р.М., 2025

УДК 547.859

ПОДБОР УСЛОВИЙ КОНДЕНСАЦИИ 6-СТИРИЛ-4-АРИЛДИГИДРОПИРИМИДИН-2-ОНОВ С ПИРОГАЛЛОЛОМ

Богданова Н.А., Макарушки Е.Н., Чиркова Ж.В.

Ярославский государственный технический университет,
Ярославль, Россия

Спирогетероциклы, содержащие в своем составе пиримидиновый и кумариновый фрагменты, являются важными гетероциклическими соединениями за счет широкого спектра биологической активности [1].

Ранее [2] нами сообщалось, что конденсация замещенных 6-стирил-4-арилдигидропиридин-2-онов с резорцином протекает при кислотном катализе *p*-TsOH в системе хлороформ : вода (1:1) с получением двух диастереомеров. В случае использования в качестве реагента пирогаллола **2** получить продукты его реакции со 6-стирил-4-арилдигидропиридин-2-онами **1** при таком катализе не удалось. Эта проблема была решена заменой кислоты *p*-TsOH на CH₃SO₃H, а в качестве растворителя также использовался хлороформ в присутствии промотора – уксусной кислоты. Проведенные исследования показали, что целевые спирохроманы **3** и **4** образовывались в виде смеси диастереомеров в соотношении приблизительно 1:1 [3].

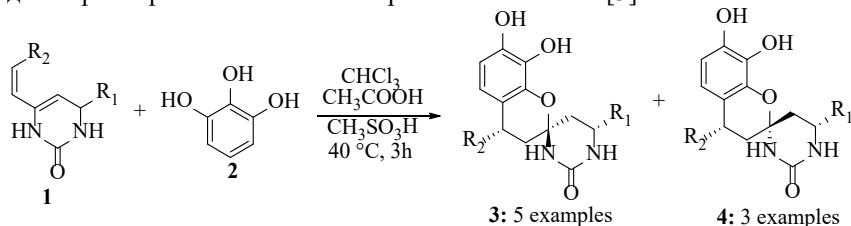


Рис. 1. Схема синтеза замещенных спирохроман-2,4'-пирамидинов

Результаты экспериментов по подбору условий проведения реакции сведены в таблицу 1.

Таблица 1

Подбор условий конденсации

| № | Катализатор (mmol) | Промотор (mmol) | Выход, % | Соотношение 3/4, % |
|---|--|-----------------|----------|--------------------|
| 1 | CH ₃ SO ₃ H (2.4) | AcOH (27.2) | 75 | 50:50 |
| 2 | CH ₃ SO ₃ H (2.4) | - | 42 | 94:6 |
| 3 | CH ₃ SO ₃ H (1.2), TsOH·H ₂ O (1.2) | - | 32 | 0:100 |

Литература

1. Hiesinger K., Dar'in D., Proschak E., Krasavin M. J. Med. Chem. 2020, 64(1), 150-183.
2. Karandeeva A.S., Uryadova A.M., Makarova E.S., Kabanova M.V., Filimonov S.I., Chirkova Z.V., Suponitsky K.Y. Mendeleev Commun. 2023, 33(6), 779-781.
3. Karandeeva A.S., Bogdanova N.A., Kabanova M.V., Filimonov S.I., Chirkova Z.V., Romanycheva A.A., Panova V.A., Shetnev A.A., Toguzbayeva N.A., Kanzhar S.A., Appazov N.O., Suponitsky K.Y. Molecules, 2025, 30(14), 2954.

© Богданова Н.А., Макарушко Е.Н., Чиркова Ж.В., 2025

УДК 547.793:547.791.1

4-(ПРОПАРГИЛТИО)СИДНОНИМИНЫ: СИНТЕЗ И РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ В РЕАКЦИЯХ АЗИД-АЛКИНОВОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ

Брыксин Д.Н.¹, Черепанов И.А.²

¹*РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия.*

²*ИНЭОС им. А.Н. Несмиянова РАН, Москва, Россия.*

Сидронимины представляют собой мезоионные гетероциклические соединения, обладающие способностью генерировать оксид азота NO *in vivo*, что делает их перспективными фармакофорными фрагментами для создания лекарственных веществ [1,2]. В настоящей работе разработан удобный

препаративный метод синтеза ранее неизвестных 4-(пропаргилтио)сидрониминов **3** с терминальной алкиновой группой в положении C4 оксадиазольного кольца (Схема 1).

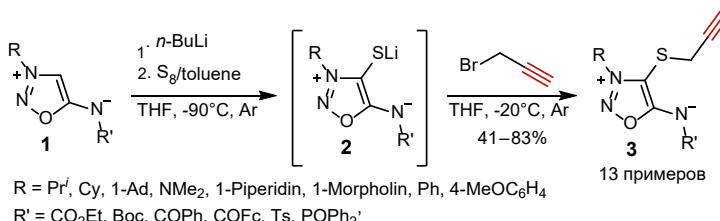


Схема 1. Синтез 4-(пропаргилтио)сидрониминов **3**.

Показано, что алкилирование тиолятов лития **2**, генерируемых в ходе реакции по схеме 1, пропаргилбромидом позволяет получать целевые соединения **3** с выходами 41–83% в зависимости от природы заместителей.

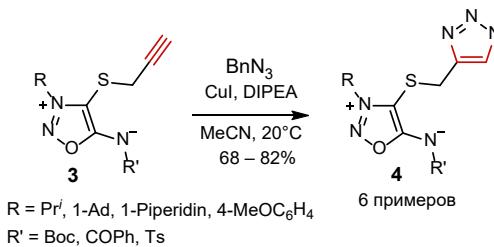


Схема 2. Синтез 4-(1,2,3-триазол-4-ил)метилтиодониминов 4.

Полученные соединения 3 продемонстрировали высокую реакционную способность в реакциях меди(I)-катализируемого азидо-алкинового циклоприсоединения с бензилазидом (Схема 2). Кроме того, впервые был синтезирован конъюгат 3-морфолинтиодонимина 6, известного как антиангинальное средство Молсидомин, и остатка липоевой кислоты, обладающего антиоксидантной активностью [3,4] (Схема 3).

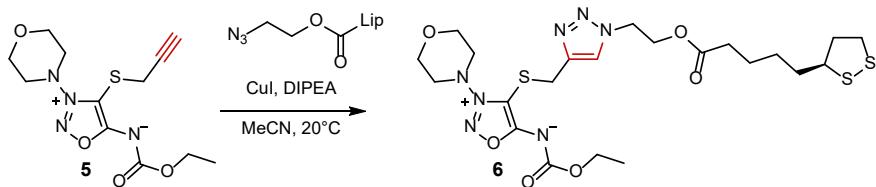


Схема 3. Синтез конъюгата 3-морфолинтиодонимина 6.

Разработанный нами подход позволяет целенаправленно вводить фармакофорный тиодониминовый фрагмент в различные системы доставки

лекарств и может быть использован для создания новых биологически активных субстанций, сочетающих NO-донорную активность тиодониминов с другими молекулярными компонентами, способными влиять на их метаболизм и фармакологическое действие.

Работа выполнена в рамках Государственного задания №58.3 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации с использованием научного оборудования Центра исследования строения молекул ИНЭОС РАН.

Литература

1. Fershtat L.L., Zhilin E.S. Recent advances in the synthesis and biomedical applications of heterocyclic NO-donors. *Molecules*, 2021. Т. 26. № 18. С. 5705.

2. Idocin A.F., Specklin S., Taran F. Sydnonimines: synthesis, properties and applications in chemical biology. Chemical Communications, 2025. Т. 61. № 31. С. 5704-5718.
3. Zonooz S. R. et al. Effect of alpha-lipoic acid on oxidative stress parameters: A systematic review and meta-analysis. Journal of Functional Foods, 2021. Т. 87. С. 104774.
4. Wang Y. et al. Advances in α -Lipoic Acid for Disease Prevention: Mechanisms and Therapeutic Insights. Molecules, 2025. Т. 30. № 9. С. 1972.

© Брыксин Д.Н., Черепанов И.А., 2025

УДК 547.1-304.2

ДИАСТЕРЕОСЕЛЕКТИВНОЕ ВОССТАНОВИТЕЛЬНОЕ
АМИНИРОВАНИЕ 2-ЦИКЛОГЕКСЕНИЛЦИКЛОГЕКСАНОНА

Важенин Б.В., Голованов А.А., Соков С.А.

Тольяттинский государственный университет, Тольятти, Россия

Несмотря на то, что методы трансформации циклических кетонов в амины известны давно, диастереоселективный переход от пространственно-затрудненных α -замещенных циклоалканонов к аминам до сих пор представляет проблему на пути к биологически активным соединениям [1]. В качестве модельного соединения для исследования реакции восстановительного аминирования подобных субстратов нами был выбран промышленно доступный 2-циклогексенилциклогексанон **1** [2].

Установлено влияние растворителя и эффективного размера гидридного восстановителя на диастереоселективность реакции. Подобраны условия целенаправленного синтеза соединений *цис*- и *транс*-конфигурации в реакции одностадийного восстановительного аминирования кетона **1** первичными аминами **2a–l**. В результате получены структурно разнообразные индивидуальные вторичные амины с выходами 59–89%.

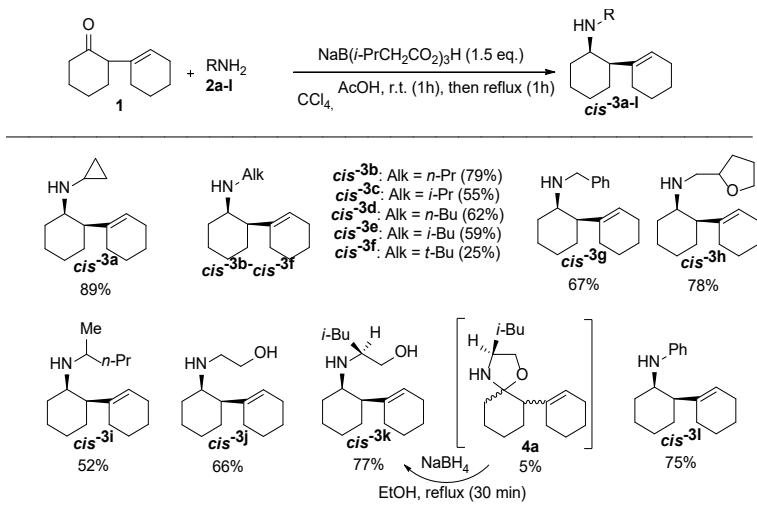


Рис. 1. *цис*-Диастереоселективный метод восстановительного аминирования кетона 1

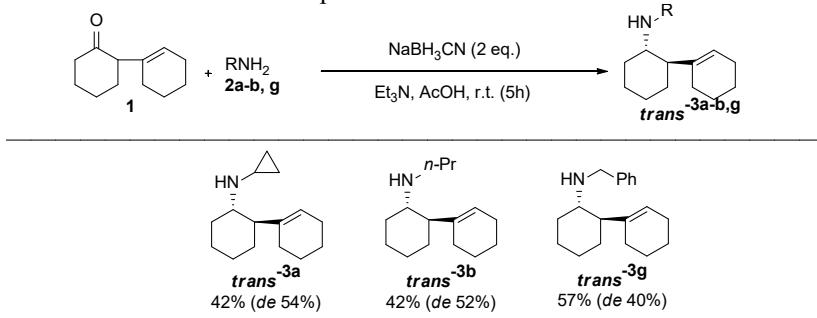


Рис. 2. *транс*-Диастереоселективный метод восстановительного аминирования кетона 1

В связи с низкой химической активности реагентов, сочетание кетона 1 со вторичными аминами невозможно. Однако нами предложен двухстадийный метод получения третичных аминов путем восстановления соответствующих промежуточных енаминов с помощью NaBH_4 . Таким образом, целевые третичные амины *цис*-конфигурации получены с выходами 63–89%.

Производные кетона 1, содержащие первичную аминогруппу, были получены методом катализитического (Pd/C) гидрогенолиза вторичных аминов 3g. В результате получены первичные амины *цис*- и *транс*-конфигурации с выходом 83% и 86% соответственно.

Структура всех полученных соединений подтверждена данными элементного анализа, масс-, ЯМР ^1H , ^{13}C спектроскопии, а также РСА.

Литература

- Wakchaure V.N. Catalytic Asymmetric Reductive Amination of α-Branched Ketones / Wakchaure V.N., Zhou J., Hoffmann S., List B. // Angewandte Chemie International Edition. 2010. Vol. 2010. № 49. P. 4612.
- Ostapenko G.I. Investigation of Waste of the Caprolactam Productions Steel Corrosion Inhibitor in Hydrochloric Acid / Ostapenko G.I., Gloukhov P.A., Sadivskiy S.Ya. // ECS Trans. 2009. Vol. 19. P. 47-54.

© Важенин Б.В., Голованов А.А., Соков С.А. 2025

УДК 547.91:547.233.3:541.124

СЕЛЕКТИВНЫЙ СИНТЕЗ И ОПТИМИЗАЦИЯ УСЛОВИЙ ПОЛУЧЕНИЯ 3β-ГИДРОКСИ-17-[3-(ПИРИДИН-2-ИЛ)-ПРОП-2-ЕН-1-ОН]-ХОЛЛОНГДИОНА

Галимова З.И.¹, Фатхутдинова Р.В.², Валиуллин И.Ф.², Миннибаева Э.М.², Смирнова И.Е.¹

¹Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Холлонгдион (22,23,24,25,26,27-гексанордаммар-3,20-дион) - это даммарановый тритерпеноид, обладающий выраженной активностью против вируса гриппа А. На примере его взаимодействия с 2-пиридинкарбоксальдегидом по положения C2 и C21 колец А и D было изучено влияние растворителей и температуры на выход целевого продукта – 3-оксо-17-[3-(пиридин-2-ил)-проп-2-ен-1-он]-холлонгдиона **2** (Схема 1). Результаты сведены в таблицу 1, включающую данные четырёх экспериментов, проведённых с использованием метанола и этанола при двух температурных режимах: комнатной температуре и 0 °C [1].

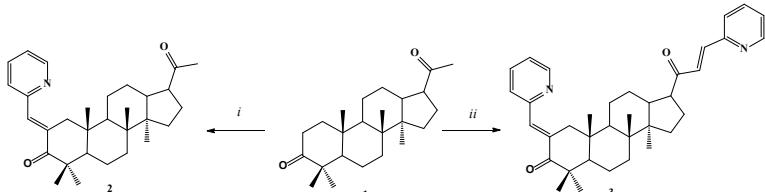


Схема 1. Реагенты и условия: *i* 2-пиридинкарбоксальдегид (1 ммоль), EtOH, 40% KOH/EtOH, 0 °C, 30 мин; *ii* 2-пиридинкарбоксальдегид (2 ммоль), EtOH, 40% KOH/EtOH, 22 °C, 2 ч.

Таблица 1

Влияние растворителей и температуры на выходы соединений **2, 3**

| № | Растворитель | Температура (°C) | Выход 2 (%) | Выход 3 (%) |
|---|--------------|------------------|-------------|-------------|
| 1 | MeOH | r.t. | 65 | 27 |
| 2 | MeOH | 0 | 70 | 20 |

Окончание табл. I

| | | | | |
|---|------|------|----|----|
| 3 | EtOH | r.t. | 75 | 18 |
| 4 | EtOH | 0 | 96 | - |

Исследование выполнено в рамках Государственного задания № 125020601629-0.

Литература

1. Smith M.B., March J. Advanced Organic Chemistry: Reactions, Mechanisms, and Structure. 6th ed. New York: Wiley, 2007.

© Галимова З.И., Фатхутдинова Р.В.,
Валиуллин И.Ф., Миннибаева Э.М., Смирнова И.Е., 2025

УДК 577.175.149

НОВЫЕ РЕГУЛЯТОРЫ РОСТА РАСТЕНИЙ – ПРОИЗВОДНЫЕ
ЭТИЛЕНДИМОЧЕВИНЫ (EDU)

Гармай Г.А.¹, Ощепков М.С.¹, Быстрова Н.А.², Кочетков К.А.^{1,2}

¹Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
Москва, Россия

²Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН,
Москва, Россия

Для увеличения урожайности сельскохозяйственных культур и снижения экологических нагрузок на окружающую среду такие компании как BASF SE, Syngenta AG, Bayer CropScience AG приняли программу по расширению производства фитогормонов на основе мочевины, на реализацию которой до 2032 года будет отведено 6 миллиардов долларов США. Среди фитогормонов первое место по продажам на рынке занимают вещества, проявляющие цитокининовую активность. К таким соединениям относятся производные мочевины и карбаматов [1] и по этой причине синтез и исследование свойств этих соединений является актуальной задачей.

В РХТУ им Д.И.Менделеева совместно с ИНЭОС РАН был разработан новый способ получения производных *N*-[2-(2-оксо-1-имиазолидинил)этил]-*N'*-фенилмочевины (EDU) **II-VI**, представленный на Рисунке 1.

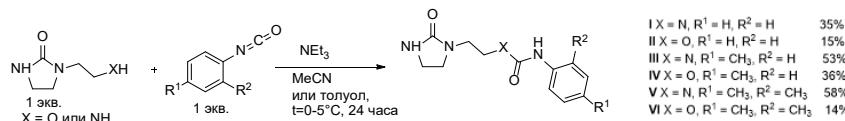


Рис. 1. Принципиальная схема синтеза производных EDU

Было синтезировано и испытано 16 производных EDU, из которых наибольшую активность проявили соединения **II-VI**; *N*-[2-(2-оксо-1-имиазолидинил)этил]-*N'*-фенилмочевина (EDU) (**I**, 35%) была

синтезирована по методике [2] и её параметры соответствуют EDU CAS® №54924-46-8.

Биологические испытания проводились с использованием мезобиотических [3] семян пшеницы (*Triticum aestivum L.*) сорта «Дарья®» №9705798 [4] урожая 2020 года. Эксперименты проводили одновременно в четырёх камерах для роста растений с четырёхкратным повтором.

На первом этапе работы семена пшеницы грунтовали исследуемыми соединениями согласно известной методике [5]. На втором этапе семена высевали в чашки Петри по методике, описанной в [6]. Всхожесть семян рассчитывали согласно рекомендациям Международной ассоциации по испытанию семян [7]. Результаты эксперимента представлены в Таблице 1.

Таблица 1
Биологическая активность соединений I-VI

| | Потенциал прорастания, % | Всхожесть, % | Длина корней, см | Высота стебля, см | Зелёная масса побегов, % к контролю |
|----------|--------------------------|--------------|------------------|-------------------|-------------------------------------|
| Контроль | 47 ± 4.19 | 78 ± 2.63 | 7.7 ± 1.93 | 14.3 ± 3.18 | 100 |
| I | 52* ± 2.64 | 88** ± 2.36 | 8.8** ± 1.31 | 14.3* ± 1.20 | 106.7** ± 2.8 |
| II | 55** ± 2.46 | 88* ± 2.58 | 8.9* ± 1.55 | 17.3** ± 1.83 | 122.3* ± 2.3 |
| III | 52** ± 3.78 | 90* ± 2.51 | 8.3* ± 1.29 | 15.4* ± 1.76 | 121** ± 2.9 |
| IV | 52** ± 2.0 | 92** ± 2.36 | 11.1* ± 1.55 | 15.5* ± 1.67 | 114** ± 3.6 |
| V | 49** ± 2.08 | 91** ± 2.82 | 8.2* ± 1.82 | 14.4* ± 1.65 | 110* ± 1.6 |
| VI | 55 ± 1.70 | 90* ± 2.16 | 11.3* ± 1.82 | 15.8* ± 1.2 | 109** ± 2.7 |

“Контроль” – в качестве контроля были взяты семена, помещённые в чашку Петри и обработанные только дистиллированной водой. Данные представлены в виде среднего значения ± стандартное отклонение. Статистическую значимость определяли с помощью t-критерия Стьюдента при $p < 0,05$ (*) и $p < 0,01$ (**).

Все соединения I-VI обладают рост регулирующей активностью. Всхожесть семян была на 10-14 % выше, чем всхожесть необработанных. Зелёная масса побегов была на 6-22% выше, чем у контроля. В дальнейшем будут проведены полевые испытания.

Литература

- Kalistratova A.V., Kovalenko L.V., Oshchepkov M.S., Gamisoniya A.M., Gerasimova T.S., Demidov Y.A., Akimov M.G. Synthesis of new compounds in the series of aryl-substituted ureas with cytotoxic and antioxidant activity // Mendeleev Communications. 2020. V. 30. №. 2. P. 153-155.

2. Bewley J.D., Black M. Physiology and Biochemistry of Seeds in Relation to Germination. Springer, 1982. 375 p.
 3. Kalistratova A.V., Oshchepkov M.S., Ivanova M.S., Kovalenko L.V., Tsvetikova M.A., Bystrova N.A., Kochetkov K.A. Wheat (*Triticum aestivum* L.) Reaction to New Bifunctional Carbamate Compounds // Journal of Agricultural Science. 2021. V. 13. №. 9. P. 36-47.
 4. Государственный реестр селекционных достижений, допущенных к использованию. Т.1. «Сорта растений». М.: ФГБНУ «Росинформагротех», 2024, 719 с.
 5. Jafar M.Z., Farooq M., Cheema M.A., Afzal I., Basra M.A., Wahid M.A., Aziz T., Shahid M. Improving the Performance of Wheat by Seed Priming Under Saline Conditions // Journal of Agronomy and crop science. 2012. V. 198. №. 1. P. 38-45.
 6. Kochetkov K.A., Gorunova O.N., Bystrova N.A. Biologically Oriented Hybrids of Indole and Hydantoin Derivatives // Molecules. 2023. V. 28. №. 2. P. 602-613.
 7. ISTA. International Rules for Seed Testing. Certificates, 2024. P. 1-14.
- © Гармай Г.А., Ощепков М.С., Быстрова Н.А., Кочетков К.А., 2025

УДК 547.318:547.279.5

СИНТЕЗ КОНДЕНСИРОВАННЫХ БИЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ,
СОДЕРЖАЩИХ ФРАГМЕНТЫ γ -ЛАКТАМА И ОКСАЗОЛИДИНА
Германенко Н.О., Хабибрахманова А.М., Миргалимова А.И.,
Шайхулова А.А., Курбангалиева А.Р.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

Азотсодержащие гетероциклические соединения широко распространены в природе и находят всё большее применение в медицинской химии. Среди различных пятичленных *N*-гетероциклов особое место занимают производные 3-пирролин-2-она, содержащие ненасыщенный γ -лактамный цикл. Известно, что производные 3-пирролин-2-она проявляют антимикробную, противовирусную, противовоспалительную, противоопухоловую и другие виды активности и находят применение в медицине, сельском хозяйстве и промышленности. Данная работа посвящена разработке методов синтеза, изучению строения и свойств новых серосодержащих производных гетероциклов на основе 3-пирролин-2-она и оптически активных аминоспиртов.

На первой стадии при взаимодействии 5-метокси-3,4-дихлор-2(5*H*)-фуранона с 4-метилтиофенолом в присутствии Et_3N получен тиоэфир с серосодержащим заместителем в 4 положении ненасыщенного γ -лактонного цикла. На следующей стадии в реакциях аминирования тиоэфира с использованием (*S*)-валинола, (*S*)-метионинола, (*S*)-, (*R*)- и рацемического фенилглицинилов в условиях микроволнового нагрева в

этаноле синтезированы соответствующие 5-гидроксипроизводные пирролинона в виде смеси диастереомеров. Полученные производные пирролинона, содержащие две гидроксильные группы (во фрагменте аминоспирта и у атома углерода C(5) лактамного цикла), далее подвергнуты внутримолекулярной дегидратации под действием P_2O_5 в ацетонитриле. Продуктами явились конденсированные N,O -гетероциклы, содержащие фрагменты γ -лактама и оксазолидина, при этом выявлена высокая стереоселективность реакций циклизации дигидроксипроизводных пирролинона. На последней стадии выделенные индивидуальные стереоизомеры тиоэфиров на основе бициклов окислены до соответствующих сульфонов.

Строение всех новых гетероциклов доказано методами спектроскопии ИК и ЯМР, состав подтвержден данными метода масс-спектрометрии высокого разрешения. Молекулярная структура нескольких производных лактама охарактеризована методом рентгеноструктурного анализа. В ряду синтезированных соединений обнаружены вещества, обладающие способностью подавлять рост дрожжей *Candida albicans*.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 23-73-10182).

© Германенко Н.О., Хабибрахманова А.М.,
Миргалимова А.И., Шайхулова А.А., Курбангалиева А.Р., 2025

УДК 547.94:834.2

СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ (\pm)-САЛЬСОЛИДИНА
С ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ПРОТИВООПУХОЛЕВОЙ АКТИВНОСТЬЮ

Гильмутдинов А.Р., Ковальская А.В., Цыпышева И.П.

Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Природные изохинолиновые алкалоиды и их многочисленные полусинтетические производные проявляют широкий спектр биологической активности [1], в том числе, противоопухолевую [2]. Ранее нами среди производных алкалоидов сальсолина **1** и сальсолидина **2** были найдены вещества с умеренной цитотоксичностью (рис. 1) [3, 4].

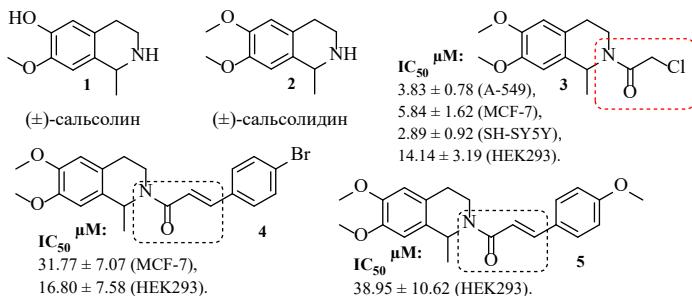
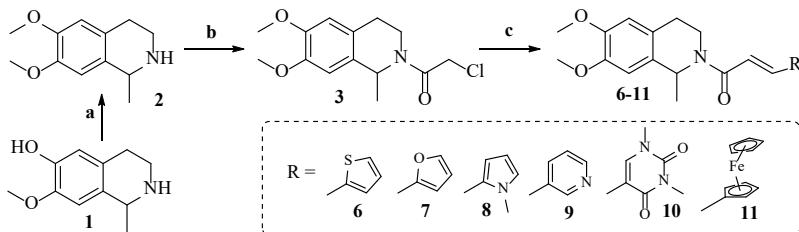


Рис. 1. (±)-Сальсолин **1**, (±)-сальсолидин **2** и производные **3–5**

С целью расширения библиотеки производных типа **4** и **5** предпринят синтез новых соединений **6–11** на основе реакции Виттига илида фосфора, полученного из хлорацетамида **3**, с фурфуролом, тиофен-, *N*-метилпиррол-, пиридин-, 2,3-диметилурацил- и ферроцен-карбальдегидами (схема 1).

Схема 1



Реагенты и условия: а) Вос-ангидрид, DMAP, ТГФ; MeI, Cs_2CO_3 , ацетон, 56 °C; H_2SO_4 (50%), 20 °C; б) Et_3N , ClCH_2COCl , CHCl_3 ; в) $\text{P}(\text{Ph})_3$, толуол, 110 °C; затем MeONa , MeOH , альдегид, 20 °C.

(±)-Сальсолидин **2** был получен из рацемического сальсолина **1** в три стадии: сначала вторичная аминогруппа **2** была защищена (Вос-ангидрид, DMAP, ТГФ), затем N-Вос-производное метилировали действием MeI в кипящем ацетоне в присутствии Cs_2CO_3 , снятие Вос-защитной группы привело к (±)-сальсолидину **2** с выходом 68% на три стадии. Физико-химические константы **2** соответствовали литературным [5].

Взаимодействие **2** с хлорангидридомmonoхлоруксусной кислоты в CHCl_3 в присутствии Et_3N дало амид **3** с выходом 95%. Затем смесь **3** и трифенилfosфина кипятили с обратным холодильником в толуоле; полученную фосфониевую соль использовали далее без дополнительной очистки. Илид фосфора генерировали метилатом натрия в MeOH , его

взаимодействие с соответствующими альдегидами (схема 1) привело к продуктам **6-11** с выходами 72-87%.

Таким образом, исходя из (\pm)-сальсолина получены потенциальные противоопухолевые агенты – конъюгаты (\pm)-сальсолидина с пяти- и шестичленными гетероциклическими фрагментами, включая 2,3-диметилурацил, а также с ферроценом.

Работа выполнена в рамках государственного задания УфИХ УФИЦ РАН «Направленные химические трансформации природных соединений растительного происхождения (терпеноидов, алкалоидов, флавоноидов, липидов, углеводов) для разработки перспективных лекарственных средств профилактики и терапии ряда социально-значимых заболеваний» № 125020601629-0.

Литература

1. Qing Z.-X., Yang P., Tang Q., Cheng P., Liu X.-B., Zheng Y.-J., Liu Y.-S., Zeng J.-G. Isoquinoline alkaloids and their antiviral, antibacterial, and antifungal activities and structure-activity relationship // Curr. Org. Chem. 2017. Vol. 21. P. 1-15.
2. Kuznetsova N.N., Abdullaeva L., Sadikov A.A. Comparative action of salsoline, salsolidine, and related compounds on KML tissue culture and animal tumor strains // Chem. Nat. Comp. 2005. Vol. 41. P. 234-235.
3. Koval'skaya A.V., Gil'mutdinov A.R., Lobov A.N., Tsypyshev D.O., Vakhitov V. A., Tsypysheva I. P., Dokichev V. A., Vakhitova Yu. V. Synthesis and cytotoxic activity of some (+)-salsolidine derivatives // Nat. Prod. Res. 2024. Vol. 38. P. 4092-4097.
4. Buckingham J., Baggaley K.H., Roberts A.D., Szlabo L.F. Dictionary of Alkaloids. Boca Raton London New York: CRC Press. 2010.

© Гильмутдинов А.Р., Ковальская А.В., Цыпышева И.П., 2025

УДК 547.833.3

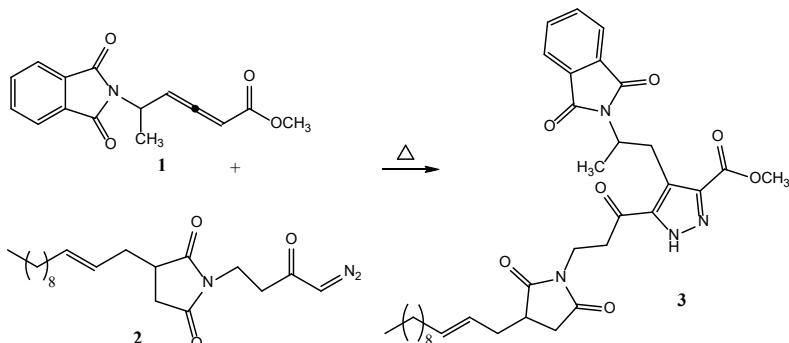
ПРИМЕНЕНИЕ ДИАЗОКЕТОНА С СУКЦИНИМИДНЫМ
ФРАГМЕНТОМ В СИНТЕЗЕ 3,4,5-ТРИЗАМЕЩЕНОГО 1 Н-ПИРАЗОЛА
Гиндуллина Г.М., Сахаутдинов И.М.

Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Аллены – это уникальный класс органических соединений с интересными свойствами и широким спектром применения в органическом синтезе [1]. Они обладают хорошей реакционной способностью и полезны как промежуточные продукты для создания других веществ, особенно тех, которые обладают биологической активностью. Особенно перспективными, с точки зрения создания биологически активных веществ, являются соединения, включающие в себя пиразольное кольцо. В последнее время данные соединения привлекают гораздо больше внимания благодаря своей полезности в

области сельскохозяйственной промышленности и разработки лекарств, например, противоопухолевых, противодиабетических, противомикробных, антибактериальных и противовирусных препаратов [2,3]. Поэтому, целенаправленный синтез новых гетероциклических соединений с пиразольным кольцом и их последующее широкое фармакологическое исследование представляет собой актуальную задачу.

Схема 1



3,4,5-Тризамещенный 1 *H*-пиразол **3** был синтезирован с помощью реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения 2,3-аленоата **1** (полученного на основе β -аминомасляной кислоты) с диазосоединением, содержащим сукцинимидный фрагмент **2**. Строение полученных и выделенных в индивидуальном виде соединений подтверждено спектральными методами: УФ-, ИК-, масс- и ЯМР ^{13}C -спектрами и данными элементного анализа.

Литература

1. Shichao Yu, Shengming Ma, Allenes in catalytic asymmetric synthesis and natural product syntheses. *Chem. Rev.*, 2012. V.51 (13). P. 3074-3112
2. Becerra D., Abonia R., Castillo J.-C. Recent Applications of the Multicomponent Synthesis for Bioactive Pyrazole Derivatives. *Molecules*, 2022. V. 27(15), P. 4723.
3. Гулюкина Н.С., Макухин Н.Н., Белецкая И.П. Методы синтеза 3(5)-фосфонилированных пиразолов. *Успехи химии*, 2016. V.85 (7), 667-683 с.

© Гиндулина Г.М., Сахаутдинов И.М., 2025

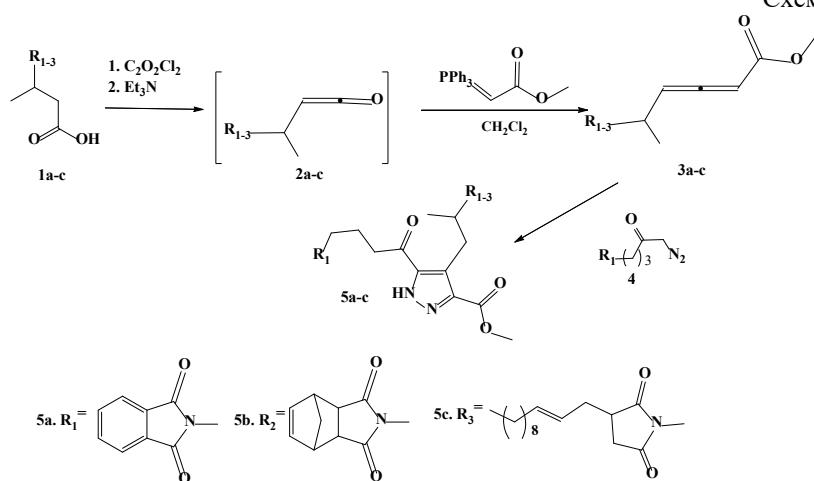
ПОЛУЧЕНИЕ 3,4,5-ТРИЗАМЕЩЕННЫХ 1Н-ПИРАЗОЛОВ ИЗ 2,3-
АЛЛЕНОАТОВ, СОДЕРЖАЩИХ ПИРРОЛИДИНДИОНОВЫЙ
ФРАГМЕНТ

Гиндуллина Г.М.¹, Сахаутдинов И.М.¹

¹Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Пиразолы – это важный класс гетероциклических соединений в современной химии благодаря уникальной структуре. Пиразолы обладают разнообразными фармакологическими эффектами – антибактериальными, противоопухолевыми, противовоспалительными, анальгезирующими, противовирусными и другими. Это делает их перспективными кандидатами для разработки новых лекарственных средств и биологически активных молекул. Примерами лекарственных препаратов на их основе являются метамизол (анальгин) – обезболивающее и жаропонижающее средство, а также фенилбутазон – противовоспалительное средство, применяемое при артритах и ревматизме. Поэтому, разработка новых гибридных молекул с пиразольным кольцом для повышения эффективности лекарств и снижения побочных эффектов остается актуальной задачей [1,2].

Схема 1



Алленоаты **3a–c** были синтезированы из продуктов конденсации ангидридов кислот с 3-аминобутановой кислотой **1a–c**. При обработке пирролидиндионаевых соединений **1a–c** с оксалилхлоридом образовались хлорангидриды, которые далее при взаимодействии с триэтиламином превращались в кетены **2a–c**. Кетены **2a–c** *in situ* участвовали в реакции олефинирования по Виттигу с метил(трифенилfosфоранилиден)ацетатом, что привело к получению

алленоатов **3а–с**. Структуры синтезированных соединений были подтверждены спектроскопическими методами. При нагревании в ацетонитриле в течение 56 часов реакция 1,3-диполярного циклоприсоединения диазокетона **4** к алленоатам **3а–с** приводила к образованию 3,4,5-тризамещённых 1Н-пиразолов **5а–с**.

Литература

1. Jahangir Alam¹, Ozair Alam, Perwaiz Alam, Mohd Javed Naim, A Review on Pyrazole chemical entity and Biological Activity – IJPSR, 2015. V.6 (12). P. 1433-1442.
2. Malikova R.N., Sakhautdinov I.M., Yunusov M.S., Synthesis of New Pyrazoles and 1,2,3-Triazoles from Allenoates Based on N-Maleopimarimide-Substituted Proteinogenic Amino Acids. Chem. Nat. Compd. V. 55. 60-65 с.

© Гиндулина Г.М., Сахаутдинов И.М., 2025

УДК 547.233

ПОЛУЧЕНИЕ Н-АРИЛ-С-ФОСФОНОАЦЕТАМИДИНОВ НА ОСНОВЕ МЕТОКСИЗАМЕЩЁННЫХ АРИЛАМИНОВ И ДИМЕТИЛ-2-(N-АЛКИЛИМИНО)ЭТЕНИЛФОСФОНАТОВ

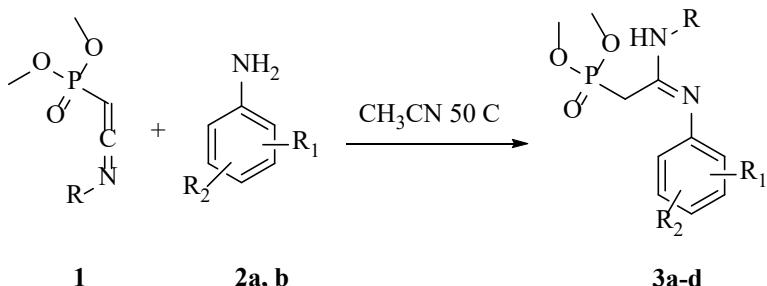
Головко А.И., Свинцицкая Н.И.

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

Амидины – азотсодержащие аналоги карбоновых кислот – представляют собой высокоосновные и биологически активные соединения, широко применяемые в качестве ключевых интермедиатов в синтезе металлоорганических соединений и гетероциклических систем. Их структура сочетает свойства азометиновой C=N и амидной C–N связей, что придает им частично двойственный характер, определяющий их реакционную способность и координационные свойства.

Фосфонилированные амидины, содержащие фосфонатный фрагмент, находят применение в медицинской химии, катализе, а также в реакциях с участием супероснований. Особый интерес представляют фосфорилированные пептиды с амидиновым звеном, которые, например, могут быть потенциальными ингибиторами тромбина и других сериновых протеаз, участвующих в процессах коагуляции.

В продолжение исследований в области химии функционально-замещённых аминофосфонатов нами осуществлён синтез новых N-арил-С-фосфоноацетамидинов **3а–д** на основе диметил-2-(N-адамант-1-ил/*трет*-бутил)иминоэтенилфосфонатов **1** и метоксизамещённых ариламинос **2** с выходом 58-72%.



$\text{R} = \text{Ad, t-Bu}$

$2\text{a} - \text{R}_1 = 2\text{-OCH}_3, \text{R}_2 = 5\text{-OCH}_3$

$2\text{b} - \text{R}_1 = 3\text{-OCH}_3, \text{R}_2 = 4\text{-OCH}_3$

Использование 2,5-диметоксианилина и 3,4-диметоксианилина позволило оценить влияние электронодонорных заместителей на реакционную способность аминов. Установлено, что наличие метоксигрупп в *ортото*- и *пара*-положениях способствует увеличению нуклеофильности аминогруппы, что отражается на выходах целевых продуктов и скорости реакции. Полученные соединения представляют интерес как потенциальные биологически активные молекулы, сочетающие амидиновую и фосфонатную функции.

Строение полученных соединений подтверждено методами спектроскопии ЯМР ^1H , ^{13}C , ^{31}P .

© Головко А.И., Свиницкая Н.И., 2025

УДК 547.816.9

СИНТЕЗ ОКТАГИДРО-2Н-ХРОМЕНОВ, СОДЕРЖАЩИХ ИМИДАЗОЛЬНЫЙ ФРАГМЕНТ – ПЕРСПЕКТИВНЫХ ГИПОТЕРМИЧЕСКИХ АГЕНТОВ

Головченко Д.Д.^{1,2}, Ли-Жуланов Н.С.¹

¹Новосибирский институт органической химии НИОХ СО РАН,
Новосибирск, Россия

²Новосибирский государственный университет, Новосибирск, Россия

Разработка новых агентов, способных индуцировать гипотермию (снижение температуры тела), открывает широкие возможности в области медицины катастроф, когда для транспортировки в медицинские учреждения пострадавших в тяжелом состоянии важно снизить вероятность возникновения тяжелых неврологических исходов. Терапевтическая гипотермия эффективна при лечении энцефалопатии и остановки сердца [1].

Ранее в нашей лаборатории была исследована tandemная трёхкомпонентная реакция Принса-Риттера между (–)-изопулеголом,

ароматическими альдегидами и нитрилами [2]. В результате образуются гетероциклические соединения с октагидро-2*H*-хроменовым остовом. Особый интерес представляет использование хлорсодержащих нитрилов, поскольку атом хлора в полученных продуктах может быть, в дальнейшем замещён, например, на аминогруппы или *N*-гетероциклы. Это открывает путь к синтезу разнообразных амино-амидных производных на основе октагидро-2*H*-хромена. Было обнаружено, что некоторые из этих соединений способны индуцировать гипотермию [3].

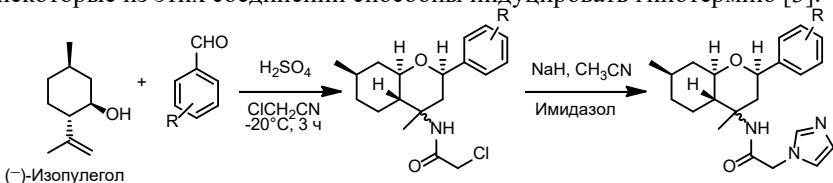


Рис. 1. Синтез целевых соединений

В данной работе был проведён синтез новых производных октагидро-2*H*-хроменов, содержащих имидазольный фрагмент.

Литература

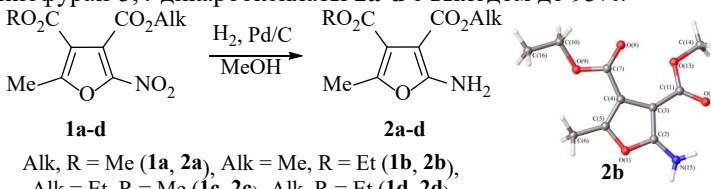
1. Hypothermia after Cardiac Arrest Study Group. Mild Therapeutic Hypothermia to Improve the Neurologic Outcome after Cardiac Arrest // N. Engl. J. Med. 2002. Vol. 346. № 8. P. 549–556.
2. Li-Zhulanov N.S. et al. Chiral *N*-(Octahydro-2*H*-chromen-4-yl)-2-(dialkylamino)-acetamides: Synthesis and Analgesic Activity // Dokl. Chem. 2023. Vol. 512. № 1. P. 242–248.
3. Ли-Жуланов Н.С., Николайчук К.М., Хвостов М.В., Волчо К.П., Салахутдинов Н.Ф., Толстикова Т.Г. Новые агенты на основе изопулегола, вызывающие гипотермию у животных. Патент 2814731, Бюл. № 7, опубликовано: 04.03.2024.

© Головченко Д.Д., Ли-Жуланов Н.С., 2025

2-АМИНОФУРАН-3,4-ДИКАРБОКСИЛАТЫ:
СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И БИОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
Гомонов К.А., Пелипко В.В., Макаренко С.В.
*Российский государственный педагогический университет
им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия*

Среди замещенных фуранкарбоксилатов известны биологически активные представители [1]. В свою очередь, введение в их молекулу аминогруппы может привести к появлению новых полезных свойств.

Нами показано, что 2-нитрофuran-3,4-дикарбоксилаты **1a-d** [2] при восстановлении в токе водорода на платиновом катализаторе в растворе метанола при комнатной температуре превращаются в соответствующие 2-аминофuran-3,4-дикарбоксилаты **2a-d** с выходом до 93%.



В спектрах ЯМР ^1H соединений **2a-d** сигнал аминогруппы проявляется синглетом в области 5.45-5.53 м.д. ИК спектры содержат полосы поглощения валентных ($3292\text{-}3324$ и $3430\text{-}3499\text{ cm}^{-1}$) и деформационных ($1634\text{-}1645\text{ cm}^{-1}$) колебаний аминогруппы, а также карбонильной группы сложноэфирного фрагмента ($1667\text{-}1730\text{ cm}^{-1}$). Низкочастотные полосы карбонильной группы, по-видимому, связаны с копланарностью её и фуранового кольца, а также наличием сопряжения с аминогруппой. Действительно, по данным РСА аминофурана **2b** аминогруппа и сложноэфирные группы находятся в плоскости фуранового кольца.

Проведенная оценка возможной биологической активности для соединений **2a**, **2d** с использованием on-line версии программы PASS показала, что они могут проявлять ингибирующие свойства в отношении ряда ферментов (фузаринин-С орнитинэстеразы, химозина, сахаропепсина, аргинин-2-монооксигеназы и др.).

Таким образом, полученные нами с хорошими выходами 2-аминофuran-3,4-дикарбоксилаты представляются перспективными объектами для дальнейшего изучения биологической активности.

Литература

1. Gomonov K.A., Pelipko V.V. *Chem. Heterocycl. Compd.* 2022. 58 (8/9). 394.
2. Gomonov K.A. et all. *Mendeleev Commun.* 2024. 34(3). 398.

© Гомонов К.А., Пелипко В.В., Макаренко С.В., 2025

УДК 541.14:547.551.2

МОНОТИОМАЛОНДИАНИЛИД В СИНТЕЗЕ НОВЫХ ЧАСТИЧНО
НАСЫЩЕННЫХ НИКОТИНАМИДОВ

Горниченко Р.Н.¹, И.О. Курочкин¹, В.В. Доценко^{1,2}, Н.А. Аксенов²

¹Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия

²Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, Россия

Известно, что тиоамиды, содержащие атомы водорода в α -положении по отношению к тиокарбамоильной группе, проявляют СН-кислотные свойства [1-3]. Это свойство широко используется для синтеза различных гетероциклов (в частности, производных никотинамида) посредством реакций таких тиоамидов с 1,3-диэлектрофилами [3]. Никотинамиды естественным образом присутствуют в живых системах, а в качестве фармацевтических препаратов могут применяться для лечения широкого спектра заболеваний.

Исходя из соответствующего альдегида, малононитрила и монотиомалондиалида в присутствии морфолина, нами был получен ряд ранее не описанных в литературе 4-арил-6-амино-5-циано-N,1-дифенил-2-тиоксо-1,2,3,4-тетрагидропиридин-3-карбоксамидов **1** (Рис. 1). Реакция протекает через промежуточное образование арилиденмалононитрилов, с последующим присоединением по Михаэлю и региоселективной гетероциклизацией. Строение полученных соединений подтверждено комплексом спектральных данных, а также PCA.

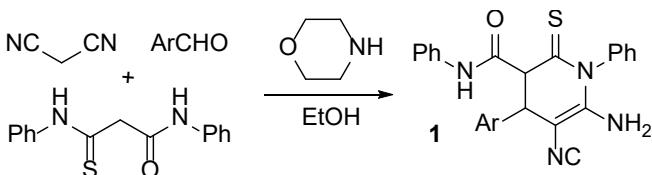


Рис. 1. Схема получения соединений **1**

Эффективность полученных продуктов в качестве потенциально биоактивных препаратов была спрогнозирована по результатам молекулярного докинга с использованием протокола Galaxy Web Sagittarius. Так, никотинамид **1** ($\text{Ar} = 4\text{-MeOC}_6\text{H}_4$) обладает афинностью ($\Delta G = -22.586$ ккал/ммоль) к протеиновому комплексу H-Ras:SOS (PDB ID 6pf6, Uniprot ID P04818) (рис.2) что указывает на потенциальную перспективность исследования противоопухолевых свойств соединений **1**.

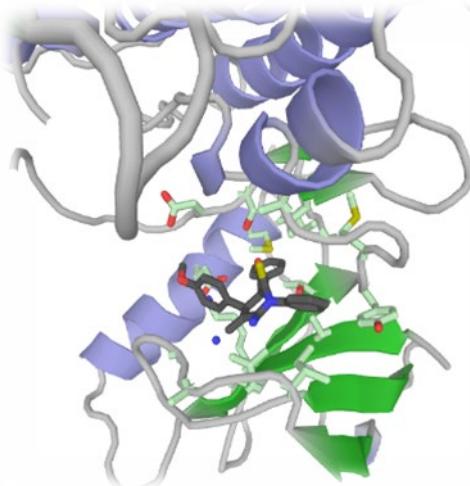


Рис. 2. Структура комплекса соединения 1 и протеинового комплекса

H-Ras:SOS (PDB ID 6pf6) (данные Galaxy Web Sagittarius)

Литература

1. Murai, T. Chemistry of Thioamides. – Singapore: Springer, 2019. 238 p.
2. Guo W.S., Wen L.R., Li M. // Org. Biomol. Chem., 2014, vol. 13, p. 1942.
3. Dyachenko V.D., Dyachenko I.V., Nenajdenko V.G. // Russ. Chem. Rev., 2018, vol. 87, №. 1, p. 1.

© Горниченко Р.Н., Курочкин И.О., Доценко В.В., Аксенов Н.А., 2025

УДК 547.814.1

ПЕРЕАМИНИРОВАНИЕ 3-ДИМЕТИЛАМИНОМЕТИЛЕН-4- (ТИО)ОКСОХРОМЕН-2-ОНОВ 1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-АМИНОМ: СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНЫЙ СИНТЕЗ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА.

Гребенникова В.А, Мажукина А.О.

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

Особое внимание в современной химии привлекают аминометиленхромен-2-оны – соединения, отличающиеся уникальными химическими свойствами и структурной вариабельностью. Их способность служить универсальными строительными блоками (синтонами) для гибридных систем прокладывает путь к новым достижениям в тонком органическом синтезе и материаловедении.

Ранее нами показана возможность участия в реакциях переаминирования 3-диметиламинометилен-4-оксохромено-2-она и его тио- аналога под действием 1,2,4-триазол-3-амина.

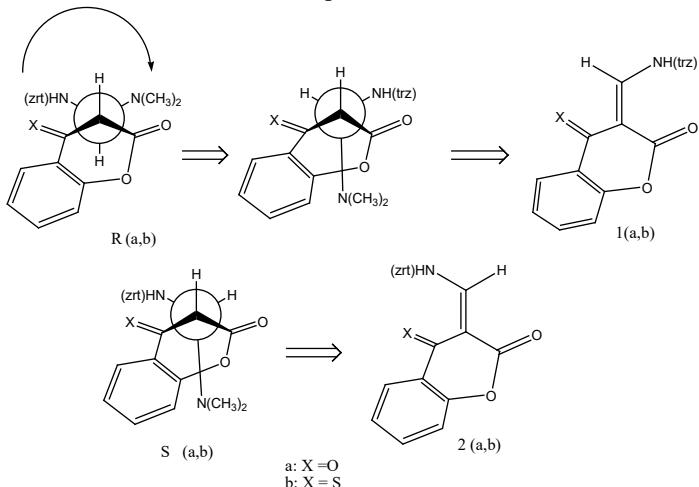


Схема 1. Процесс образования геометрических Z и E изомеров 3-((4Н-1,2,4-триазол-3-иламино)метилен)-3,4-дигидро-4-(тио)оксохромен-2-онов (a,b)

Механизм реакции переаминирования, включающий стадию нуклеофильной атаки аминогруппы триазола по двойной связи C=C аминометилиденового фрагмента с образованием промежуточного аддукта, который может иметь R или S конфигурацию асимметрического центра. Последующее элиминирование диметиламина приводит к формированию конечного продукта в виде Z- и E-изомеров. В настоящей работе с помощью квантовохимических расчетов геометрии молекул E и Z изомеров и энергии их образования (функционал B3LYP с базисным набором 6-31G(d,p)) мы установили влияние атома серы в молекуле исходного соединения на реализацию предпочтительного геометрического изомера для каждого из веществ 1 (a,b) в том числе за счет стабилизации водородной связью между водородом экзоциклической аминогруппы и лактонным карбонилом).

Таблица 1

Относительные значения энергии (ед. Хартри) E-, Z-форм енаминов 1,2 на уровне теории B3LYP/6-311++G(d).

| Соединение | Z-изомер | E-изомер |
|------------|--------------|---------------|
| a | -906,998839 | -906,9882658 |
| b | -1229,930188 | -1229,9571676 |

В ЯМР ^1H спектрах обоих соединений отмечаются сигналы винильного протона при 8.30 м.д. (1a) и 8.45 м.д. (1b), а также синглеты протонов аминогруппы триазольного фрагмента 8.1 м.д. и 7.8 м.д. соответственно. Протон экзоциклической NH группы аминометилиденового фрагмента смещен в более слабое поле (9.8 мд. и 10.2 м.д.) вследствие реализации его водородной связи с лактонной карбонильной группой, что соответствует предложенному в случае каждого из рассматриваемых соединений геометрическому изомеру.

Литература

1. Петров А.А., Белова Н.К. Синтез и свойства аминометиленпроизводных хромен-2-она // Журнал органической химии. 2020. Т. 56, № 3. С. 450-459.
2. Смит Дж., Джонсон Р. Химия 1,2,4-триазолов / пер. с англ. В.К. Иванова; под ред. П.С. Дмитриева. М.: Мир, 2018. 354 с.
3. Frisch, M.J. et al. Gaussian 16, Revision C.01. Wallingford, CT: Gaussian, Inc., 2019.

© Гребенникова В.А., Мажукина А.О., 2025

УДК 547.831

СИНТЕЗ НОВЫХ ГУАНИДИНОВ НА ОСНОВЕ N-ЗАМЕЩЕННЫХ 6-АМИНО-7-ГИДРОКСИ-2,2,4-ТРИМЕТИЛ-1,2,3,4- ТЕТРАГИДРОХИНОЛИНОВ

Грибанова Я.А., Потапов А.Ю.

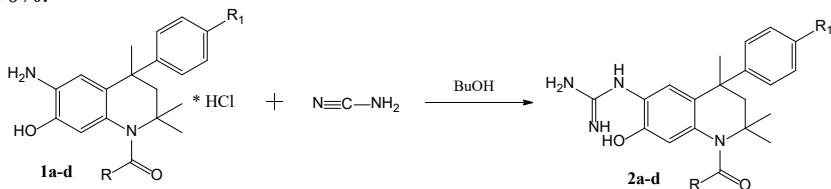
Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

Азотсодержащие биологически активные соединения выполняют в организмах различные функции, такие как формирование структурного каркаса, осуществление катализа, регуляции, передачи сигналов и хранения информации. [1] В связи с этим целенаправленный синтез этих веществ и их аналогов является ключевой задачей для современной фармакологии и биотехнологии, открывая пути к созданию новых лекарственных препаратов и терапевтических стратегий. Разработка эффективных методов синтеза позволяет получать целевые молекулы с заданными свойствами, модифицировать природные структуры для усиления активности и снижения токсичности и т.д. [2,3].

Одними из наиболее ярких и практически значимых представителей этого класса соединений являются хинолин и его производные. [4,5] Поэтому целью настоящего исследования является синтез новых гуанидинов на основе N-замещенных 6-амино-7-гидрокси-2,2,4- trimetil-1,2,3,4-тетрагидрохинолинов.

Установлено, что при кипячении N-ацил-6-амино-4-арил-7- гидрокси-2,2,4-trimetil-1,2,3,4-тетрагидрохинолинов **1a-d** с цианамидом в среде сухого бутанола образуются перспективные в синтетическом плане 1-(1-ацил-4-арил-7-гидрокси-2,2,4-trimetil-1,2,3,4-

тетрагидрохинолин-6-ил)гуанидины **2a-d**. Выход продуктов составил 65-70%.



1a, 2a: R=CH₃; R_j=H
1b, 2b: R=CH₂; R_j=Cl
1c, 2c: R=Ph; R_j=H
1d, 2d: R=Ph; R_j=Cl

Литература

1. Natural Products: Phytochemistry, Botany and Metabolism of Alkaloids, Phenolics and Terpenes / Ed.: K.G. Ramawat, J.M. Mérillon // Springer. 2013. 4242 p.
2. Cebeci Y.U. Design, synthesis, theoretical studies, and biological activity evaluation of new nitrogen-containing poly heterocyclic compounds as promising antimicrobial agents / Y.U. Cebeci, Ö.Ö. Batur, H. Boulebd // Journal of Molecular Structure. 2024. V. 1299, № 137115.
3. An overview of the synthesis of biheterocyclic compounds featuring four-membered rings containing nitrogen, oxygen, or sulfur / S. Das, B. Choudhury, S. Chauhan [et al] // Tetrahedron. – 2025. – V. 181, № 134679.
4. Meunier B. Hybrid molecules with a dual mode of action: dream or reality? / B. Meunier // Acc Chem Res. 2007. V. 41. № 1. P. 69-77.
5. 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

© Грибанова Я.А., Потапов А.Ю., 2025

УДК 547.569.3:547.822.6:547.825

НОВЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА ПРОИЗВОДНЫХ БИС(ПИРИД-2-ИЛ)ДИСУЛЬФИДА

Дахно П.Г.¹, Доценко В.В.¹

¹Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия

Бис(пирид-2-ил)дисульфиды **1** представляют собой класс соединений, обладающих значительным практическим потенциалом. Так, простейший представитель класса – 2,2'-дипиридилилдисульфид (PyS-SPy) – способен индуцировать образование внутримолекулярных дисульфидных связей в линейных пептидах, содержащих два восстановленных цистeinовых остатка. На основе PyS-SPy разработаны инновационные электролиты и электроды для литий-ионных аккумуляторов [1].

Помимо этого, бис(пирид-2-ил)дисульфиды используются в синтезе гликопротеинов и проявляют антиретровирусную активность [2], а также демонстрируют ингибирующие свойства в отношении кислотной коррозии низкоуглеродистой стали.

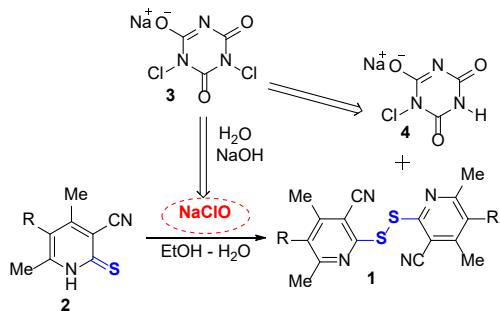
Благодаря наличию четырех донорных атомов (N,S) 2,2'-дипиридилилдисульфиды могут быть использованы в качестве лигандов для получения комплексных соединений. Так, в литературе описаны координационные соединения бис(пирид-2-ил)дисульфидов с ионами ртути, кадмия, цинка, ванадия, рутения, меди(II) [3], кобальта, лантаноидов и меди(I) [4].

Одним из препаративно наиболее доступных методов получения замещенных бис(пирид-2-ил)-дисульфидов **1** является окисление доступных 2-тиоксо/2-меркаптоникотинонитрилов **2**.

Однако, выбор окислителей для этой реакции в литературе ограничен и чаще всего включает использование йода в присутствии оснований, а также систем типа $\text{NaNO}_2\text{-CH}_3\text{COOH}$, DMCO-HCl [5], $\text{DMCO-CF}_3\text{CO}_2\text{H}$ и $\text{H}_2\text{O}_2\text{-KOH}$ [6].

В рамках продолжения исследований реакций окисления производных цианотиоацетамида, была изучена возможность получения бис(пирид-2-ил)дисульфидов **1** из 5-алкил-4,6-диметил-2-тиоксо-1,2-дигидроникотинонитрилов **2** с использованием дихлоризоцианурата натрия **3**. Установлено, что реакция 2-тиоксонипиридинов **2** с дихлоризоциануратом натрия **3** в присутствии 10%-ного водного раствора NaOH в водно-спиртовой среде приводит к образованию соответствующих бис(пирид-2-ил)дисульфидов **1** (схема 1). Сложность очистки этих соединений обусловлена присутствием в реакционной смесиmonoхлоризоцианурата натрия **4**, который хорошо растворим в органических растворителях. Для удаления неорганических примесей требуется многократная промывка продуктов горячей водой на фильтре.

Схема 1



Литература

1. Song J., Si Y., Guo W., Wang D., Fu Y. Organosulfide-Based Deep Eutectic Electrolyte for Lithium Batteries // *Angew. Chem.* 2021. Vol. 133. № 18. P. 9969.
2. Rice W.G., Turpin J.A., Schaeffer C.A., Graham L., Clanton D., Buckheit R.W., Jr, Zaharevitz D., Summers M.F., Wallqvist A., Covell D.G. Evaluation of Selected Chemotypes in Coupled Cellular and Molecular Target-Based Screens Identifies Novel HIV-1 Zinc Finger Inhibitors // *J. Med. Chem.* 1996. Vol. 39. № 19. P. 3606.
3. Kinoshita I., Wright L.J., Kubo S., Kimura K., Sakata A., Yano T., Miyamoto R., Nishioka T., Isobe K. // *Dalton Trans.* 2003. № 10. P. 1993.
4. Niu Y., Zhang N., Hou H., Zhu Y., Tang M., Ng S. // *J. Mol. Struct.* 2007. Vol. 827. № 1–3. P. 195.
5. Доценко В.В., Кривокольско С.Г. Окисление тиоамидов системой ДМСО-HCl: удобный и эффективный метод синтеза 1,2,4-тиадиазолов, изотиазоло[5,4-*b*]пиридинов и гетероциклических дисульфидов // ХГС. 2013. Т. 49. № 4. С. 682
6. Dotsenko V.V., Krivokolysko S.G., Cherne- ga A.N., Litvinov V.P. Anilinomethylidene derivatives of cyclic 1,3dicarbonyl compounds in the synthesis of new sulfur containing pyridines and quinolines // *Russ. Chem. Bull.* 2002. Vol. 51. « 8. P. 1556.

© Дахно П.Г., Доценко В.В., 2025

УДК 547.597: 547-311

СИНТЕЗ НОВЫХ ОЛЕАННОВЫХ α -ГИДРОКСИЭПОКСИДОВ

Елхов И.А.¹, Толмачева И.А.^{1,2}, Гришко В.В.¹

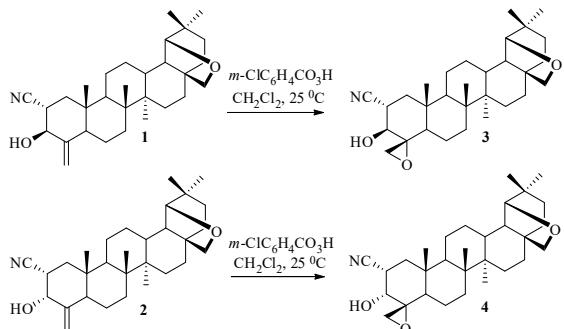
¹«Институт технической химии УрО РАН» – филиал ПФИЦ УрО РАН,
Пермь, Россия

²Пермский государственный национальный исследовательский
университет, Пермь, Россия

Эпоксиды находят широкое применение в органическом синтезе в качестве универсальных строительных блоков благодаря реакции раскрытия оксиранового кольца [1]. При этом регио- и стереохимия продуктов часто зависит от энантиомерной чистоты эпоксида и наличия вицинальных по отношению к оксирановому фрагменту функциональных групп.

Нами получены новые 18 α H-олеанановые α -гидроксиэпоксиды (**3**) и (**4**), перспективные для синтеза функционализированных оптически активных тритерпеноидов. Следует отметить, что окисление *m*-хлорнадбензойной кислотой прохиральных 24 α -гидрокси- (**1**) и 24 β -гидрокси- (**2**) алkenов [2] протекало стереоселективно с образованием 24-

изомерных (*4R*)-4,23-эпоксидов (3), (4). Структура синтезированных соединений была подтверждена данными ИК-, 1D и 2D ЯМР-спектроскопии.



Работа выполнена в рамках Государственного задания: номер государственной регистрации темы №124021400012-1.

Литература

1. Hanif M Exploring the synthetic potential of epoxide ring opening reactions toward the synthesis of alkaloids and terpenoids: a review. / Hanif M., Zahoor A. F., Saif M. J., Nazeer U., Ali K. G., Parveen B., Mansha A., Chaudhry A.R., Irfane A. // RSC Adv. 2024. Vol. 14. P. 13100-13128.
 2. Tolmacheva I.A. Synthesis, cytotoxic evaluation, and molecular docking studies of the semi-synthetic “triterpenoid-steroid” hybrids. / Tolmacheva I.A., Nazarov A.V., Eroshenko D.V., Grishko V.V. // Steroids. 2018. Vol. 140. P. 131-143.

© Елхов И.А., Толмачева И.А., Гришко В.В., 2025

УЛК 547.297.3

НОВЫЙ СПОСОБ ХЛОРАЦЕТИЛИРОВАНИЯ 3- МЕТОКСИФЕНОЛА

Жураева М.Ш.¹, Чориев А.У.¹, Абдушукuros А.К.²

¹Каршинский государственный университет, Карши, Узбекистан

²Национальный университет Узбекистана имени Мирзо Улугбека,
Ташкент, Узбекистан

Фенолы, являясь эффективными антиоксидантами, могут применяться для синтеза синтетические химико-фармацевтические препараты для медицинской химии [1]. Ранее хлорацетил производные метоксифенолов получали методом хлорацетилирования в гомогенной среде в присутствии концентрированной ортоfosфорной кислоты [2].

С целью разработки селективного метода синтеза хлорацета 3-метоксифенола в данной работе в качестве катализатора применена полифосфорная кислота нанесенная на диатомита. Реакция проводилась в проточном реакторе о внешним обогревом. Процесс осуществляли при

140-150°C при капыванием раствора 3- метоксифенола вmonoхлоруксусном кислоте (1-3:1) со скоростью 0,08. Выход хлорацетил 3-метоксифенола составляет 87%.

Состав продуктов хлорацетилирования изучали методами ГЖХ и ИК. Установлено, что в результате хлорацетилирования 3-метоксифенола образуются смесь 3- метоксифенилхлорацетата (1-5%) и изомерных хлорацетил 3-метоксифенолов.

Изучение влияния условий реакции хлорацетилирования на динамику накопления указанных продуктов методом отбора проб о последующим хроматографирования показало, что выход целевого продукта зависит от температуры процесса, соотношения 3-метоксифенола и monoхлоруксусного кислота и скорости подачи их в реактор.

Метод жидкофазного хлорацетилирования в проточном реакторе позволяет проводить процесс непрерывно, исключить стадии обработки и очистки продуктов реакции характерные для гомогенного хлорацетилирования ароматических соединений, в частности фенолов.

Литература

1. Солдатенков А.Т., Колядина Н.М., Шендрик И.В. Основы органической химии лекарственных веществ, Химия, Москва, 2001, 192 с.
2. Чориев А.У., Абдушукuros А.К. Перегруппировка метаметоксифенилхлорацетата в синтезе 4-гидрокси-2-метоксифенацилхлорида и 2-гидрокси-4-метоксифенацилхлорида // Universum: химия и биология. Москва. 2016. № 12 (30), С. 55-58.

© Жураева М.Ш., Чориев А.У., Абдушукuros А.К., 2025.

УДК 547.514.71 + 547.514.472.1

ПРОИЗВОДНЫЕ 4,5-ДИХЛОР-2-(4-ГИДРОКСИ-3,5-ДИ- ИЗОПРОПИЛБЕНЗИЛИДЕН)ЦИКЛОПЕНТ-4-ЕН-1,3-ДИОНА С АМИНОКИСЛОТАМИ

Исхакова Э.Р.¹, Хасанова Л.С.², Егоров В.А.², Миннибаева Э.М.¹

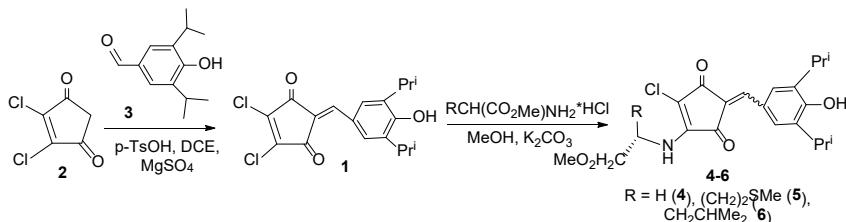
¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Ранее нами были получены новые конъюгаты соединения **1**, полученного конденсацией циклопентендиона **2** с альдегидом **3**, с различными аминами, среди которых были выявлены представители с высокой активностью в отношении ряда опухолевых клеток [1]. В продолжение этих исследований в данной работе нами синтезированы новые производные диона **1**, содержащие аминокислотные фрагменты у C-5 циклопентенонового кольца. Реакцию диона **1** с гидрохлоридами

метиловых эфиров аминокислот (глицин, L-метионин, L-лейцин) проводили в разработанных ранее условиях [2] в метаноле в присутствии избытка K_2CO_3 при комнатной температуре, выходы продуктов реакции составили 50–52% (схема 1). Соединения 4–6, выделенные хроматографией на колонке с силикагелем, представляют собой смесь Z,E-изомеров, структура которых однозначно установлена данными спектроскопии ЯМР и масс-спектрометрии.

Схема 1



Литература

- Егоров В.А., Хасanova Л.С., Ишметова Д.В., Гималова Ф.А. Новые цитотоксичные кросс-сопряженные циклопентендионы из 4,5-дихлорцикlopент-4-ен-1,3-диона. Сборник материалов III Всероссийской школы-конференции по медицинской химии для молодых ученых с международным участием. Г. Уфа, 2025. С. 75.
- Гималова Ф.А., Егоров В.А., Торосян С.А., Мифтахов М.С. О реакции 5-аллил-4,4-диметокси-2,3,5-трихлорцикlopент-2-ен-1-она с аминокислотами. Журн. орган. химии. 2007. Т. 43. Вып. 7. С. 987–989.

© Исхакова Э.Р., Хасanova Л.С., Егоров В.А.,
Миннибаева Э.М., 2025

УДК 541.14:547.551.2

СИНТЕЗ ГАММА-ГИДРОКСИАЦЕТИЛЕНКЕТОНОВ И ИХ ПРЕВРАЩЕНИЯ В УСЛОВИЯХ СУПЕРЭЛЕКТРОФИЛЬНОЙ АКТИВАЦИИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ СИЛЬНЫХ КИСЛОТ БРЕНСЕДА Каляев М.В.^{1,2,3}

¹Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Уфа, Россия

²Санкт-Петербургский государственный лесотехнический
университет, Санкт-Петербург, Россия

³Институт химии Санкт-Петербургского государственного
университета, Санкт-Петербург, Россия

Производные ацетилена активно применяют в различных отраслях промышленности: металлургии, нефтепереработке, фармацевтике. На их основе получают большое количество ценных веществ и материалов,

такие как: полимеры, лаки, краски, растворители, лекарственные препараты. Стоит отметить, что благодаря высокой и разнообразной реакционной способности тройной связи ее активно используют в синтезе гетероциклических соединений - важнейших структурных блоков для создания инновационных лекарственных препаратов на основе малых молекул. Можно отметить, что синтез новых органических соединений, содержащих ацетиленовую связь и изучение их реакционной способности является актуальной задачей органической химии.

На первом этапе работы были синтезированы соответствующие гамма-гидроксиацетиленкетоны по реакции Соногаширы между хлорангидридами бензойных кислот и спиртами Фаворского с выходами 76-98%.

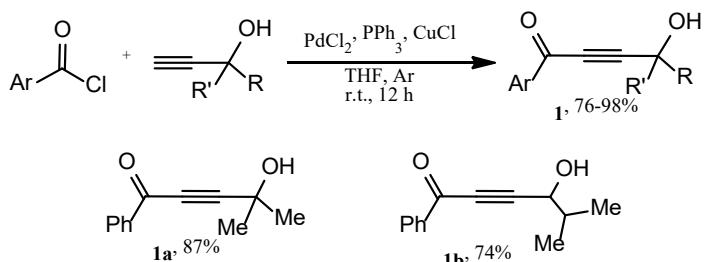


Рис. 1. Синтез исходных гамма-гидроксиацетиленкетонов

Вторым этапом работы стало изучение реакционной способности полученных соединений в условиях суперэлектрофильной активации под действием сильных кислот Бренстеда. Под действием трифторметансульфоновой кислоты(TfOH) соединение **1a** превращается в алken **2a**. Однако, при взаимодействии с серной кислотой, происходит образование 3-фуранона **3a**.

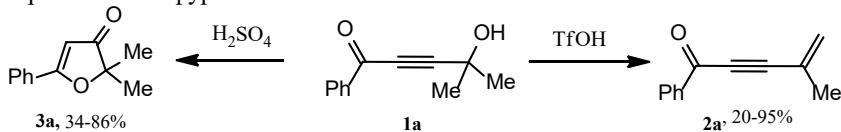


Рис. 2. Реакции **1a** с сильными кислотами Бренседа

Исследуя превращения соединения **1b** в сильных кислотах, было найдено, что при взаимодействии с серной кислотой образуется соответствующий 3-фуранон. Однако, интересно, что при взаимодействии с суперкислотой(трифторметансульфоновой) не образуется алкен, как в случае **2a**, а происходит образование пиранона **2b**

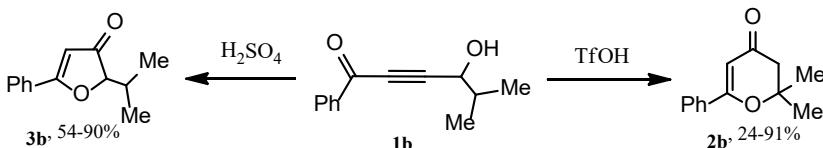


Рис. 3. Реакции **1b** с сильными кислотами Бренседа

Была изучена реакционная способность нескольких гамма-гидроксиацетиленкетонов, найдено, что при взаимодействии с серной кислотой образуются 3-фураноны **3a** и **3b**. В реакциях с трифторметансульфоновой кислотой могут образовываться продукты элиминирования гидроксигруппы с образованием алкена **2a** и пиранона **2b**.

Полученные результаты открывают новые возможности для использования гамма-гидроксиацетиленкетонов в органическом синтезе.

© Каляев М.В., 2025

УДК 547.747, 547-316

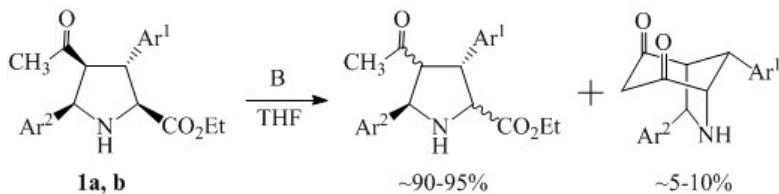
ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНАЯ КОНДЕНСАЦИЯ ЗАМЕЩЕННЫХ ПИРРОЛИДИНОВ КАК СПОСОБ СИНТЕЗА КАРКАСНЫХ БИЦИКЛОВ.

Калязин В.А., Царев Д.С., Безрукова Е.В., Кострюков С.Г.

ФГБОУ ВО «МГУ им. Н.П. Огарёва», Саранск, Россия

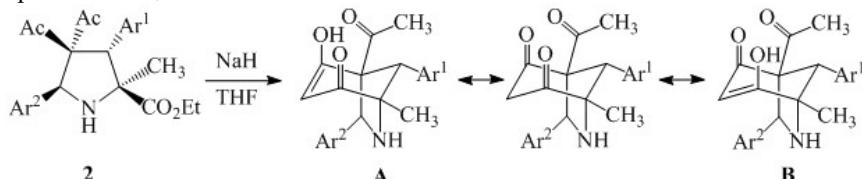
Многочисленные природные и синтетические физиологически активные соединения содержат в своей структуре замещенные азабицикло[3.2.1]-октаны и, реже, 6-азабицикло-[3.2.1]октаны. Возможная стратегия синтеза подобных соединений может быть основана на внутримолекулярных реакциях пирролидинов, стереоселективно получаемых в реакции [3 + 2]-циклоприсоединения [1-3]. Однако примеров подобных внутримолекулярных конденсаций с участием CH-кислотных центров (например, CH₃CO-групп) описано не было.

В случае соединений **1a**, **b**, полученных исходя из азометинилидов глицина и арилиденакетонов, при воздействии оснований (B = EtONa, t-BuOK, NaH) наблюдался процесс эпимеризации по атомам углерода в положении 2 и 4. Это объясняется тем, что термодинамически более стабильна форма карбаниона с локализацией заряда на углероде пирролидинового цикла и соответствующий, более замещенный, енол. Продукт конденсации наблюдался в незначительном количестве.



$\text{Ar}^1 = 4\text{-Cl-C}_6\text{H}_4$ (**a**, **b**) $\text{Ar}^2 = \text{C}_6\text{H}_5$ (**a**) 4-Cl-C₆H₄ (**b**)

В качестве другого субстрата был выбран пирролидин 2, в котором сложноэфирная и ацетильная группы положений 2 и 4 связаны с четвертичными атомами углерода. Это позволяет исключить возможность эпимеризации. Конденсацию проводили в ТГФ при действии гидрида натрия. Полученный продукт очищали кристаллизацией.



$\text{Ar}^1 = 4\text{-Cl-C}_6\text{H}_4$, $\text{Ar}^2 = \text{C}_6\text{H}_5$, $\text{Ac} = \text{CH}_3\text{CO}$

Структура бициклического соединения подтверждалась на основании результатов спектроскопии ЯМР ^{13}C (рис.1) при сопоставлении с литературными данными и модельными спектрами.

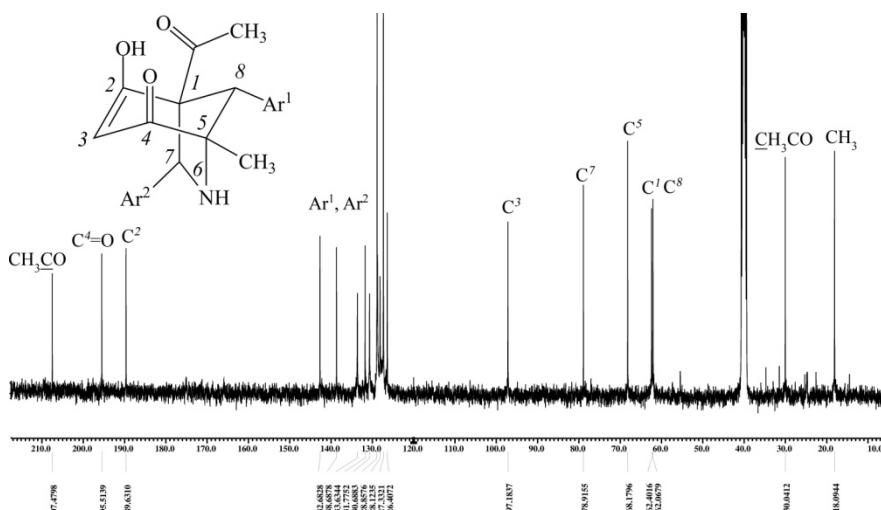


Рис. 1. ЯМР ^{13}C спектр енольной формы А

Соединение существует в енольной форме А. Преобладание данной формы можно объяснить дополнительной стабилизацией за счет образования водородной связи между пространственно сближенными водородом ОН-группы и кислородом ацетильного фрагмента.

Литература

1. Эмануэль Н.М., Денисов Е.Т., Майзус З.К. Цепные реакции окисления углеводоро-дов в жидкой фазе. М.: Наука, 1965. 375 с.
1. Zhang K., Deng Q., Luo J. et al. Multifunctional Ag(I)/CAAA-Amidphos Complex-Catalyzed Asymmetric [3+2] Cycloaddition of α -Substituted Acrylamides // ACS Catalysis. 2021. V. 11. № 9. P. 5100-5107.
2. Кудрявцев К.В. Синтез мостиковых гетероциклов из цис-2,4-замещенных пирролидинкарбоновых кислот. I. 3,6-диазабицикло[3.2.1]октаны // Журнал органической химии. 2010. Т. 46. С. 379-386.
3. 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. Vol. 58. № 9. P. 1719-1737.

© Калязин В.А., Царев Д.С., Безрукова Е.В., Кострюков С.Г., 2025

УДК 547.792.9+547.789.13

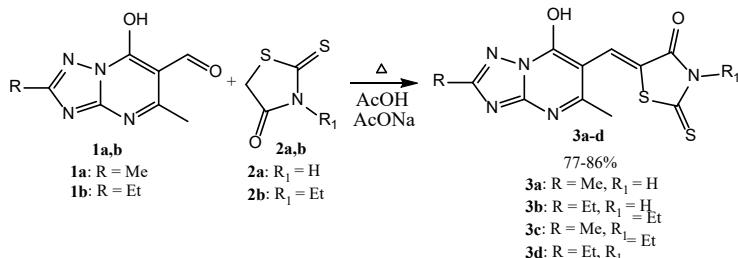
КОНДЕНСАЦИЯ 2-R-[1,2,4]ТРИАЗОЛО[1,5-А]ПИРИМИДИН-6-КАРБАЛЬДЕГИДОВ С 3-R₁-РОДАНИНАМИ

Карелина К.О., Потапов А.Ю., Вандышев Д.Ю., Шихалиев Х.С.
Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

Поиск новых биологически активных соединений является актуальной проблемой современной органической химии. Особое внимание уделяется системам на основе азотсодержащих гетероциклических соединений. Например, повышенный интерес к [1,2,4]триазоло[1,5-а]пиримидинам связан с широким спектром проявляемой биологической активности [1-3] и структурным сходством с пуриновыми основаниями [1, 4].

Несмотря на то, что в литературе представлено множество способов построения и модификации [1,2,4]триазоло[1,5-а]пиримидинового остова [4-7], вопросы, связанные с синтезом новых производных, остаются актуальными. Эффективным способом синтеза новых линеарно связанных и конденсированных систем является взаимодействие карбонильных соединений с С- и N-нуклеофилами различной природы, что открывает широкие возможности для модификации структуры и свойств целевых веществ. Целью настоящей работы являлось изучение реакционной способности 2-R-[1,2,4]триазоло[1,5-а]пиримидин-6-карбальдегидов по отношению к 3-R₁-роданинам.

Исходные 2-R-7-гидрокси-5-метил-[1,2,4]триазоло[1,5-*a*]пиrimидин-6-карбальдегиды **1a,b** получали по методике, описанной в [8, 9]. Конденсацию карбальдегидов **1a,b** с 3-R₁-роданинами **2a,b** проводили в среде ледяной уксусной кислоты и присутствии безводного ацетата натрия. В результате указанных взаимодействий был получен ряд новых 3-R₁-5-((2-R-7-гидрокси-5-метил-[1,2,4]триазоло[1,5-*a*]пиrimидин-6-ил)метилен)-2-тиоксоизолидин-4-онов **3a-d**. Выходы составили 77-86%.



Состав и строение полученных продуктов **3a-d** подтверждены методами ВЭЖХ-МС и ЯМР ¹Н-спектроскопии. Геометрия двойной связи не установлена.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-16-00191, <https://rscf.ru/project/25-16-00191/>.

Литература

1. 1,2,4-Triazolo[1,5-*a*]pyrimidines in drug design / K. Oukoloff [et al.] // Eur. J. Med. Chem. 2019. Vol. 165. P. 332-346.
2. Mohamed A.M. Recent trends in the chemistry of [1,2,4]triazole[1,5-*a*]pyrimidines / A.M. Mohamed, W.A. El-Sayed, A.A. Ibrahim // Org. Prep. Proced. Int. – 2021. Vol. 53, № 3. P. 211-239.
3. Biological activities of [1,2,4]triazolo[1,5-*a*]pyrimidines and analogs / S. Pinheiro [et al.] // Med. Chem. Res. 2020. Vol. 29. P. 1751-1776.
4. Different synthetic methods for the preparation of triazolopyrimidines and their biological profile / A. Hibot [et al.] // ChemistrySelect. 2023. Vol. 8, № 23. e202301654.
5. Nasri S. Strategies for synthesis of 1,2,4 triazole containing scaffolds using 3 amino 1,2,4 triazole / S. Nasri, M. Bayat, K. Kochia // Mol. Divers. 2022. Vol. 26. P. 717-739.
6. Fizer M. Synthesis of [1,2,4]triazolo[1,5-*a*]pyrimidine (microreview) / M. Fizer, M. Slivka // Chem. Heterocycl. Comp. – 2016. – Vol. 52. – P. 155 – 157.
7. Recent synthetic and biological developments on 1,2,4-triazolopyrimidines / P. Kaushik [et al.] // ChemistrySelect. 2023. Vol. 8, № 33. e202301534.
8. Карелина К.О. Формилирование 2-алкил-5-метил-[1,2,4] триазоло[1,5-*a*]пиrimидин-7(4*H*)-онов / К.О. Карелина, И.С. Зотова, А.Ю. Потапов //

Вестн. Воронеж. гос. ун-та. Сер. Химия. Биология. Фармация. 2025. № 2. С. 19-24.

9. Карелина К.О. Применение ВЭЖХ-МС анализа в исследовании формилирования 2-алкил-5-метил-[1,2,4]триазоло[1,5-*a*]пиримидин-7(4*H*)-онов / К.О. Карелина, И.С. Зотова, А.Ю. Потапов // Сорбционные и хроматографические процессы. 2025. Т. 25, № 2. С. 231-239.

© Карелина К.О., Потапов А.Ю., Вандышев Д.Ю., Шихалиев Х.С., 2025

УДК 547.972:578.8.077

СИНТЕЗ АМИНОКИСЛОТНЫХ КОНЬЮГАТОВ

18 β -ГЛИЦИРРЕТИНОВОЙ КИСЛОТЫ СПЕЙСЕРНОГО ТИПА

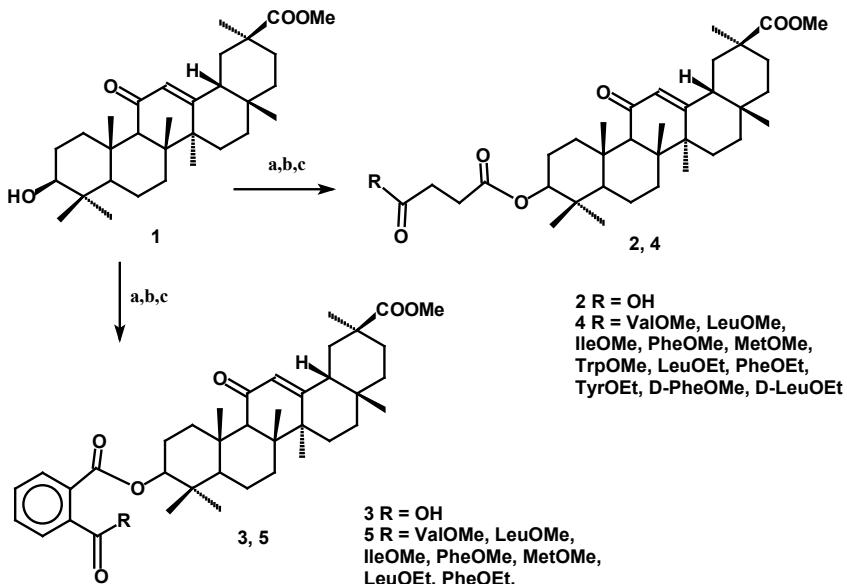
Каримова Э.Р.^{1,2}, Шарафутдинов Р.Р.², Балтина Л.А.¹

¹Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, РФ

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, РФ

18 β -Глицирретиновая кислота (ГЛК) - основной тритерпеноид экстрактов солодкового корня является одним из лидирующих природных пентациклических тритерпеноидов, используемых в качестве скаффолда для синтеза новых биологически активных веществ медицинского назначения [1]. Данная работа посвящена синтезу первой группы аминокислотных коньюгатов 18 β -ГЛК спейсерного типа, содержащих остаток янтарной или фталевой кислот, связанных амидной связью с NH₂-группой метиловых/этиловых эфиров ряда L- и D-аминокислот, с целью оценки их противовирусной активности в отношении аденоовириуса человека 5. В качестве стартовых соединений использовали метиловый эфир 18 β -ГЛК **1**, который превращали в 3-О-гемисукцинат **2** и - гемифталат **3**, которые коньюгировали с эфирами аминокислот с помощью N-гидрокисусукцинидима (HOSu) и N,N'-дициклогексилкарбодииимиды (DCC) в присутствии триэтиламина (Et₃N). Целевые продукты **4** и **5** выделяли колоночной хроматографией с выходами 50-60%.

Оценка противовирусной активности ряда коньюгатов **4** в Санкт-Петербургском НИИ эпидемиологии и микробиологии им. Пастера показала, что введение аминокислотных остатков в молекулу тритерпеноида **2** оказывает существенное влияние на цитотоксичность и противовирусную активность полученных соединений. Коньюгат 3-О-гемисукцинат ГЛК с LeuOMe показал выраженное противовирусное действие в отношении аденоовириуса человека 5 типа.



Реагенты и условия: а) янтарный или фталевый ангидрид, DMAP, CH_2Cl_2 , кипячение, 6–8 ч; б) HOSu/DCC , THF, Et_3N , 20–22°C;
в) $\text{RNH}_2 \cdot \text{HCl}$, Et_3N , THF, 20–22°C

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект № 24-23-00363.

Литература

1. Chen L., Gong J., Yong X., Li Y., Wang Sh. A review of typical biological activities of glycyrrhetic acid and its derivatives // RSC Adv., 2024, 14, 6557-6597.

© Каримова Э.Р., Шарафутдинов Р.Р., Балтина Л.А., 2025

УДК 547.327:546.98

АМИДЫ 2,5-ПИРАЗИНДИКАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ В СИНТЕЗЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ПИНЦЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ Pd(II)

Катранова А.Ю.^{1,2}, Алексанян Д.В.

¹Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмиянова РАН,
Москва, Россия

²Российский химико-технологический университет им. Д.И. Менделеева,
Москва, Россия

Комплексы переходных металлов представляют особый интерес с точки зрения возможности разработки новых лекарственных препаратов, в частности, потенциальных противоопухолевых средств. Перспективным классом цитотоксических агентов являются

неклассические комплексы палладия(II) на основе функционально замещенных амидов карбоновых кислот [1]. Тридентатный моноанионный каркас функционализированных карбоксамидов способен обеспечить высокую термодинамическую стабильность и контролируемую кинетическую лабильность подобных металлокомплексов, что является ключом к достижению высокой биологической активности.

Ранее нами было показано, что пинцерные комплексы Pd(II) на основе тиофосфорилзамещенных пиколинамидов проявляют выраженные цитотоксические свойства [2]. Для оценки влияния строения лигандного каркаса на биологическую активность комплексов пинцерного типа важной задачей является варьирование природы кислотной компоненты, например, замена пиколиновой кислоты на моно- и дикарбоновые кислоты с другими N-гетероциклическими фрагментами. В настоящее время одной из перспективных стратегий в области разработки новых потенциальных металлодержащих химиопрепараторов является объединение двух атомов металла в одной молекуле с целью получения биядерных структур. Биметаллические комплексы интересны с точки зрения возможности сшивки одновременно нескольких пар оснований ДНК, что может приводить к менее заметным для системы репарации конформационным изменениям биомолекулы по сравнению с действием моноядерных частиц.

С целью расширения ряда неклассических пинцерных производных на основе тиофосфорилированных карбоксамидов в данной работе были получены P(S)-замещенные моно- и бис(амиды) пиразин-2,5-дикарбоновой кислоты (Схема 1). В качестве аминокомпоненты в синтезе целевых амидных лигандов были использованы β -(аминоалкил)замещенные фосфинсульфиды. Конденсация ключевых аминов с пиразин-2,5-дикарбоновой кислотой была легко осуществлена в присутствии изобутилхлорформиата. Полученные соединения гладко подвергались прямому циклопалладированию в мягких условиях, приводя к целевым комплексам Pd(II) пинцерного типа с высокими выходами.

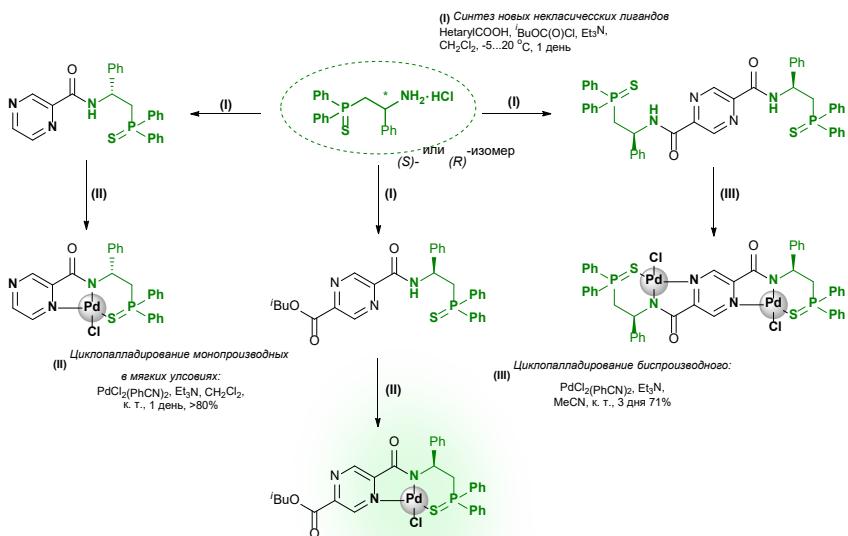


Схема 1. Синтез моно- и бис(амидов) пиразин-2,5-дикарбоновой кислоты и пинцерных комплексов Pd(II) на их основе

При исследовании цитотоксических свойств полученных металлокомплексов было обнаружено, что биметаллическое производное нетоксично даже при достаточно высокой концентрации (40 мКМ). В то же время, его моноядерные аналоги проявили высокую цитотоксическую активность на клетках различных опухолевых линий, включая рак толстой кишки, рак простаты, хронический миелогенный лейкоз и др. Наиболее активный комплекс Pd(II) показал выраженную эффективность в отношении клеток гемобластозов (значения IC₅₀, концентрации полумаксимального ингибирования, достигали низкого микромолярного диапазона: 1.6–2.8 мКМ), значительно превосходя по активности эталон – цисплатин.

Литература

- Wu S. et al. Antitumor activity of tridentate pincer and related metal complexes // Organic & Biomolecular Chemistry. 2021. Т. 19. №. 24. С. 5254-5273.
- Kalashnikova A.A. et al. Palladium (II) pincer complexes of N-(thiophosphorylalkyl) picolinamides: effect of the length of the P (V)-pendant arm on the cytotoxic activity //Mendeleev Communications. 2025. Т. 35 №. 6. С. 654-656.

© Катранова А.Ю., Алексанян Д.В., 2025

СИНТЕЗ И ХОЛИНЭСТЕРАЗНАЯ АКТИВНОСТЬ
ДИЭТОКСИФОСФОРИЛ-ПРОИЗВОДНОГО
2,3-ИНДОЛО-ОЛЕАНОЛОВОЙ КИСЛОТЫ

Керимова А.В.

Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Синтетические подход, включающий введение в исходные молекулы фосфатной или фосфонатной группы, склонной к гидролизу, часто приводит к повышению биоактивности за счёт более эффективного преодоления биологических барьеров и мембран, и представляет собой одну из современных концепций пролекарств. Известны примеры применения данного подхода в синтезе тритерпеновых производных, проявляющих противораковые и противовирусные свойства. Так, введение фосфонатной группы в молекулу бетулина привело к образованию 29-диэтоксифосфорил-производного с IC_{50} 0.27 μM в отношении клеток глиобластомы линии SNB-19. В то же время данные об ингибирующей ферменты группы холинэстераз способности фосфорилокси-тритерпеноидов лимитированы, в связи с этим синтез ряда соединений и оценка их активности является актуальной задачей. В данной работе представлен синтез производного индоло-олеаноловой кислоты, содержащий заместитель с атомом фосфора. Целевое диэтоксифосфорил-производное **3** получали с выходом 85% первоначальным восстановлением 2,3-индоло-олеаноловой кислоты **1** до 2,3-индоло-эрритродиола **2**, и его последующей этерификацией диэтилхлорфосфатом в присутствии ДМАП в пиридине (Схема). В спектрах ЯМР ^1H и ^{13}C полученного производного **3**, сигналы протонов и атомов углерода этоксильной группы резонировали в области δ_{H} 4.10–4.17 м.д., δ_{C} 63.62 и 63.66 м.д., соответственно.

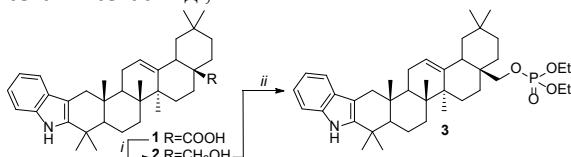


Схема 1.

Реагенты и условия: *i*. LiAlH_4 , THF, Δ ; *ii*. $(\text{EtO})_2\text{POCl}$, ДМАП, Py, 0°C

Соединение **3** было протестирано на способность ингибировать активность рекомбинантной человеческой ацетилхолинэстеразы и человеческой бутирилхолинэстеразы плазмы крови *in vitro* по методу Эллмана. Введение диэтоксифосфорильной группы привело к умеренному ингибированию ацетилхолинэстеразы со значением IC_{50} 35.9 μM , в то время как в отношении бутирилхолинэстеразы соединение было малоактивно (IC_{50} 64.3 μM).

© Керимова А.В., 2025

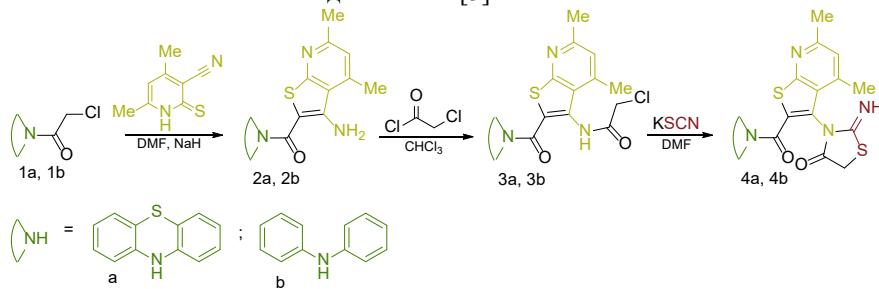
УДК 547.834.22:547.869.53

СИНТЕЗ НОВЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ ИЗ Н-
(ХЛОРАЦЕТИЛ)ПРОИЗВОДНЫХ ФЕНОТИАЗИНА И
ДИФЕНИЛАМИНА

Киндоп Вл.К., Дисюк В.А., Киндоп В.К., Доценко В.В., Беспалов А.В.
Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия

Стратегия объединения ключевых структурных элементов фенотиазина, тиено[2,3-*b*]пиридинов и α -роданоамидных соединений в одной молекуле является перспективным направлением для модификации структур. Этот подход позволяет создать новые соединения с улучшенными фармакологическими характеристиками, что особенно актуально, учитывая широкий спектр биологической активности производных фенотиазина [1] и значительный терапевтический потенциал тиенопиридинов [2].

В результате последовательного синтеза были получены целевые иминотиазолидиноны **4a,b**. Из исходных фенотиазина и дифениламина вначале были получены хлорацетамиды **1a,b**, которые затем использованы для синтеза тиено[2,3-*b*]пиридинов **2a,b**. Последовательным действием хлорацетилхлоридом и роданидом калия были получены конечные продукты **4a,b**. Важно отметить, что промежуточные амида **3a,b** являются перспективными соединениями для изучения в качестве гербицидов ввиду их структурного сходства с описанными активными соединениями [3].



Строение всех соединений подтверждено данными спектральных исследований (ИК, ЯМР). Строение исходных хлорацетамидов **1a,b** доказано данными рентгеноструктурного анализа. Свойства и фармакологический потенциал продуктов **4a** и **4b** подлежат дальнейшему изучению.

Литература

- Recent progress in biological activities of synthesized phenothiazines / K. Pluta, B. Morak-Młodawska, M. Jeleń // Eur. J. Med. Chem. 2011. V. 46. P. 3179.

2. Litvinov V.P., Dotsenko V.V., Krivokolysko S.G. Thienopyridines: synthesis, properties, and biological activity // Russ Chem Bull. 2005. V. 54. P. 864.

3. Couderchet M., Bocion P.F., Chollet R., Seckinger K., Böger P. Biological Activity of Two Stereoisomers of the N-Thienyl Chloroacetamide Herbicide Dimethenamid // Pesticide Science. 1997. V. 50(3). P. 221.

© Киндоп Вл.К., Дисюк В.А.,

Киндоп В.К., Доценко В.В., Беспалов А.В., 2025

УДК 547-311

ТРАНСФОРМАЦИЯ МЕТИЛЕНОВОЙ ГРУППЫ ПРОИЗВОДНЫХ
10-УНДЕЦЕНОВОЙ КИСЛОТЫ ВО ВТОРИЧНЫЕ СПИРТЫ
РЕАКЦИЕЙ ЭПОКСИДИРОВАНИЯ И ГИДРИДНОГО
ВОССАНОВЛЕНИЯ

Коваленко А.А.¹, Праздничных Р.В.², Выдрина В.А.¹,
Яковleva M.P.¹, Ишмуратов Г.Ю.¹

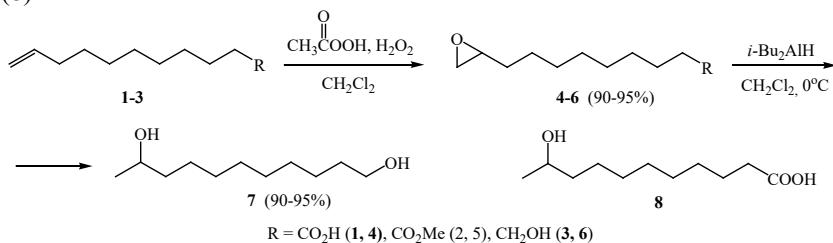
¹Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

²Бирский филиал, Уфимский университет науки и технологий,
Бирск, Россия

Реакция окисления ациклических и циклических алканов надкислотами, приводящая к образованию эпоксидов (оксиранов), открытая российским органиком Н.А. Прилежаевым, в настоящее время широко применяется для синтеза оксиранов и продуктов их перегруппировок.

В качестве субстрата для окисления нами использован продукт деструктивной дистилляции касторового масла, выделяемого из семян клещевины обыкновенной *Ricinus communis* – 10-унденовая кислота (**1**), находит все более широкое применение в органическом синтезе.

Окисление 10-унденовой кислоты (**1**), ее метилового эфира (**2**) и 10-унденен-1-ола (**3**) раствором НУК-15, экстрагированном в сухой CH₂Cl₂, взятым в молярном соотношении 1:5, были получены соответствующие эпоксиды (**4-6**), гидридное восстановление которых дизибутилалюминийгидридом в хлористом метилене при 0°C приводит к образованию ундеан-1,10-диола (**7**), даже в случае эпоксикислоты (**4**) когда ожидаемым продуктом была 10-гидрокси-1-ундекановая кислота (**8**).



Литература

1. Яковлева М.П., Коваленко А.А., Выдрина В.А. // Химия природных соединений. 2025. № 1. С. 194-195.

© Коваленко А.А., Праздничных Р.В.,
Выдрина В.А., Яковлева М.П., Ишмуратов Г.Ю., 2025

УДК 547-311

ОКИСЛЕНИЕ α -ПИНЕНА ПРОМЫШЛЕННО ДОСТУПНЫМ ПРЕПАРАТОМ НУК-15

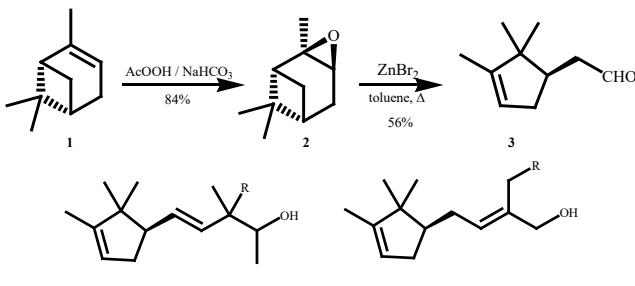
Коваленко А.А.¹, Мухачев К.Е.², Выдрина В.А.¹,
Яковлева М.П.¹, Ишмуратов Г.Ю.¹

¹Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

²Бирский филиал, Уфимский университет науки и технологий,
Бирск, Россия

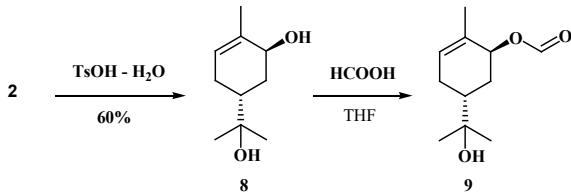
Одним из широко используемых методов получения терпеновых эпоксидов является реакция Прилежаева. Нами предлагается новый реагент для этой реакции – Арбидиц НУК-15, выпускаемый ООО «Ижевский завод моющих средств». Он является раствором 15%-ной надуксусной кислоты (НУК) и 20%-ной H_2O_2 в воде и широко используется как дезинфицирующее средство для обработки тушек кур и товарного яйца.

Так, при окислении α -пинена (**1**) – основного компонента живицы сосен *Pinus*, НУК в присутствии $NaHCO_3$ в CH_2Cl_2 образовался эпоксид (**2**) с хорошей диастереоселективностью. Однако в условиях реакции происходила частичная (до 10%) перегруппировка образовавшегося α -пиненоксида (**2**) в камфореновый альдегид (**3**), выделенный вакуумной перегонкой. Довести реакцию образования камфоренового альдегида (**3**) до конца удалось кипячением α -пиненоксида (**2**) с кислотой Льюиса ($ZnBr_2$) в толуоле. Полученный альдегид (**3**) является полупродуктом в синтезе соединений (**4-7**) – отдушек, обладающих запахом сандалового дерева.



Обработка эпоксида (**2**) $TsOH$ при комнатной температуре приводит к раскрытию малого цикла и образованию непредельного диола (**8**),

формиат (**9**) которого проявляет репеллентную активность сходную с N,N-диэтил-мета-толуамидом (ДЭТА) по отношению к комарам.



© Коваленко А.А., Мухачев К.Е.,
Выдрина В.А., Яковлева М.П., Ишмуратов Г.Ю., 2025

УДК 547.814.5

ТРЁХКОМПОНЕНТНЫЙ СИНТЕЗ ПОЛИЗАМЕЩЁННЫХ СПИРОИНДОЛИНОПИРРОЛИЗИДИНКАРБОНИТРИЛОВ И СПИРОИНДОЛИНОПИРРОЛИЗИДИНОНОВ

Кочуков А.С.¹, Сорокин В.В.¹, Давыдов Н.И.¹, Плотников Н.А.¹,
Возягин Д.П.¹, Оприщенко Н.В.¹, Борисова С.В.², Семченко О.Н.²

¹Саратовский государственный университет, Саратов, Россия

²Саратовский государственный медицинский университет
им. В.И. Разумовского, Саратов, Россия

Полизамещённые спиропирролизидины обладают широким спектром биологической активности, что ранее подтверждалось нами *in vitro* для схожих рассматриваемых структур [1]. Реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения представляют интерес в современном органическом синтезе, так как позволяют получить сложнопостроенные гетероциклические соединения за счёт высокой регио- и стереоселективности процесса.

Новые спироиндолинопирролизидины **1a-c**, **2** синтезированы путём 1,3-диполярного циклоприсоединения азометин-илида на основе изатина и L-пролина, получаемого *in situ*, с бензилиденовыми диполярофилами различной структуры, в продолжение исследований одностадийных процессов [2].

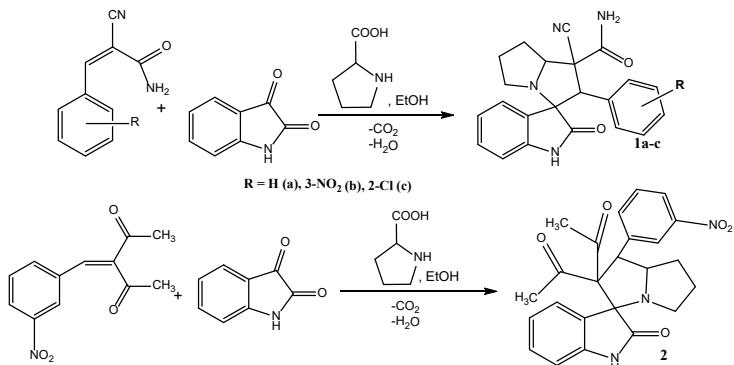


Рис. 1. Одностадийный синтез спироиндolinопирролизидинов

Осуществлённые реакции проявляют определённую региоселективность, в зависимости от природы исходного диполярофила. Выводы о протекании превращений сделаны на основании спектральных исследований продуктов реакций.

Литература

- Пат. 2835552 Российская Федерация. 2-оксо-2'-фенил-5',6',7',7а'-тетрагидроспиро[индолин-3,3'-пирролизин]-1',1'(2'Н)-дикарбонитрил, обладающий антимикробными свойствами / С.В. Борисова, Е.А. Константинова, А.А. Мещерякова, Г.Л. Бурыгин, В.В. Сорокин. Заявка № 2024120874 от 24.07.2024; опубл. 27.02.2025, Бюл. № 6.
- Borisova, S. V. Interconversions of 1,3-dipolar cycloaddition products of azomethine ylides and ylidene malononitriles. / S.V. Borisova, A.A. Meshcheryakova, V. V. Sorokin // Journal of General Chemistry. 2024. Vol. 94, No. 4. P. 489-502.

© Кочуков А.С., Сорокин В.В., Давыдов Н.И., Плотников Н.А., Возягин Д.П., Оприщенко Н.В., Борисова С.В., Семченко О.Н., 2025

УДК 547.822.1:547.551.1: 547.552.1: 547.552.2

СИНТЕЗ 1,2,3,4-ТЕТРАГИДРОПИРИДИНОВ НА ОСНОВЕ 3-[*(2*-ПРОПИЛСУЛЬФАНИЛ)*МЕТИЛ]ПЕНТАН-2,4-ДИОНА И АНИЛИНОВ*

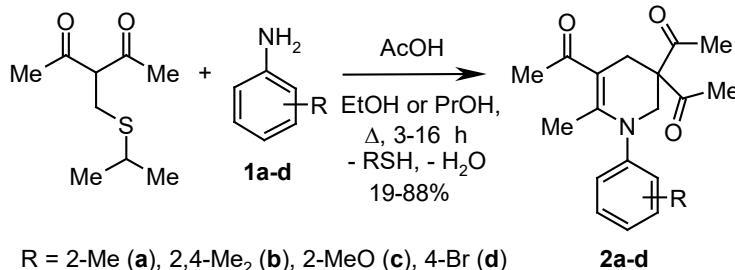
Кузнецова А.Н., Нугуманов Р.М., Баева Л.А.

Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Тетрагидропиридиновый цикл входит в структуру известных пищевых красителей, лекарственных препаратов, а также природных и биологически активных веществ с широким спектром действия. Поэтому синтез новых функционализированных тетрагидропиридинов представляет актуальную задачу.

Ранее нами показано, что 3-[(алкилсульфанил)метил]пентан-2,4-дионы могут выступать источниками метилиденовой компоненты и в реакции с анилином образуют 1,1',1''-(6-метил-1-фенил-1,2,3,4-тетрагидропиридин-3,3,5-триил)триэтанон [1]. Целью данной работы является синтез новых тетрагидропиридинов вовлечением в аналогичную реакцию других ароматических аминов.

Установлено, что 3-[(2-пропилсульфанил)метил]пентан-2,4-дион взаимодействует с замещенными анилинами **1a-d** при кипячении в EtOH или PrOH в присутствии каталитических количеств AcOH в течение 3–16 ч с образованием 1,1,1-(6-метил-1-арил-1,2,3,4-тетрагидропиридин-3,3,5-триил)триэтанонов **2a-d** с выходами 19–88%.



Реакционная способность замещенных анилинов при переходе от электронодонорных к электроноакцепторным заместителям уменьшается в ряду: 2,4-Me₂-C₆H₃NH₂ > 2-Me- > 2-MeO-C₆H₄NH₂ > 4-Br-C₆H₄NH₂. Выход соединений **2a–d**, полученных в одинаковых условиях (кипячение в EtOH в присутствии катализитических количеств AcOH в течение 3ч), составляет 88 % (**2b**), 73 % (**2a**), 69 % (**2c**), 5 % (**2d**) соответственно. При использовании малореакционного 4-броманилина **1d** 19% выход целевого продукта **2d** достигается при длительном нагреве в высококипящем растворителе (пропаноле).

Литература

1. Baeva L.A., Gataullin R.R., Nugumanov R.M. *Chem. Heterocycl. Compd.* 2024, 60, 107.

© Кузнецова А.Н., Нугуманов Р.М., Баева Л.А., 2025

УДК 547.772:547.442.3:54.732

СИНТЕЗ 4-[(АЛКИСУЛЬФАНИЛ)МЕТИЛ]-1Н-ПИРАЗОЛОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ МИКРОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Кузнецова А.Н., Нугуманов Р.М., Баева Л.А.

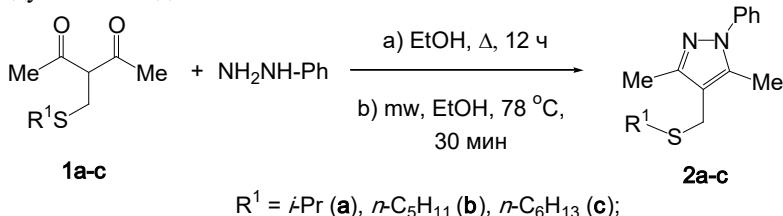
Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Замещенные пиразолы входят в состав лекарственных препаратов и биологически активных веществ. Функционализированные пиразолы, в том числе содержащие алкил(арил)сульфанильные заместители,

проявляют противовоспалительные [1], противоопухолевые [2] и антибактериальные свойства [3]. В сельском хозяйстве применяется гербицид и системный пестицид из группы [алкил(арил)сульфонил(сульфинил)]замещенных пиразолов – топрамезон, инсектицид – этипрол. Исследуются свойства 4-[(гексилсуль-фенил)метил]-1*H*-пиразолов, эффективно экстрагирующие Pd(II) [4].

Известный способ получения 1*H*-пиразолов основан на взаимодействии 1,3-дикарбонильных соединений с гидразинами. В настоящее время разрабатываются экологичные методы получения пиразолов – без органических растворителей и катализаторов, в условиях микроволнового нагрева. Целью работы является разработка синтеза серосодержащих 1*H*-пиразолов взаимодействием доступных 3-[(алкилсульфанил)метил]пентан-2,4-дионов с фенилгидразином в условиях микроволновой активации.

Взаимодействие 3-[(алкилсульфанил)метил]пентан-2,4-дионов (**1a–c**) с эквимолекулярным количеством гидрохлорида фенилгидразина в кипящем этаноле в течение 12 ч приводит к соответствующим 1*H*-пиразолам (**2a–c**) с выходами 79–88%. При микроволновом нагреве в этаноле гетероциклизация завершается за 30 мин, а выходы целевых продуктов **2a–c** достигают 93–96%.



Литература

1. Khan M.F., Alam M.M., Verma G., Akhtar W., Akhter M., Shaquizzaman M. // Eur. J. Med. Chem. 2016. Vol. 120. P. 170.
2. Becerra D., Abonia R., Castilllo J.-C. // Molecules. 2022. Vol. 27. P. 4723.
3. Karrouchi K., Radi S., Ramli Y., Taoufik J., Mabkhot Y.N., Al-aizari F.A., Ansar M. // Molecules. 2018. Vol. 23. P. 134.
4. Anpilogova G.R., Baeva L.A., Nugumanov R.M. // Russ. J. Gen. Chem. 2023. Vol. 93. P. 1115.

© Кузнецова А.Н., Нугуманов Р.М., Баева Л.А., 2025

СИНТЕЗ 4-[*(2-ПРОПИЛСУЛЬФАНИЛ)МЕТИЛ*]-5-ФЕНИЛ-3-
 (ТРИФТОРМЕТИЛ)-1*H*-ПИРАЗОЛОВ НА ОСНОВЕ
 1-ФЕНИЛ-4,4,4-ТРИФТОРБУТАН-1,3-ДИОНА

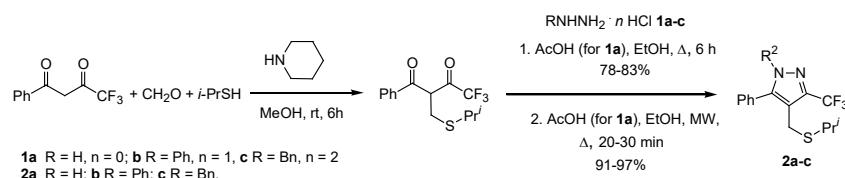
Кузнецова А.Н., Бикташева Л.Ф., Баева Л.А.

Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Интерес к функционализированным пиразолам обусловлен их широким применением в медицине и сельском хозяйстве. Пиразольный цикл входит в состав большого числа синтетических соединений, обладающих противоопухолевой [1], противовоспалительной [1], анальгетической [2], фунгицидной [3] и гербицидной активностью [4].

Целью настоящей работы является синтез новых функционализированных 1*H*-пиразолов, сочетающих в себе трифторметильные и алкилсульфанилметильные заместители. Поставленная цель достигается взаимодействием гидразинов с 2-[*(2-пропилсульфанил)метил*]-1-фенил-4,4,4-трифторморбутан-1,3-дионом, получаемым трехкомпонентной конденсацией 1-фенил-4,4,4-трифторморбутан-1,3-диона с формальдегидом и 2-пропантиолом.

(2-Пропилсульфанилметил)замещенный бутан-1,3-дион реагируют с 1.4 экв. гидразингидрата (**1a**), фенилгидразина гидрохлорида (**1b**) и бензилигидразина дихлорида (**1c**) в кипящем этаноле в течение 6 ч с образованием соответствующих 4-[*(2-пропилсульфанил)метил*]-1*H*-пиразолов **2a–c** с выходами 78–83%. Проведение синтеза в условиях микроволновой активации позволяет сократить продолжительность реакции в 18 раз и повысить выходы 1*H*-пиразолов **2a–c** до 91–97%.



Литература

- Kerru N., Gummidi L., Maddila S., Gangu K.K., Jonnalagadda S.B. // Molecules. – 2020. – Vol. 25. – P. 1909.
- Kumar M., Panday S.K. // Orient. J. Chem. – 2022. – Vol. 38. – P. 568.
- Sharma T., Singh J., Singh B., Kataria R., Kumar V. // Med. Chem. – 2022. – Vol. – 22. – P. 770.
- Ramadan M., Aly A.A., El-Haleem L.E.A., Alshammary M.B., Bräse S. // Molecules. – 2021. – Vol. 26. – P. 4995.

© Кузнецова А.Н., Бикташева Л.Ф., Баева Л.А., 2025

УДК 547.831.3

СИНТЕЗ НОВЫХ ЗАМЕЩЁННЫХ СПИРО[ПИРРОЛО[3,2,1-*ij*]ХИНОЛИН-1,2'-[1,3,4]ТИАДИАЗОЛ]-2-ОНОВ С ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ПРОТИВОРАКОВОЙ АКТИВНОСТЬЮ

Лаптев Д.Д., Медведева С.М., Шихалиев Х.С.

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

Спирогетероциклические системы на основе замещенных пирроло[3,2,1-*ij*]хинолин-1,2-дионов обладают весьма полезными свойствами, среди которых – ярко выраженная антикоагулянтная активность [1-2]. Поэтому получение новых спироциклических соединений на данной матрице является актуальной и практически значимой задачей, решение которой поможет найти новые высокоэффективные лекарственные препараты. До настоящего времени спиропирролохинолины синтезировались только в результате межмолекулярных реакций конденсации, в том числе и многокомпонентных. Вследствие этого возник интерес к разработке способа получения спиропродуктов путем внутримолекулярной реакции функционально замещенных пирроло[3,2,1-*ij*]хинолинов.

Целью данной работы был синтез новых замещённых спиро[пирроло[3,2,1-*ij*]хинолин-1,2'-[1,3,4]тиадиазол]-2-онов, внутримолекулярной спироциклизацией тиосемикарбазонов пирролохинолинов **1a-f**, **1'g-h**, модификация полученного спироцикла и скрининг *in silico* биологической активности новых соединений.

Нами была синтезирована и охарактеризована методами ВЭЖХ-МС и ЯМР ^1H новая структура 8-R 1 -9-R 2 -3'-ацетил-5'-ацетиламид-4,4,6-триметил-4*H*-спиро[пирроло[3,2,1-*ij*]хинолин-1,2'-[1,2,4]тиадиазол]-2-он **2a-f**, **2'g-h**. Для полученной структуры была исследована возможность деацилирования, в результате чего получены новые производные – 8-R 1 -9-R 2 -3'-ацетил-5'-амино-4,4,6-триметил-4*H*-спиро[пирроло[3,2,1-*ij*]хинолин-1,2'-[1,2,4]тиадиазол]-2-оны **3a-f**, **3'g-h**. Схема синтеза представлена на рис.1.

Проведённый скрининг с помощью программы PASSOnline (way2drug.com>PassOnline) показал высокую вероятность проявления ($\text{Pa} > 0,8$) с незначительной вероятностью непроявления ($\text{Pi} \ll \text{Pa}$) антимитотической и противоопухолевой активности данных соединений, что делает необходимым продолжить исследования в подтверждении данной активности на живых клетках. При этом вероятность проявления токсичности в виде синдрома Свита и гигантоклеточного миокардита довольно низка ($\text{Pa} = 0,35$). Таким образом, синтезированные соединения имеют потенциал в разработке на их основе противораковых препаратов.

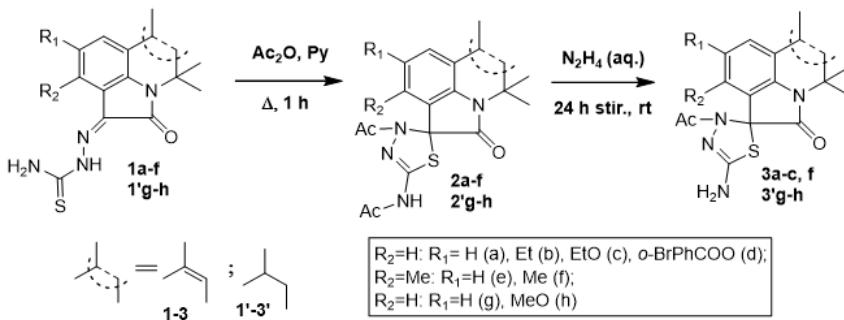


Рис. 1. Схема синтеза спироциклических тиадиазоловых фрагментов **2a-f; 2'g-h** и **3a-c, f; 3'g-h** на матрице пирроло[3,2,1-ij]хинолин-2-онов

Литература

1. Tashchilova, A., Podoplelova, N., Medvedeva, S., [et. al.] New blood coagulation factor XIIa inhibitors: molecular modeling, synthesis, and experimental confirmation // *Molecules*. – 2022. – V. 27. – P. 1234.
2. Новичихина Н.П., Скопцова А.А., Потапов А.Ю. (и др.) Синтез и антикоагулянтная активность новых этилиденовых и спиропроизводных пирроло[3,2,1-ij]хинолин-2-онов // Журнал органической химии. – 2020. – Т. 56. № 9. – С. 1376-1384.

© Лаптеев Д.Д., Медведева С.М., Шихалиев Х.С., 2025

УДК 547.281.1, 547.665

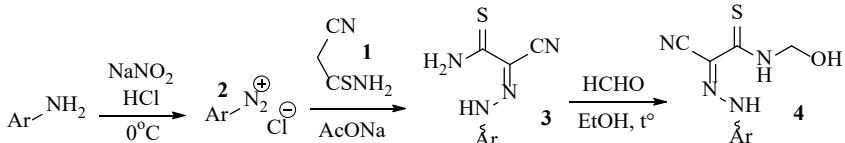
РЕАКЦИЯ ОКСИМЕТИЛИРОВАНИЯ В РЯДУ ПРОИЗВОДНЫХ 2-АМИНО-N-(ФЕНИЛ)-2-ТИОКСОАЦЕТОГИДРАЗОНИЛЦИАНИДА

Левченко А.Г., Решетникова А.А., Дахно П.Г., Доценко В.В.

ФГБОУ ВО Кубанский государственный университет, Краснодар,
Россия

В основе лежит описанная ранее реакция оксиметилирования производных цианотиоацетамида [1]. Для этого цианотиоацетамид 1 вводился в реакцию с солью диазония 2, в результате были получены соединения 3, согласно спектральным данным, соотношение изомеров составило 2:9 Z:E формы. Далее полученные соединения вступали в реакцию с 37%-м раствором HCHO, что позволило получить итоговые продукты 4 (схема 1). Выход реакции составил 75-80%. Строение полученных соединений 3 и 4 были подтверждены данными ИК и ¹H/¹³C спектроскопией

Схема 1



$\text{Ar} = 4\text{-BrC}_6\text{H}_4$ (4a), $4\text{-IC}_6\text{H}_4$ (4b), $2,4,6\text{-Br}_3\text{C}_6\text{H}_2$ (4c), C_6H_5 (4d)

Изучение соединений 4 мотивировано поиском новых биологических свойств N-(гидроксиметил)тиоамидов. Известно, что наличие в молекуле гидроксиметильного и тиоамидного фрагментов наделяет соединения широким спектром активности, такой как антибактериальная, антилепрозная, противоопухолевая и противотуберкулезная [2]. Для первичной оценки свойств соединений 4 была использована программа Pass Online. Сервис прогнозирует возможность лечения сердечной недостаточности (55,8%), противогрибковые свойства (43,9%), ингибитор реакции Майяра (60%). Отрицательным эффектом можно назвать возникновение анемии (71%), спленомегалии (59%) и угревидной сыпи (53%).

Литература

1. Dotsenko V.V., Frolov K.A., Krivokolysko S. G., Chernega A.N., & Litvinov V.P. Convenient Mannich-Type One-Pot Synthesis of Pyrimido[6,1-b][1,3,5]thiadiazines. – Chemical Monthly. – 2006. – Vol. 137. № 8. – P. 1089-1098.
2. Доценко В.В., Чигорина Е.А., Кривоколыско С.Г. N-гидроксиметилирование 3-арил-2-цианопроп-2-ентиоамидов – Журнал общей химии. – 2020. – Т. 90. № 8. – С. 1199- 1206.

© Левченко А.Г., Решетникова А.А., Дахно П.Г., Доценко В.В., 2025

УДК 54.547.853.3

2-(ХЛОРМЕТИЛ)ПИРИДО[3',2':4,5]ТИЕНО[3,2-D]ПИРИМИДИН-4(3Н)-ОНЫ КАК АЛКИЛИРУЮЩИЕ РЕАГЕНТЫ ДЛЯ СИНТЕЗА ТИЕНО[2,3-В]ПИРИДИНОВ

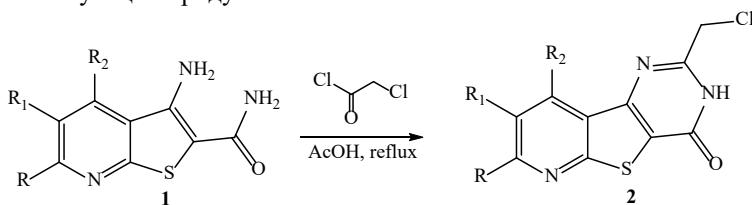
Д.Ю. Маркелевич, В.В. Доценко

Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия

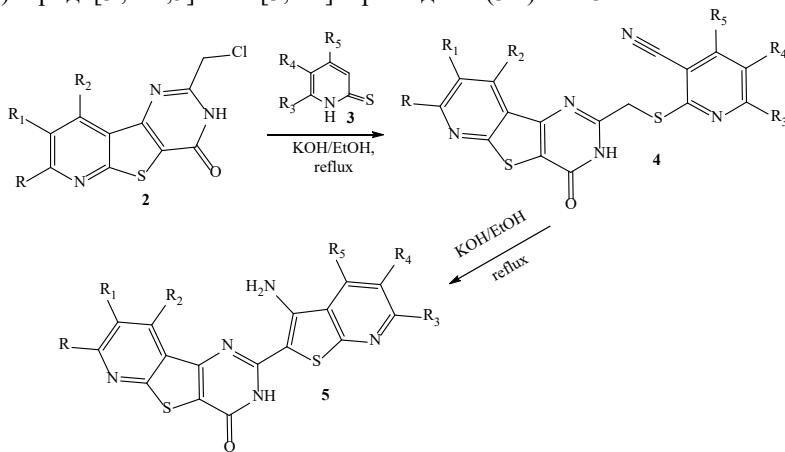
Обработкой 3-аминотиено[2,3-b]пиридин-2-карбоксамида **1** хлорацетилхлоридом в уксусной кислоте или в толуоле при кипячении возможно получать производные пиридо[3',2':4,5]тиено[3,2-d]пириимида, а именно 2-(хлорметил)пиридо[3',2':4,5]тиено[3,2-d]пириимидин-4(3Н)-оны **2** [1].

Такие соединения, ввиду наличия хлорметильной группы, возможно применять как алкилирующие агенты, в частности, с их помощью,

алкилирование 3-цианопиридин-(1Н)-тионов **3** ведёт к образованию соответствующих продуктов.



Так, взаимодействие 2-(хлорметил)пиридо[3',2':4,5]тиено[3,2-d]пиридин-4(3Н)-она **2** и 3-цианопиридин-(1Н)-тиона **3** в присутствии одного эквивалента этанольного раствора гидроксида калия приводит к образованию продукта алкилирования - 2-(((4-оксо-3,4-дигидропиридо[3',2':4,5]тиено[3,2-d]пиридин-2-ил)метил)тио)никотинонитрила **4**, а в случае применения второго эквивалента спиртового раствора гидроксида калия происходит образование 2-(3-аминотиено[2,3-b]пиридин-2-ил)пиридо[3',2':4,5]тиено[3,2-d]пиридин-4(3Н)-она **5**.



Кроме того, нами было изучено антидотное действие соединений **2**, **4**, **5** по отношению к гербициду 2,4-Д, а также рострегулирующие действие соединений **2**, **4**, **5** на проростках подсолнечника сорта Лакомка.

Было установлено, что испытанные соединения обладают слабым антидотным действием, по отношению к гербициду 2,4-Д и умеренным рострегулирующим действием.

Предикторная оценка биологической активности (онлайн-сервис galaxy web sagittarius) показала сродство соединений **2**, **4**, **5** к широкому кругу белков и ферментов.

Литература

1. Shaw, R. Recent advancements in the synthesis of fused thienopyridines and their therapeutic applications / R. Shaw , R. Tewari, M. Yadav, E. Pandey, K Tripathi, J. Rani, I. Althagafi, R. Pratap // European Journal of Medicinal Chemistry Reports. – 2004. – V. 12. – P. 100185.

© Маркелевич Д.Ю., Доценко В.В., 2025

УДК 546.185 + 547.787.1

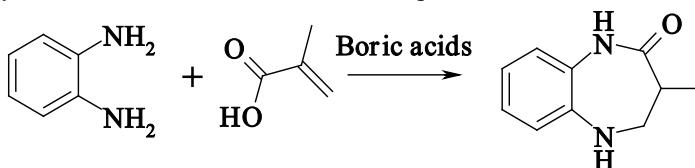
КОНДЕНСАЦИЯ 1,2-ФЕНИЛЕНДИАМИНА С МЕТАКРИЛОВОЙ КИСЛОТОЙ

Махунова А.В., Баевский М.Ю., Чупахина Т.А

Крымский Федеральный университет им. В.Вернадского

Институт биотехнологии, экологии и фармации. Симферополь, Россия

Синтез производных 2,3,4,5-тетрагидро-1*H*-1,5-бензодиазепин-2-она представляет интерес в связи с тем, что среди его производных выявлены соединения, проявляющие транквилизирующую и анальгезирующую активность [1]. В статье Пуджюнайте Б. А [2] была описана реакция конденсации 1,2-фениллендиамина с метакриловой кислотой в отсутствии растворителя и конденсирующих агентов с выходом целевого продукта 23%. С целью повышения выхода целевого продукта и определения оптимальных условий синтеза была изучена реакция конденсации 1,2-фениллендиамина с метакриловой кислотой в присутствии борных кислот в различных условиях. Контроль за ходом реакции осуществляли по объему выделившейся в насадке Дина-Старка воды.



Полученные результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1

Выход 3-метил-2,3,4,5-тетрагидро-1*H*-1,5-бензодиазепин-2-она в зависимости от реакционных условий

| № | Растворитель, условия | T °C | Время час | Конденс. агент | Выход | |
|---|--------------------------|---------|--------------|--------------------------------|-------|------|
| | | | | | г. | % |
| 1 | Бензол* | 80 | 18 | H ₃ BO ₃ | 15,5 | 45,3 |
| 2 | Толуол* | 110 | 3 | H ₃ BO ₃ | 25,2 | 71,7 |
| 3 | Толуол* | 110 | 2 | HBO ₂ | 27,2 | 77,4 |
| 4 | Ксиолол* | 140 | 3 | H ₃ BO ₃ | 24,1 | 68,4 |
| 5 | Ксиолол* | 140 | 2 | HBO ₂ | 25,7 | 73,3 |

Окончание табл. 1

| | | | | | | |
|----|-------------|-----|-----|-------------------------|-----|------|
| 6 | Сплавление* | 140 | 2 | H_3BO_3 | 8,1 | 23 |
| 7 | MW** | 140 | 0,5 | H_3BO_3 | 2,5 | 68 |
| 8 | MW** | 200 | 0,5 | H_3BO_3 | 2,7 | 71,1 |
| 9 | MW** | 140 | 1 | HBO_2 | 2,9 | 75,6 |
| 10 | MW** | 200 | 1 | HBO_2 | 3,3 | 87,3 |

Загрузка реагентов * 1,2-фенилендиамин – 0,2 моль, метакриловая кислота -0,22 моль, борные кислоты 0,1 моль

** 1,2-фенилендиамин – 0,02 моль, метакриловая кислота -0,022 моль, борные кислоты 0,01 моль.

В результате проведенных работ было показано, что применение в качестве конденсирующего агента метаборной кислоты позволяет значительно повысить выход целевого продукта, ускоряя при этом реакцию конденсации. Синтез под действием MW излучения позволяет несколько повысить целевого выход продукта, что обусловлено возможностью проведения реакции при более высоких температурах при минимальном количестве кислорода воздуха.

Литература:

1. Соломко З. Ф., Кост А. Н. 1,5-Бензидиазепины // ХГС. – 1975. – №.11. – С. 1443-1463.
2. Пуоджюнайте Б. А., Янчене Р. А., Талайките З. А., Закс А. С., Работников Ю. М. Усачев Е. А. Синтез и биологическая активность N-замещенных 2,3,4,5-тетрагидро-1Н-бензодиазепинонов-2 // ХФЖ. – 1985. – С. 1195-1198.

© Махунова А.В., Баевский М.Ю., Чупахина Т.А., 2025

УДК 547.464.7

СИНТЕЗ АЦЕТАЛЕЙ НА ОСНОВЕ 2,2-ДИБРОММЕТИЛ-1,3-ПРОПАНДИОЛА

Мусин А.И, Шарифов М.Х, Борисова Ю.Г.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, г.
Уфа, Россия*

Соединения класса циклических ацеталей в настоящее время остаются предметом интенсивных исследований, что обусловлено их широким использованием в тонком органическом синтезе [1, 2].

Нами была выполнена ацетализация 2,2-дигромметил-1,3-пропандиола **1** с альдегидами **2**, **3** (схема 1) различного строения в присутствии бензола и серной кислоты в качестве катализатора при температуре 100-110°C.

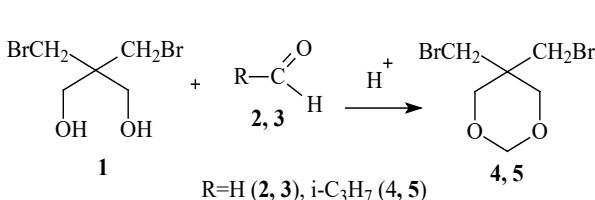


Схема 1

Образование циклических ацеталей **4** и **5** происходит за 4-6 часов с выходом более 90%. Следует отметить, что замена серной кислоты на катионит КУ-2 или п-толуолсульфокислоту на выход целевых продуктов **4**, **5** и время реакции не влияет.

Количественный анализ реакционной массы проводили методом газожидкостной хроматографии. Идентификацию продуктов осуществляли методами хроматомасс-спектрометрии, ^1H и ^{13}C -ЯМР-спектроскопии.

Работа выполнена в рамках госзадания Минобрнауки России в сфере научной деятельности FEUR-2023-0006 «Разработка и создание малотоннажных продуктов и реагентов (ингибиторы коррозии и солеотложение, антиоксиданты, биоциды, присадки и др.) для процессов нефтегазохимии и очистки водных сред от загрязнений, замещающих импортные вещества и материалы. Теоретические и экспериментальные подходы».

Литература

1. Ершов М.А. Обзор производных фурфурола в качестве перспективных октаноповышающих добавок к топливу // Журнал прикладной химии. – 2017, – Т. 90. – Вып. 9. – С 103-113.
 2. Султанова Р.М., Борисова Ю.Г., Хуснутдинова Н.С., Раскильдина Г.З., Злотский С.С. // Известия Академии наук. Серия химическая. – 2023. – Т. 72, – Вып. 10, – С. 2297-2318.

© Мусин А.И., Шарифов М.Х., Борисова Ю.Г., 2025

УЛК 547 72·661 719

СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И РЕАКЦИИ [3+2]-ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ

БИС-ТИОЭФИРОВ 5-ПРОПАРГИЛОКСИ-2(5Н)-ФУРАНОНА

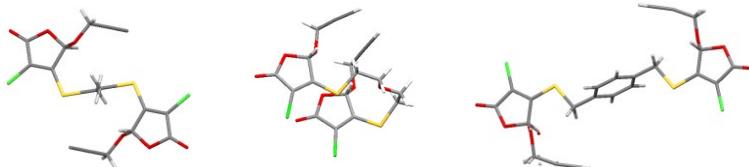
Никифорова Д.Д.¹, Сайгитбаталова Е.Ш.¹, Герасимова Д.П.²,
Лодочникова О.А.², Курбангалиева А.Р.¹

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

²Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова –
ОСП ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

Данная работа посвящена синтезу и изучению строения бис-тиоэфиров, несущих пропаргилокси-фрагмент в пятом положении ненасыщенного γ -лактонного цикла, а также их использованию в медь-катализируемых реакциях азид-алкинового циклоприсоединения.

При взаимодействии 5-гидрокси-3,4-дихлор-2(5*H*)-фуранона с пропаргиловым спиртом в условиях кислотного катализа получен 5-пропаргилокси-3,4-дихлор-2(5*H*)-фуранон, который вовлекли в реакции с серосодержащими бинуклеофильными реагентами (этан-1,2-дитиол, пропан-1,3-дитиол, 2,2'-оксидиэтантанол, изомерные фенилендиметантиолы) в присутствии триэтиламина. В результате получена серия новых *bis*-тиоэфиров, несущих две терминальные тройные связи в боковой цепи заместителей у атомов углерода C(5) двух лактонных циклов. Молекулярная и кристаллическая структура трех *bis*-тиоэфиров охарактеризована методом рентгеноструктурного анализа.



Реакции [3+2]-циклоприсоединения с участием *bis*-тиоэфиров с пропаргилокси-заместителями и азидов (2,4,6-трихлорфенилазид,ベンзилазид) проводили с использованием каталитической системы на основе сульфата меди (II), аскорбата натрия, триэтиламина в смеси тетрагидрофурана с водой в атмосфере сухого аргона. Получены новые гетероциклические системы, молекулы которых содержат по два фрагмента 2(5*H*)-фуранона и 1,2,3-триазола. Строение всех новых синтезированных гетероциклов доказано методами спектроскопии ИК и ЯМР.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 23-73-10182).

© Никифорова Д.Д., Сайгитбаталова Е.Ш.,
Герасимова Д.П., Лодочникова О.А., Курбангалиева А.Р., 2025

УДК 547.831.3

СИНТЕЗ И АНТИБАКТЕРИАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ ПИРИДИЛЗАМЕЩЕННЫХ АМИНОХРОМЕНКАРБОНИТРИЛОВ И ХРОМЕНОПИРИМИДИНОНОВ НА ИХ ОСНОВЕ

Никулин А.В.¹, Астанкова А.С.¹ Кривенько А.П.¹, Бурыгин Г.Л.^{1,2}

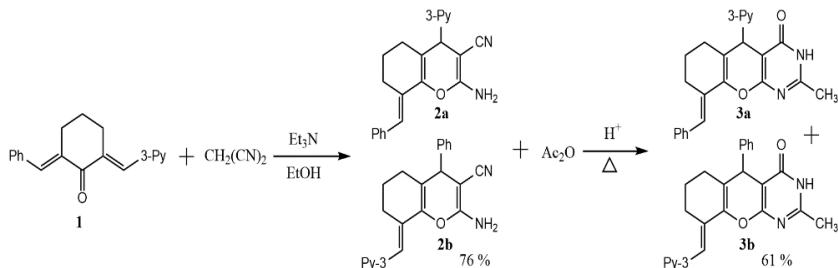
¹ Саратовский национальный исследовательский государственный
университет имени Н.Г. Чернышевского, Саратов, Россия

² Институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов РАН,
Саратов, Россия

Интенсивное развитие химии 2-аминохромен-3-карбонитрилов в последние годы обусловлено выявлением среди них соединений с широким спектром биологической активности и возможностями трансформации из-за наличия различных реакционных центров. Одним

из способов модификации является аннелирование пиримидинового цикла, что приводит к формированию в молекуле нового фармакофорного фрагмента.

Известно, что илиденциклогексаноны, содержащие изомерные 2,3,4-пиридильные заместители и их иодметилаты проявляют антиациетилхолинэстеразную активность, среди которых лидирует 3-пиридилизамещенный халкон. Учитывая литературные данные, в поиске новых биоактивных соединений, нами осуществлен синтез регионаизомерных 2-аминотетрагидро-4Н-ромен-3-карбонитрилов **2a**, **2b** на основе халкона **1** и малононитрила.



При взаимодействии хроменов **2a**, **2b** с уксусным ангидридом в присутствии в качестве катализатора оксида графена получены соответствующие продукты гетероаннелирования – хромено[2,3-d]пиримидин-4-оны **3a**, **3b**, выделенные при использовании колоночной хроматографии.

При экспериментальном исследовании антибактериальной активности в отношении *Staphylococcus aureus* ATCC 25923 установлено, что соединения **3a** и **3b** близки по активности к препаратуре сравнения (фурацилин), что предопределяет их дальнейшее углубленное изучение.

© Никулин А.В., Астанкова А.С., Кривенько А.П., Бурыгин Г.Л., 2025

УДК 547.72:547.831

РАЗРАБОТКА МЕТОДА СИНТЕЗА НОВЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, НЕСУЩИХ ФРАГМЕНТЫ ФТОРХИНОЛОНА И 2(5H)-ФУРАНОНА

Новикова Ю.В., Латыпова Л.З., Курбангалиева А.Р.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

Бактериальные инфекции вызывают широкий спектр заболеваний, многие из которых являются чрезвычайно опасными для человека. Растущее развитие устойчивости к противомикробным препаратам представляет собой одну из важнейших проблем здравоохранения во всем мире. Современные пути поиска новых антибактериальных препаратов включают несколько подходов, наиболее перспективным из

них является модификация известных антибиотиков химическими методами.

Одним из наиболее эффективных классов антимикробных препаратов, используемых на сегодняшний день, являются фторхинолоны [1]. Несмотря на имеющееся разнообразие производных фторхинолонового ряда, соединения на основе фторхинолона и химически и биологически активных ненасыщенных γ -лактонов изучены крайне мало. Данная работа посвящена разработке методов синтеза новых гетероциклических систем, содержащих фрагменты фторхинолона и 2(5*H*)-фуранона.

В качестве исходных соединений были выбраны 5-алокси-2(5*H*)-фураноны, которые синтезировали в условиях кислотного катализа из коммерчески доступной мукохлорной кислоты (5-гидрокси-3,4-дихлор-2(5*H*)-фуранона) и спиртов различного строения (алифатические спирты, оптически активные *l*-ментол и *l*-борнеол). Далее в 4 положение пятичлененного лактонного цикла вводили фрагменты ципрофлоксацина и норфлоксацина в присутствии основания. Реакции 3,4-дихлорфуранонов с фторхинолонами проводили при нагревании реагентов при 80 °C в ДМФА. В результате получена серия гетероциклических систем, несущих фрагменты фторхинолона и 2(5*H*)-фуранона. Новые гетероциклы охарактеризованы данными методов спектроскопии ИК, одномерной и двумерной спектроскопии ЯМР, масс-спектрометрии высокого разрешения.

Литература

1. Rodrigues C.F., Silva F. The rise, fall, and rethink of (fluoro)quinolones: A quick rundown // *Pathogens*. – 2025. – V. 14, № 6. – Article № 525.

© Новикова Ю.В., Латыпова Л.З., Курбангалиева А.Р., 2025

УДК 547.46'054.4

ПОЛУЧЕНИЕ АМИДОВ 3,5-ДИНИТРОБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ

Норкина Д.Д., Путис С.М.

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

Производные 3,5-динитробензойной кислоты, такие как сложные эфиры и амиды проявляют высокую биологическую активность [1-3]. Среди данных соединений сложные эфиры, как правило, обладают противогрибковой активностью [1,2], а амиды – противотуберкулезной активностью *in vitro* [3]. В последнее время, амиды 3,5-динитробензойной кислоты активно исследуются в качестве активных веществ против штаммов *M.tuberculosis* (в частности H37Rv-GFP), а также представляют интерес в качестве антагонистов к *Mycobacterium*, т.е. обладающих противомикробным действием [4], поэтому настоящая работа является актуальной.

Для получения амидов 3,5-динитробензойной кислоты использовали метод аминирования метилового эфира (**1**) аммиаком, а также алифатическими метил-, диметил-, этил- и пропиламинами (рис.1).

Аминирование проводили в среде метанола при комнатной температуре с использованием 3-5 кратного избытка амина.

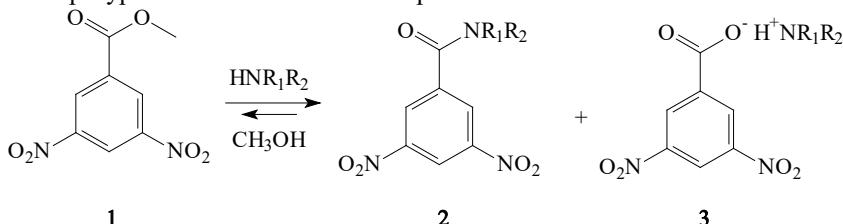


Рис. 1. Аминирование метилового эфира 3,5-динитробензойной кислоты (**1**)

В ходе аминирования были получены соответствующие амиды (**2**) с выходами от 40 до 70 %. Было установлено, что на процесс аминирования существенное влияние оказывает содержание воды в аминирующем агенте. Так, например, выход амida (**2**) из 25 %-ного аммиака составил всего 40 %, при этом выход пропиламида (из 100 % пропиламина) – 75 %. Обнаружено, что аминирование, при использовании водных аминов, протекает с образованием побочного продукта аммонийной соли 3,5-динитробензойной кислоты (**3**) получаемого при гидролизе метилового эфира (**1**) в водно-щелочной спиртовой среде. Для подтверждения этого нами были приготовлены безводные растворы аминов в метиловом спирте (полученные нейтрализацией соответствующих гидрохлоридов эквимольным количеством метилата натрия, с последующим удалением выделенного хлорида натрия фильтрованием).

При аминировании метилового эфира (**1**) безводными метанольными растворами аминов, образование побочного продукта (**3**) не происходило, и процесс приводил исключительно к образованию амидов (**2**) с выходами от 75 до более 90 % (после кристаллизации).

Чистоту и индивидуальность полученных соединений подтверждали методами ТСХ и элементным анализом, структуру – ЯМР (на ядрах ^1H и ^{13}C) и ИК-спектроскопией с применением приставки НПВО.

Литература

1. 3,5-Dinitrobenzoate and 3,5-Dinitrobenzamide Derivatives: Mechanistic, Antifungal, and *In Silico* Studies / A. B. S. Duarte, Y. Perez-Castillo, D. Nobrega Alves et al. // J. Chemistry. – 2022. – Vol. 2022, Issue 1. – P. 1-17.
2. Antifungal activity against *Candida albicans* of methyl 3,5-dinitrobenzoate loaded nanoemulsion / A. B. S. Duarte, Y. Perez-Castillo, D. Nobrega Alves,

- R. D. Castro, R. L. Souza, D. P. Sousa, E. E. Oliveira // Brazilian Journal of Microbiology. – 2024. – Vol. 55, Issue 1. – P. 25-39.
3. Design, synthesis and antimycobacterial activity of 3,5-dinitrobenzamide derivatives containing fused ring moieties / A. Wang, G. Huang, B. Wang et al. // Bioorganic & Medicinal Chemistry Letters. – 2018. – Vol. 28, Issue 17. – P. 2945-2948.
4. High content screening identifies decaprenyl-phosphoribose 2' epimerase as a target for intracellular antimycobacterial inhibitors / T. Christophe, M. Jackson, H. K. Jeon et al. // PLoS Pathog. – 2009. – Oct. Vol. 5, Issue 10: e1000645.

© Норкина Д.Д., Путис С.М., 2025

УДК 547.733

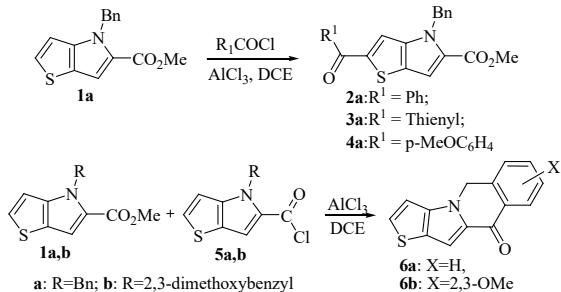
ПОЛУЧЕНИЕ НЕОЖИДАННОГО ПРОДУКТА ЦИКЛИЗАЦИИ ПРИ
ИЗЧЕНИИ РЕАКЦИИ АЦИЛИРОВАНИЯ N-ЗАМЕЩЕННЫХ
4Н-ТИЕНО[3,2-В]ПИРРОЛ-5-КАРБОКСИЛАТОВ

Торосян С.А., Нуриахметова З.Ф., Гималова Ф.А.

Уфимский институт химии Уфимского федерального
исследовательского центра Российской академии наук, Уфа, Россия

Производные тиено[3,2-*b*]пирролов находят широкое применение для получения биологически активных соединений и в конструировании кросс-сопряженных структур для оптоэлектроники. В синтезе производных тиенопирролов использованы реакции по карбоксильной группе (карбоксамиды), спирты как предшественники бистиенопиррометанов и полимеров, а также N-алкил- и галоидпроизводных при двойной связи (винилгалогениды) соответственно, и др. В то же время сведений о реакциях ацилирования тиенопирролов крайне мало [1]. В ходе изучения реакций ацилирования эфира **1a** (схема 1) хлорангидридом метил 4-бензилтиено[3,2-*b*]пирролкарбоновой кислоты **5a** в условиях Фриделя-Крафтса наблюдали образование нового неожиданного производного изохинолина **6a**. Из соединения **1b** в аналогичных условиях, также был получен изохинолин **6b**. Структуры всех полученных соединений однозначно подтверждены методами ЯМР, ИК-спектроскопии и масс-спектрометрии.

Схема 1



Таким образом, в работе изучены реакции ацилирования по Фриделю-Крафтсу производных метил 4Н-тиено[3,2-*b*]пирролкарбоксилатов, описан синтез новой топологии изохинолинов на основе N-бензилпроизводного 4Н-тиено[3,2-*b*]пирролкарбоксилата.

Литература

- Krayushkin M.M., Yarovenko V.N., Semenov S.L., Zavarzin I.V., Ignatenko A.V., Martynkin A.Yu., Uzhinov B.M. // Org. Lett. 2002. Vol. 4. P. 3879-3881.

© Торосян С.А., Нуриахметова З.Ф., Гималова Ф.А., 2025

УДК 547

ТЕТРАГИДРОФУРАНОЛ-3 В РЕАКЦИИ МАННИХА С ЦИКЛИЧЕСКИМИ АМИНАМИ

Охиров Ш.М., Валилова Р.С., Латышова Э.Р., Талипов Р.Ф
Уфимский университет науки и технологии, Уфа, Россия

В ходе изучения возможности синтеза оснований Манниха на основе тетрагидрофуранола-3 (**1**) вместо ожидаемых аминометоксипроизводных **2(a-c)** были получены продукты димеризации аминов с участием формальдегида **3(a-c)**. На самом деле, согласно данным квантово-химического расчёта, энергия Гиббса образования продуктов димеризации **3(a-c)** ниже энергии Гиббса соединений **2(a-c)** (табл. 1).

Продукты димеризации аминов **3(a-b)**, согласно программе Pass Online, могут проявлять различные виды биологической активности (таблица 2) при их низкой токсичности, рассчитанной на основе программы Gussar Online.

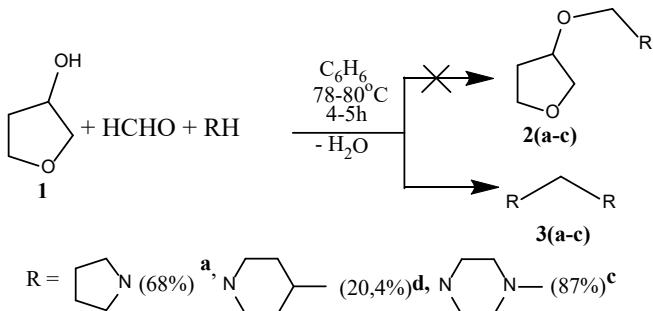


Таблица 1

Квантово-химический расчёт ΔG для соединений 2 и 3

| | Соединение | | | | | | |
|-----------------------|------------|--------|-------|----|--------|--------|--------|
| | 2a | 2b | 2c | 3a | 3d | 3c | |
| ΔG , кДж/моль | -3,454 | -2,098 | 0,680 | - | 44,042 | 59,640 | 35,824 |

Таблица 2

Фармакологическая активность соединений 3(a-c) согласно программе Pass Online

| Соединение | Виды активности | Ра |
|------------|--|-------|
| 3a | Лечение рассеянного склероза | 0,869 |
| | Противовирусный препарат (пикорнавирус) | 0,753 |
| 3b | Лечение фобических расстройств | 0,776 |
| | Анальгетик | 0,774 |
| 3c | Антагонист адреналина | 0.987 |
| | Противосудорожное средство | 0,776 |

Ра – вероятность наличия у соединения активности на основании его структуры.

© Охиров Ш.М., Валирова Р.С., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф., 2025

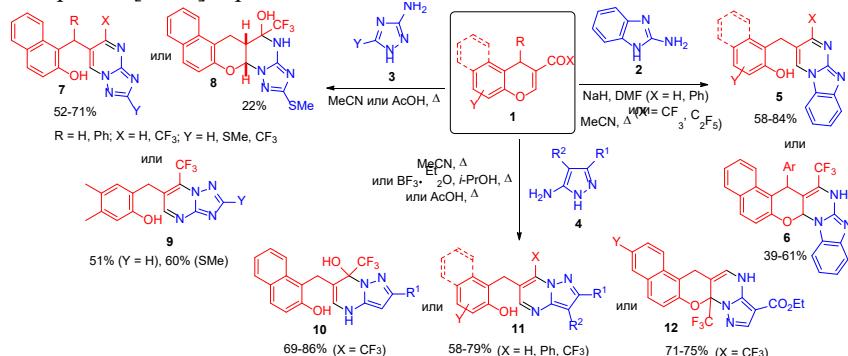
УДК 547.814.5

[3+3]-ЦИКЛОКОНДЕНСАЦИЯ β -КАРБОНИЛЗАМЕЩЕННЫХ
4H-ХРОМЕНОВ С α -АМИНО-NH-АЗОЛАМИ

Парфенов К.В., Осипов Д.В., Осянин В.А., Красников П.Е.

Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

Интерес к синтезу азоловиридиных обусловлен их разнообразной биологической активностью, в том числе гербицидной, фунгицидной, противораковой, антивирусной и др. Как правило, азоловиридины получают циклоконденсацией α -амино-NH-азолов с трехуглеродными 1,3-бизэлектрофильными реагентами. При этом недостатком многих методов является образование смеси региоизомеров из-за амбидентной природы исходных аминоазолов и биэлектрофилов. В качестве последних в данной работе использовались β -карбонилзамещенные 4H-хромены 1, а в роли бинуклеофилов – 2-аминобензимидазол 2, амино-1,2,4-триазолы 3 и аминопиразолы 4, в результате чего получена серия пириими[1,2-*a*]бензимидазолов 5, [1,2,4]триазоло[1,5-*a*]пириимидинов 7 и пиразоло[1,5-*a*]пириимидинов 11.



В случае замещенных по метиленовому фрагменту хроменов были выделены 7,13-дигидро-5H-бензо[5',6']хромено[3',2':5,6]пириимидо[1,2-*a*]бензимидазолы 6. В реакции 2-трифторацетил-1H-бензо[*J*]хромена с 3-амино-5-(метилсульфанил)-1H-1,2,4-триазолом выделен представитель новой гетероциклической системы 4,5,5a,13-тетрагидро-6H-бензо[5,6]хромено[3,2-*e*][1,2,4]триазоло[1,5-*a*]пириимидин 8. Интересно отметить, что в случае 6,7-диметил-3-трифторацетил-4H-хромена реакция с 3-амино-1,2,4-триазолами 3 приводит уже к 7-трифторметилзамещенным [1,2,4]триазоло[1,5-*a*]пириимидинам 9.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-00682 (<https://rscf.ru/project/25-23-00682/>).

© Парфенов К.В., Осипов Д.В., Осянин В.А., Красников П.Е., 2025

УДК 547.793:547.791.1

СИНТЕЗ N_6 - α -АЗИДОАЦЕТИЛСИДНОНИМИНОВ И ИХ РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ В РЕАКЦИЯХ АЗИД-АЛКИНОВОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ

Платонов И.А.¹, Калганова Н.В.²

¹РХТУ им. Д.И. Менделеева, Москва, Россия.

²ИИЭОС им. А.Н. Несмиянова РАН, Москва, Россия.

Сиднонимины представляют собой мезоионные 1,2,3-оксадиазол-3-ий-5-амины, обладающие широким спектром биологической активности и уникальными физико-химическими свойствами [1,2]. В данной работе разработан удобный препаративный метод получения N_6 -а-азидаоацетилсиднониминов **3** – новых функционализированных производных, содержащих азидную группу в заместителе у эндоциклического атома азота (Схема 1). Полученные соединения устойчивы на воздухе и синтезируются с хорошими выходами без применения хроматографической очистки [3].

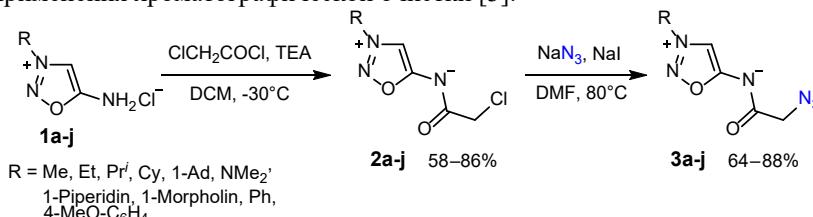


Схема 1. Синтез N_c -азидоацетилсилнониминов 3

Продемонстрирована высокая реакционная способность соединений 3 в реакции меди(I)-катализируемого азид-алкинового циклоприсоединения с различными терминальными алкинами (Схемы 2,3). В частности, впервые получены коньюгаты 3-морфолинсиднонимина с защищённой глюкозой 6а, изокумарином 6b и остатком липоевой кислоты 6с, в которых фармакофорный NO-донорный фрагмент соединён с биоактивными молекулами через 1,2,3-триазольный мостик.

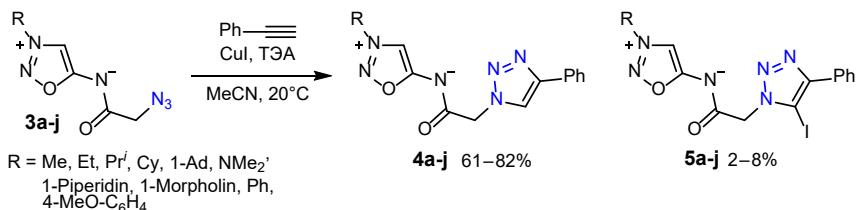
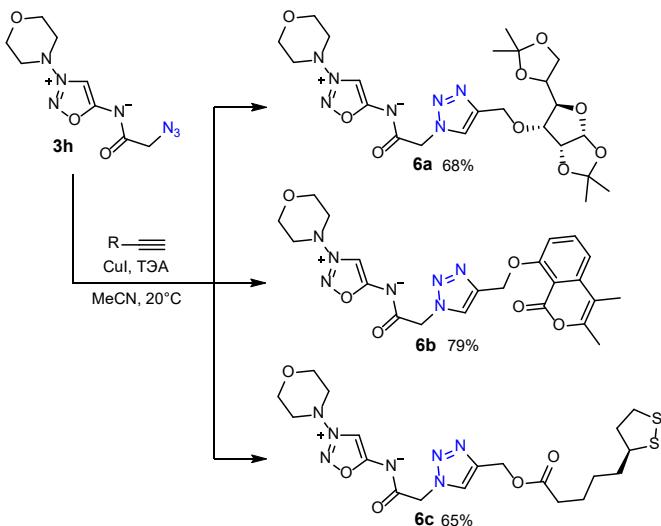


Схема 2. Синтез N_6 - α -(4-фенил-1 H -1,2,3-триазол-1-ил)ацетилсиднониминов.



Разработанный подход открывает широкие возможности для направленной модификации сиднониминов и создания многофункциональных соединений, сочетающих NO-донорные свойства с дополнительными биологически активными эффектами присоединенных фрагментов. Таким образом, данные структуры представляют собой перспективные объекты для применения в фармацевтической химии и разработке систем адресной доставки лекарственных средств.

Работа выполнена в рамках Государственного задания №58.3 Министерства науки и высшего образования Российской Федерации.

Литература

1. Idocin A.F., Specklin S., Taran F. Sydnonimines: synthesis, properties and applications in chemical biology. – Chemical Communications, 2025. – Т. 61. – №. 31. – С. 5704-5718.
2. Стеблецова И.А., Ларин А.А., Ферштат Л.Л. Последние достижения в синтезе фармакологически активных соединений-лидеров на основе 1, 2, 3-, 1, 2, 4-и 1, 2, 5-оксадиазолов. – Успехи химии, 2025. – Т. 94. – №. 10. – С. 1-60.
3. Kalganova N.V., Platonov I.A., Smol'yakov A.F., Godovikov I.A., Cherepanov I.A. N_6 - α -Azidoacetyl sydnone imines: synthesis and reactivity in azide-alkyne cycloaddition reactions. – Tetrahedron. – 2025. – С. 134946.

© Платонов И.А., Калганова Н.В., 2025

УДК 547

АСИММЕТРИЧЕСКОЕ ВОССТАНОВЛЕНИЕ

2-, 3-, 4 АЦЕТИЛПИРИДИНОВ, КАТАЛИЗИРУЕМОЕ *PETROSELINUM CRISPUM*

Привалов Н.В., Чанышева А.Р., Зорин В.В.

ФГБОУ ВО «Уфимский государственный нефтяной технический университет»

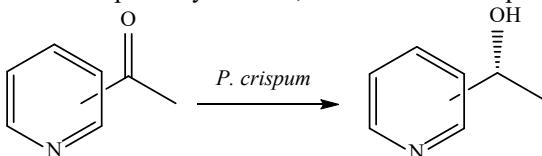
Современные низкомолекулярные биорегуляторы (фармацевтические препараты, агрохимикаты и др.), как правило, обладают сложным строением и стереохимией. Их биологическая активность зависит от абсолютной конфигурации, поскольку энантиомеры (*R*- и *S*-) и геометрические изомеры (*E*- и *Z*-) могут обладать различной эффективностью и безопасностью, что требует разработки методов получения продуктов с высокой стереохимической чистотой [1].

Для решения этих задач применяются методы асимметрического синтеза, включая металлокомплексный и органокатализ [2–3], а также биокатализитические подходы с использованием целых клеток [4–5].

Хиральные гетероароматические спирты используются в качестве промежуточных соединений в синтезе различных биологически активных веществ, а также лигандов в ряде реакций асимметрического синтеза [6]. Так, производные 1-(2-пиридинил)этанола являются важными прекурсорами в синтезе ненуклеозидного ингибитора обратной транскриптазы ВИЧ [7]. Ключевым промежуточным продуктом в синтезе алло-гетерохимбина – практически ценного алкалоида – является энантиомерно чистый (*R*)-(+)1-(3-пиридинил)этанол [6].

С целью изучения синтетического потенциала биокатализатора на основе культуры *P. crispum*, обладающего оксидоредуктазной активностью и широкой субстратной специфичностью, нами исследована

возможность биовосстановления прохиральных гетероароматических кетонов (2-, 3-, 4 ацетилпиридинов) до соответствующих оптически активных вторичных спиртов в условиях, описанных нами ранее [8–10].



Асимметрическое восстановление 2-ацетилпиридина, катализируемое клетками *P. crispum*, в течение 72 ч приводит к (*S*)-(-)-1-(2-пиридилил)этанолу с выходом 58% (88% ee). Аналогичная трансформация 3-ацетилпиридина дает соответствующий *S*-спирт с выходом 55% (89% ee). В результате биовосстановления 4-ацетилпиридина образуется (*S*)-(-)-1-(4-пиридилил)этанол с выходом 86% (88% ee).

Таким образом, в изученных нами условиях было установлено, что трансформация 2-, 3-, 4-ацетилпиридинов клетками *P. crispum* во всех случаях приводит к образованию *S*-спиртов. Выходы и оптическая чистота полученных спиртов зависят от положения ацетильной группы.

Протекание реакций контролировали хроматографически, используя заведомо синтезированные образцы (\pm)-1-(пиридилил)этанолов (2, 3, 4-изомеров) и энантиоселективную ГЖХ. Строение полученных *S*-спиртов установлено с помощью методов ЯМР ^1H и C^{13} -спектроскопии и хромато-масс-спектрометрии, конфигурация была подтверждена поляриметрически.

Литература

1. Кочетков К.А., Ощепков М.С. Стереохимия биологически активных веществ / Учебник для Вузов. М.: Лаборатория Знаний, 2025, 189 с.
2. Amouri H., Gruselle M., Woolins D., Atwood D. Chirality in transition metalchemistry: Molecules, supramolecular assemblies and materials. Woollins J.D., Atwood D.A., Crabtree R.H., Mayer G. (eds.). John Wiley & Sons, West Sussex, 2008, 239 p.
3. Dzhemilev U.M., D'yakonov V.A. New catalytic organometallic reactions that changed the strategy of organic synthesis // Russ. Chem. Rev. 2025 V. 94 №6.
4. Xiang Sh., Tan B. Advances in asymmetric organocatalysis over the last 10 years // Nat. Commun. 2020 V. 11 P. 378.
5. Tao J., Lin G., Liese A. Biocatalysis for the pharmaceutical industry: Discovery, development and manufacturing / John Wiley & Sons: Singapore, 2009 250 p.

6. Orrenius, C., Mattson, A., Norin, T., Öhrner, N., Hult, K. Preparation of 1-pyridinylethanols of high enantiomeric purity by lipase catalysed transesterifications // Tetrahedron: Asymmetry. 1994. V. 5. №. 7. P. 1363-1366.
7. Kawano S., Horikawa M., Yasohara Y., Hasegawa J. Microbial enantioselective reduction of acetylpyridine derivatives // Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry. 2003 V. 67 № 4 P. 809-814.
8. Чанышева А.Р., Привалов Н.В., Зорин В.В. Энантиоселективное биокатализитическое восстановление гексан-2-она, катализируемое клетками *Petroselinum crispum* // Экологическая химия. 2020. Т. 29. № 1. С.16-20.
9. Чанышева А.Р., Юсупова Ю.К., Привалов Н.В., Зорин В.В. Оптимизация кеторедуктазной активности ферментов *Petroselinum crispum* для синтеза (S)-1-(4-метоксифенил)этанола // Башкирский химический журнал. 2020. Т. 27. № 1. С. 32-35.
10. Чанышева, А.Р., Привалов Н.В., Зорин В.В. Стереоселективное биовосстановление гептан-2-она и октан-2-она, катализируемое клетками *Petroselinum crispum* // Башкирский химический журнал. 2024. Т. 31. № 4. С. 35-38.

© Привалов Н.В., Чанышева А.Р., Зорин В.В., 2025

УДК 547

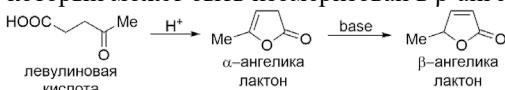
РЕАКЦИИ АНГЕЛИКА ЛАКТОНОВ С АРЕНАМИ В ТРИФОРМЕТАНСУЛЬФОНОВОЙ КИСЛОТЕ

Пузанов А.И.^{1,2}

¹Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Уфа, Россия

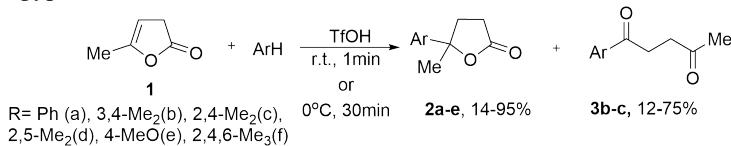
²Санкт-Петербургский государственный лесотехнический университет,
Санкт-Петербург, Россия

Левулиновая кислота (4-оксонентановая кислота), получаемая из растительного сырья, является исходным соединением для синтеза широкого ряда практически ценных веществ [1]. Наименее изученным является продукт дегидратации-циклизации левулиновой кислоты, α -ангелика лактон, который может быть изомеризован в β -ангелика лактон.

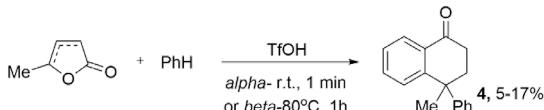


В данной работе, рассмотрены реакции α - и β -ангелика лактонов с аренами в трифторметансульфоновой кислоте $\text{CF}_3\text{SO}_3\text{H}$ (TfOH), в результате которых образуются разнообразные соединения – фураноны **2**, дикетоны **3** и тетралоны **4**, в зависимости от условий реакции.

α -Ангелика лактон **1** реагирует с аренами в TfOH, приводя к дигидрофуранонам **2** и/или дикетонам **3**.



Также тетралон **4** был получен путем взаимодействия α - и β -ангелика лактона с бензолом в TfOH с выходами 17 и 5% соответственно.



В докладе обсуждаются многостадийные пути электрофильных превращений левулиновой кислоты и её лактонов в конечные продукты реакции.

Литература

1. Pileidis F.D., Titirici M.. Levulinic Acid Biorefineries: New Challenges for Efficient Utilization of Biomass. *ChemSusChem*, **2016**, 9, 562-582.

© Пузанов А.И., 2025

УДК 547.823

ПЕРСУЛЬФАТНОЕ ОКСИЛЕНИЕ 2-БРОМПИРИДИНА

Рашитова Л.Ш.¹, Латыпова А.А.², Хазимуллина Ю.З.²

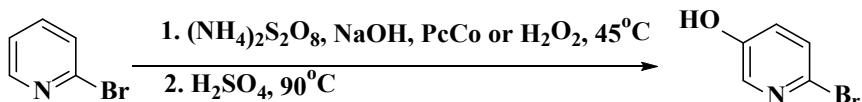
¹ Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

² Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Азотсодержащие гетероциклические соединения представляют обширный класс органических соединений, играющих важную роль в природе [1]. 2-Бромпиридин является высокоценным реагентом в органическом синтезе благодаря уникальному сочетанию пиридинового азота и лабильного атома брома. Это позволяет ему эффективно участвовать в реакциях нуклеофильного ароматического замещения и выступать ключевым строительным блоком для получения широкого спектра функционализированных гетероциклических соединений [2]. Многие производные пиридина благодаря низкой токсичности и уникальным фармакологическим свойствам находят применение в медицине. Тем не менее поиск новых фармакологически активных соединений остается актуальным.

2-Бром-5-гидроксилированный пиридин используется в различных сферах жизни. Он служит основой для создания широкого спектра биологически активных молекул. В медицине 2-бром-5-гидроксилированный пиридин используется в качестве исходного реагента или промежуточного продукта в синтезе множества лекарственных средств, таких как противовоспалительных и противораковых [3]. В сельском хозяйстве применяется для синтеза

эффективных средств защиты растений. Актуальность 2-бром-5-гидроксиридины не только сохраняется, но и **возрастает** благодаря его незаменимой роли в создании инновационных лекарств, высокотехнологичных материалов и катализитических систем.



Таким образом, разработан способ получения 2-бром-5-гидроксиридины окислением 2-бромпиридина персульфатом аммония $(\text{NH}_4)_2\text{S}_2\text{O}_8$ в щелочной среде с последующим гидролизом. В ходе данной работы были использованы катализатор в количестве 0,02 мас% (фталоцианин кобальта) и пероксид водорода. Выходы составили 64% и 68% соответственно.

Литература

- Сборник тезисов VIII Международной конференции / Синтез новых биологически активных производных азотсодержащих гетеро- и карбоциклов / Мустафин А. Г., Гимадиева А. Р., Хазимуллина Ю. З., Гилимханова А. А. – Екатеринбург, 2024.
- Гетероциклическое соединение, промежуточное соединение, способ получения и применение / Лоу Ц., Чэн Ю., Лю Ц., Чжан И., Го С., Цянь Л., Ван Ч. // Пат. РФ 2800153 С2 – Санкт-Петербург, 2023.
- Пиридины и их применение в лечение рака / Арнер Э. С., Страффорд У. Ч., Куссан Н. П., Люси Д. К., Мэлоуни Д. Д., Симеонов А., Джадхав А., Дексимер Т. С. // Пат. РФ 2730505 С2 – Москва, 2020.

© Раширова Л.Ш., Латыпова А.А., Хазимуллина Ю.З., 2025

УДК 547.496:547.7/8

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА НОВЫХ Н-(ГИДРОКСИАЛКИЛ)ТИОАКРИЛАМИДОВ

Решетникова А.А.¹, Левченко А.Г.¹, Доценко В.В.^{1,2}

¹Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия

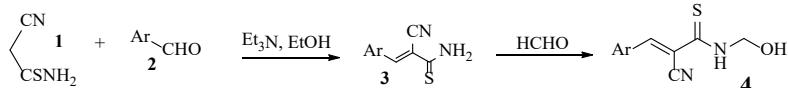
²Северо-кавказский федеральный университет, Ставрополь, Россия

Цианотиоацетамид **1** легко реагирует с ароматическими альдегидами **2** в водно-спиртовой среде в присутствии катализатора - триэтиламина с образованием арилметиленцианотиоацетамидов (3-арил-2-цианотиоакриламидов) **3**. Последние вступали в реакцию с формальдегидом (HCHO) с образованием N-(гидроксиметил)производных **4**. В этой работе предложен метод получения новых производных N-(гидроксиалкил)тиоакриламидов,

рассматриваются биологические эффекты в качестве антидотов гербицида 2,4-Д.

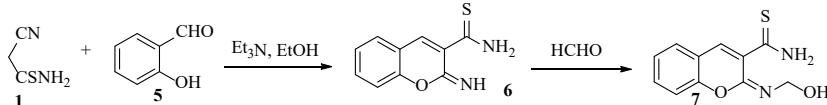
Исходное соединение **3** было получено из цианотиоацетамида **1** и ароматического альдегида **2** в водно-спиртовой среде с использованием основного катализатора (схема 1) [1]. Далее соединение **3** ввели в реакцию с HCHO при 60 °C (схема 1) [1].

Схема 1



Салициловый альдегид **5**, вступая в реакцию с цианотиоацетамидом **1**, дает продукт внутримолекулярной циклизации **6**. При взаимодействии полученного иминохромена с HCHO образуется соединение **7** (схема 2) [2,3].

Схема 2



Для прогнозирования биологической активности соединений **4,7** был использован сервис PASS Online. Соединения **4** с большей вероятностью проявляют свойства ингибиторов тирозинкиназ (87,4 %) и S-метилтрансферазы гомоцистеина (78,2 %), также они могут проявлять противоопухолевые свойства (78,8%) и в меньшей степени – антипсориатические свойства (57,3 %). К отрицательным эффектам прогноз относит гипоплазию коры надпочечников (67,9 %) и анемию (53,8 %). Соединение **7** с большей вероятностью проявляет свойства спазмолитика, мочевыделительного средства (62,6 %), агониста целостности мембран (53,9 %) и противогрибковое средство (44,5 %), также является противотуберкулёзным средством (42,8 %). К негативным эффектам можно отнести вызывание угревой сыпи (73,2 %), аллергии разного характера (55,7 %) и канцерогенный характер (для мышей – 63,8 %).

Литература

1. Доценко В.В., Чигорина Е.А., Кривокольско С.Г. N-гидроксиметилирование 3-арил-2-цианопроп-2-ентиоамидов // Журнал общей химии. – 2020. – Т. 90. № 8. – с. 1199–1206.
2. Левченко А. Г., Доценко В. В. Синтез и свойства N-(гидроксиметил)тиоакриламидов // Химия и химическая технология: достижения и перспективы: сборник материалов I Междунар. VII Всерос.

конф. (г. Кемерово, 27–29 нояб. 2024 г.). – Кемерово, 2025. – С. 0231.1 – 0231.3

3. Пат. 2808411 Рос. Федерации. МПК C07C 2900, C07C 2916. Способ получения замещенных (E)-3-арил-N-(гидроксиметил)-2-цианотиоакриламидов / В.В. Доценко, А.Г. Левченко; патентообладатель Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования "Кубанский государственный университет" (ФГБОУ ВО "КубГУ"). – № 2023124588; заявл. 25.09.2023; опубл. 28.11.2023, Бюл. № 34. – 9 с.

© Решетникова А.А., Левченко А.Г., Доценко В.В., 2025

УДК 546.185 + 547.787.1

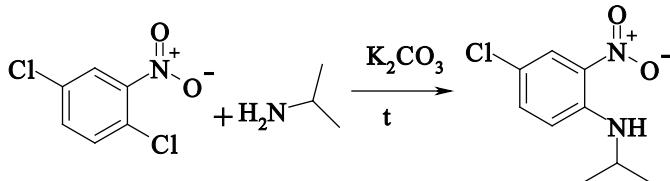
**СИНТЕЗ 1-ИЗОПРОПИЛ-2-ФОРМИЛ-5-ХЛОР-1Н-БЕНЗИМАДОЛА,
КАК ТЕМПЛАТА ДЛЯ СОЗДАНИЯ ПОЛИЯДЕРНЫХ КЛАСТЕРОВ
ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ**

Решетко М.А. А.В. Баевский М.Ю., Чупахина Т.А.

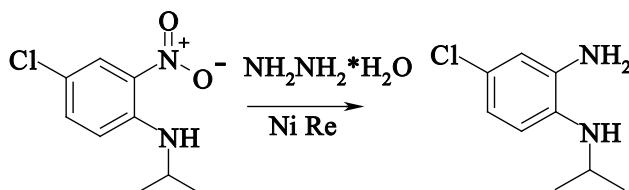
*Крымский Федеральный университет им. В.Вернадского,
Институт биотехнологии, экологии и фармации, Симферополь, Россия*

Разработана методика синтез несимметричных 1-замещенных производных 2-формил-1Н-бензимидазола, основанная на предварительном синтезе N-1-изопропил-4-хлорбензол-1,2-диамина, полученного в результате ряда последовательных реакций:

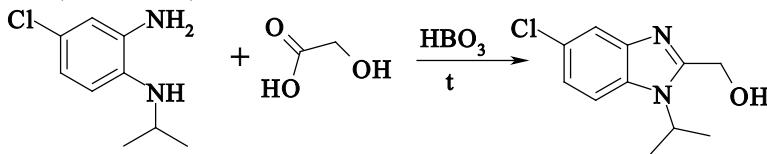
1. Конденсация соответствующего 2,5-дихлорнитробензола с изопропиламином в присутствии карбоната калия в автоклаве при температуре 140 °C с последующим выделением целевого продукта вакуумной перегонкой (выход 75%).



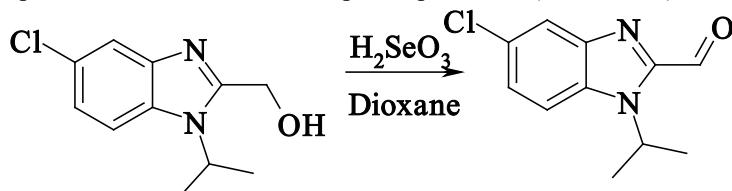
2. Восстановление нитрогруппы водным раствором гидразин гидрата в среде изопропилового спирта в присутствии никеля Ренея при температуре 40 °C.



3. Конденсация (4-хлор-2-нитрофенил)-изопропиламина с гликолевой кислотой сплавлением при 150 °C в присутствии борной кислоты (выход 90%).



4. Окисление 1-изопропил-2-гидроксиметилбензимидазола проводилось селенистой кислотой в смеси растворителей диоксан-бензол при температуре кипения смеси. С последующей отмыvkой от непрореагировавшего исходного бензимидазола из растворенной в бензole реакционной смеси водным раствором KOH (выход 78%).



Синтезированный альдегид передан на кафедру общей химии как перспективный темплат для получения полиядерных кластеров переходных металлов.

© Решетъко М.А., Баевский М.Ю., Чупахина Т.А., 2025

УДК 542.943.5+546.171.5+547.518

ОДНОРЕАКТОРНЫЙ ОЗОНОЛИТИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ТОЗИЛ И Н-АЦИЛ ПРИЗВОДНЫХ ОПТИЧЕСКИ ЧИСТОГО (3R)-ГИДРОКСИОНАНАЛЯ ИЗ (R)-(+)-РИЦИНОЛЕВОЙ КИСЛОТЫ

Сайтов К.М., Яковleva M.P., Назаров И.С., Ишмуратов Г.Ю.

Уфимский Институт химии Уфимского федерального исследовательского центра Российской академии наук, Уфа, Россия

Один из перспективных методов синтеза оптически чистых соединений базируется на селективных превращениях недорогих и доступных природных субстратов, содержащих асимметрические центры известной конфигурации. К таковым относится касторовое масло – природный оптически чистый триглицерид (*R,Z*)-(+)12-гидрокси-9-октадеценовой кислоты (**1**) с содержанием последней от 85 до 95% [1], которая легко может быть выделена щелочным гидролизом.

Работа посвящена разработке однореакторного озонолитического синтеза ряда N-ацил и тозилгидронов из (*R*)-(+)–рицинолевой кислоты (**1**)

Установлено, что при обработке пероксидных продуктов озонолиза (*R*)-(+)-рицинолевой кислоты (**1**) в CH₂Cl₂ при 0°C вначале 3,5 экв. гидразидных реагентов (никотиновой (**2**), изоникотиновой (**3**) и салициловой (**4**) кислот либо тозилгидразидом (**5**)), а после исчезновения пероксидов и последующего выдерживания реакционной смеси в течение 3 суток при комнатной температуре – раствором NaHCO₃ для удаления побочных карбоксилодержащих соединений образуются с хорошими выходами целевые соединения гидроксилодержащие тозил- (**9**) и N-ацилгидроны (**6–8**).

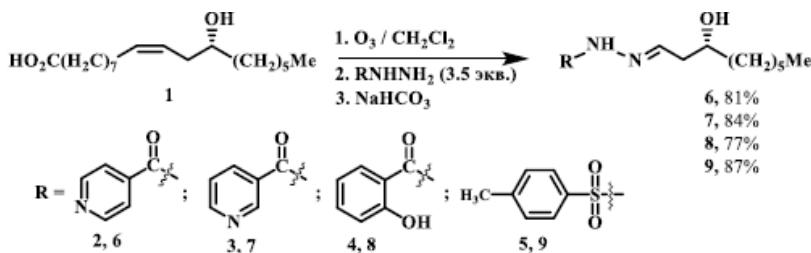


Рис. 1. Схема синтеза N-ацил и тозилгидронов

Литература

1. Lakshminarayana G., Paulose M.M., Kumari N. Characteristics and composition of newer varieties of Indian castor seed and oil // J. Amer. Oil Chem. Soc. – 1984. – V. 61. – N 12. – P. 1871 - 1872

© Сайтов К.М., Яковлева М.П., Назаров И.С., Ишмуратов Г.Ю., 2025

УДК 547.751+547.756+547.281

ОЗОНОЛИЗ N-ТОЗИЛ-2-(ЦИКЛОАЛК-2-ЕНИЛ)АНИЛИНОВ

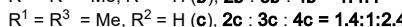
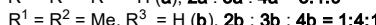
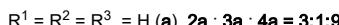
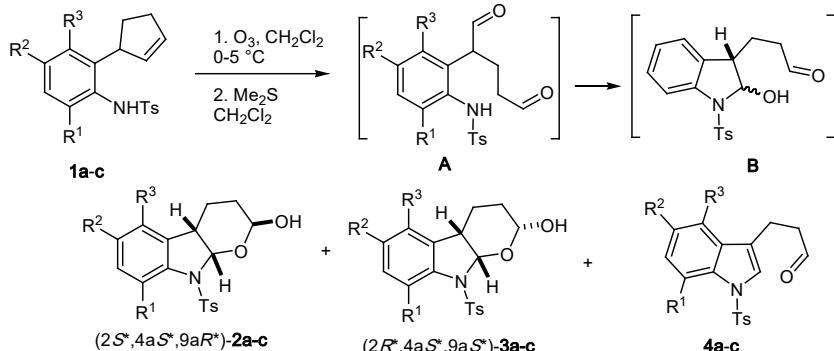
Сафаргалин Р.Р., Гатауллин Р.Р.

Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Последующее восстановление продуктов озонирования олефинов диметилсульфидом является хорошо изученным направлением исследований в органической химии^{1,2}. Тем не менее, примеры таких реакций с гомологами *ортого*-аллиланилина представлены на ограниченном наборе объектов, при атоме азота которых находятся остатки карбоновых кислот. С целью получения новых данных о вкладе размера циклоалкенильного кольца, тозильной группы при атоме азота и природы заместителей при углеродных атомах анилинового остова на структуру продуктов озонолиза, нами проведены исследования по озонированию N-тозилатов 2-(2-цикlopентен-1-ил)анилина (**1a**), его 4,6-

(1b), -3,6-диметилзамещенных гомологов (1c) и 2-(2-циклогексен-1-ил)-6-метиланилина (1d) с последующей обработкой реакционной смеси диметилсульфидом (схема 1).

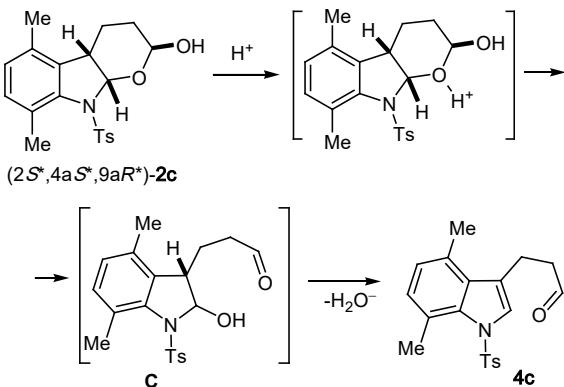
Схема 1



Установлено, что продуктами реакции является смесь *N*-тозилатов $(2S^*,4aS^*,9aR^*)$ -**(2a-c)** и $(2R^*,4aS^*,9aS^*)$ -2,3,4,4a,9,9a-гексагидропирано[2,3-*b*]индол-2-ола (**3a-c**), а также *N*-тозилат 3-(индол-3-ил)пропанала **4a-c**, соотношение которых зависит от времени выдерживания реакционной смеси в растворителе, природы и региолокализации заместителей при ароматическом кольце.

Установлено, что пираноиндолины **2** и **3** в присутствии следовых количеств протонов подвергаются последующим превращениям. На примере пираноиндола **2c**, в котором хиальные центры, предположительно, имеют $2S^*,4aS^*,9aR^*$ -конфигурацию, мы проследили его превращение в индолилпропаналь **4c** (схема 2).

Схема 2



Изменение соотношения *N,O*-гетероцикла **2c** и индолилпропаналя **4c** от $\approx 14:1$ (рис. 1,а) после выдерживания в CDCl_3 в ампуле 15 суток до $\approx 2:1$ (рис. 1,б) устанавливали измерением интегралов интенсивности наиболее характерных сигналов протонов этих соединений в спектре ЯМР ^1H .

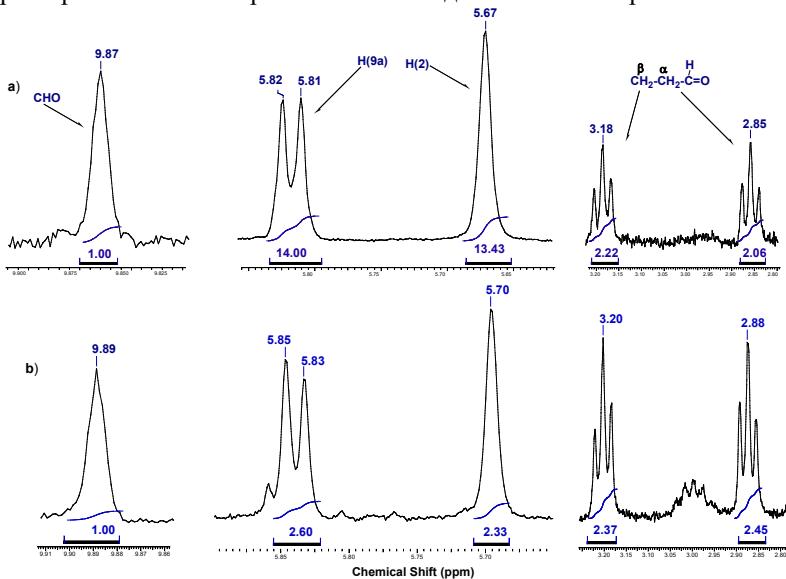


Рис. 1. Сигналы CHO , α -/ β - CH_2 протонов индолилпропаналя **4c** и сигналы протонов $\text{H}(9\text{a})$ и $\text{H}(2)$ пираноиндола **2c** в спектре ЯМР ^1H (а, через 15 ч; б, через 15 суток).

© Сафаргалин Р.Р., Гатауллин Р.Р., 2025

УДК 547.721/.729

СИНТЕЗ ФУРАНОВОГО АНАЛОГА ДУБИАМИНА ИЗ 5-ГИДРОКСИМЕТИЛФУРФУРОЛА

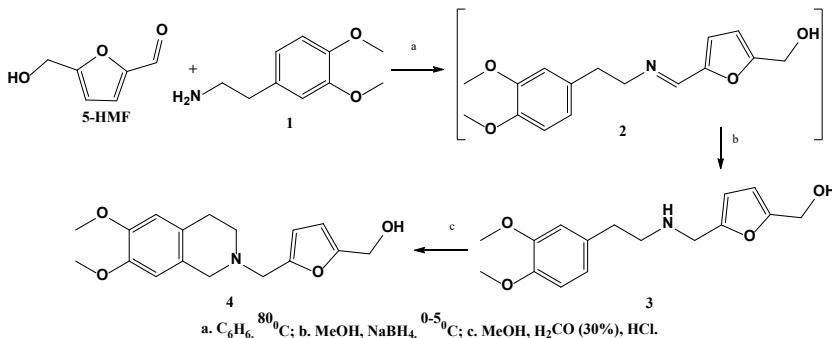
Сахаутдинова Г.Ф., Маннанов Т.А., Сахаутдинов И.М.

Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Алкалоиды изохинолинового ряда, особенно 1,2,3,4-тетрагидроизохинолины, обладают разнообразной биологической активностью [1]. Учитывая терапевтическую значимость сендаверина и дубиамина, синтез их структурных аналогов, в частности, фурановых производных, является важной задачей [2]. В представленной работе описан синтез нового фуранового аналога на основе 5-гидроксиметилфурфурола (5-HMF). 5-HMF и гомовератриламин **1**, синтезированные по известным методикам [3, 4], были использованы для получения основания Шиффа **2**. Последующее восстановление NaBH_4 в метаноле дало амин **3**, который был выделен экстракцией хлористым метиленом и переведен в солянокислую соль. 1,2,3,4-

тетрагидроизохинолин **4** был получен циклизацией амина **3** по реакции Пикте-Шпенглера в кипящем метаноле в присутствии формальдегида

Схема 1



В результате проведенных исследований был синтезирован новый представитель 1,2,3,4-тетрагидроизохинолиновых алкалоидов, соединение **4**. Синтез осуществлялся посредством реакции Пикте-Шпенглера из амина **3**, полученного из гомовератриламина **1** и 5-HMF.

Литература

1. Faheem, Kumar B.K., Sekhar K.V.G.C., Chander S., Kunjiappan S., Murugesan S. Medicinal chemistry perspectives of 1,2,3,4-tetrahydroisoquinoline analogs – biological activities and SAR studies. – RSC Adv., 2021. – V.11. – 12254 р.
2. Юнусов С.Ю. Алкалоиды. – Ташкент, «Фан», 1981. – 420 с.
3. Pieper P., McHugh E., Amaral M., Tempone A.G., Anderson E.A. Enantioselective synthesis and anti-parasitic properties of aporphine natural products. – Tetrahedron, 2020. – V.76(2). – 130814 р.
4. Chang C-F., Huang C-Y., Huang Y-C., Lin K-Y., Lee Y-J., Wang C-J. – Synthetic Communications, 2010. – V.40. – 3452 р.

© Сахаутдинова Г.Ф., Маннанов Т.А., Сахаутдинов И.М., 2025

УДК 547.721/.729

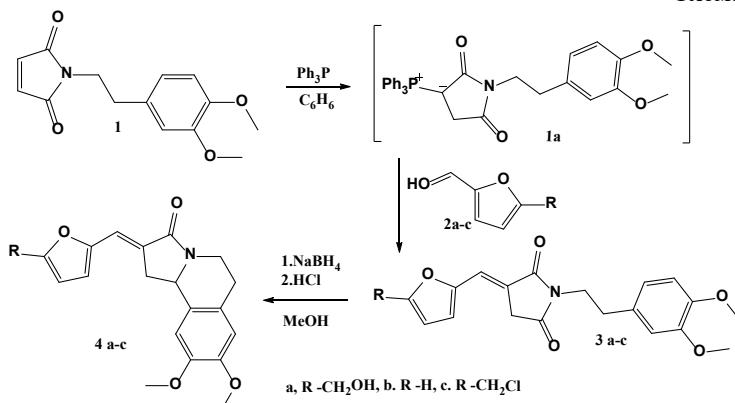
СИНТЕЗ ФУРАНСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРРОЛО[2,1- А]ИЗОХИНОЛИНОВ НА ОСНОВЕ ФОСФОРАНИЛИДЕНСУКЦИНИМИДА

Сахаутдинова Г.Ф., Сахаутдинов И.М., Маннанов Т.А., Мустафин А.Г.
Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Пирроло[2,1-*a*]изохинолины, важные компоненты многих биоактивных молекул, привлекают внимание разработчиков методов их функционализации. В данной работе впервые получены новые фурансодержащие имиды на основе N-гомовератрилсукининимида с

последующей циклизацией в изохинолины по реакции Пикте-Шпенглера [1]. N-Гомовератрилмалеимид 1, синтезированный по известным методикам [2-3], был использован в трехкомпонентной реакции Виттига с 5-гидроксиметилфурфуролом **2a** (5-ГМФ), 2-фуранкарбальдегидом **2b**, 5-хлорметилфурфуролом **2c** (5-ХМФ), что привело к образованию имидов **3a-c**, выделенных хроматографически. Структура имидов подтверждена спектроскопическими данными, в частности, появлением сигналов олефиновых протонов и атомов углерода. Имиды **3a-c** были восстановлены NaBH_4 и затем циклизованы в изохинолины **4a-c** в присутствии HCl . Структура установлена на основании данных ЯМР ^1H и ^{13}C .

Схема 1



Благодаря структурному сходству с биологически активными алкалоидами (например, эризотрамидином), синтезированные фурансодержащие пирроло[2,1-*a*]изохинолины могут обладать фармакологической активностью.

Литература

- Matveeva M.D., Purgatorio R., Voskressensky L.G., Altomare C.D. Pyrrolo[2,1-*a*]isoquinoline scaffold in drug discovery: advances in synthesis and medicinal chemistry. – Future Med. Chem., 2019. – V.11. – 2735 p.
- Manteca I., Etxarri B., Ardeo A., Arrasate S., Osante I., Sotomayor N. Functionalized Organolithium Compounds: Generation via Reductive Lithiation and Nucleophilic Addition to N-Phenethylimides. Access to Functionalized Dihydropyrrolo[2,1-*a*]isoquinolinones. – Tetrahedron, 1998. – V.54. – 12361 p.

3. Liu G.-N., Luo R.-H., Zhang X.-J., Zhou Y., Li J., Zheng Y.-T., Liu H. Synthesis and Evaluation of Anti-HIV-1 Activities of Novel 7-Hydroxy-1,3-dioxo-2,3-dihydro-1H-pyrrolo[3,4-c]pyridine-4-carboxylate Derivatives. – Med. chem., 2014. – V4. – 573 p.

© Сахаутдинова Г.Ф.,
Сахаутдинов И.М., Маннанов Т.А., Мустафин А.Г., 2025

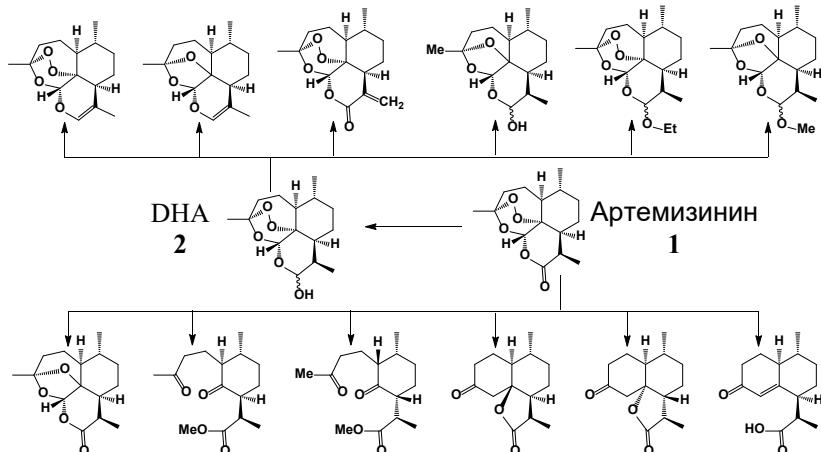
УДК 54-39

ЕСТЬ ЛИ СВЯЗЬ МЕЖДУ ЦИТОТОКСИЧЕСКОЙ И
ПРОТИВОМАЛЯРИЙНОЙ АКТИВНОСТЬЮ ДЛЯ АНАЛОГОВ
АРТЕМИЗИНИНА

Семаков А.В., Пухов С.А., Глоба А.А.

*ФГБУН Институт физиологически активных веществ ФИЦ ПХФиМХ
РАН, Черноголовка, Россия*

Артемизинин (1) – сесквитерпеновый лактон, имеющий в составе группу в виде эндопероксидного мостика. Именно с наличием эндопероксида связывают его противомаллярийное действие. Точный механизм остается дискуссионным, но однозначно связан с возможностью активации эндопероксида ионами железа Fe^{2+} , что затем ведет к образованию разных типов активных радикалов, активных форм железа и нарушению метаболизма гема в зараженных эритроцитах. Наличие в молекулах эндопероксидного фрагмента часто оказывается достаточным условием для проявления антималлярийной активности. Считалось, что молекулы с пероксидным фрагментом будут также активны и в отношении раковых клеток на основании наблюдений повышенного содержание свободных ионов Fe^{2+} внутри опухолевых клеток.



В докладе обсуждаются условия получения производных артемизинина (1) и дигидроартемизинина (2) ведущие к модификациям по пероксидному циклу, а также по лактонному циклу. Рассматривается влияние таких отдельных модификаций на цитотоксические свойства у производных на четырех клеточных линиях. В отличие от противомалярийной активности, где утрата эндопероксидного фрагмента ведет к полной утрате активности, такого выраженного эффекта у опухолевых клеточных линий не наблюдается.

© Семаков А.В., Пухов С.А., Глоба А.А., 2025

УДК 547.1'13:546.723.722-31:577.3

ИЗУЧЕНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ С ДНК КАТИОННЫХ КОМПЛЕКСОВ ФЕРРОЦЕНА

Сипиева А.С.

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмиянова Российской академии наук (ИНЭОС РАН), Москва, Россия

Производные ферроцена применяются в различных областях, кроме того, они обладают широким спектром биологической активности [1]. Их нейтральные и окисленные формы воздействуют на ДНК, а также генерируют активные формы кислорода [2]. Нами синтезированы ферроцинилметильные производные гетероциклов, которые затем были окислены бензохиноном до солей ферроциния.

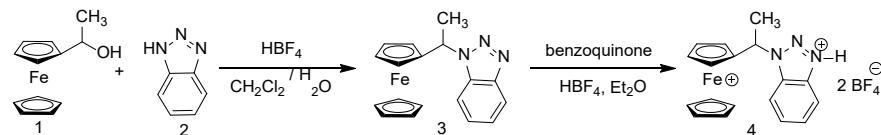


Рис. 1. Схема ферроцинилалкилирования и последующего окисления

Таблица 1

| R | HHet | Выход, % | T _{пл} , °C |
|-----------------|-------------------------|----------|----------------------|
| H | 1N-имидазол | 69 % | 139 |
| H | 4-нитроимидазол | 64 % | 206 |
| H | 2-метил-4-нитроимидазол | 43 % | 89 |
| H | бензотриазол | 78 % | 138 |
| CH ₃ | бензотриазол | 89 % | 129 |

Комплексообразование полученных соединений с нуклеотидами было исследовано с помощью ЦВА, а также УФ- и КД-спектроскопии.

Литература

1. Tomar V. et al. Anticancer potential of ferrocene-containing derivatives: Current and future prospective // Journal of Molecular Structure. 2024. P. 139589.
2. Favaron C. et al. Effects of ferrocene and ferrocenium on MCF-7 breast cancer cells and interconnection with regulated cell death pathways // Molecules. 2023. Vol. 28. №. 18. P. 6469.

© Сипиева А.С., 2025

УДК 547.824:542.91:548.737

СИНТЕЗ И ПРОТИВОВИРУСНАЯ АКТИВНОСТЬ 1,2,3-ТРИАЗОЛИЛ-СВЯЗАННОГО ГЛИКОКОНЬЮГАТА АРТЕСУНОВОЙ КИСЛОТЫ

Смирнова А.А., Третьякова Е.В.

Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

За последнее десятилетие модификация природных продуктов с использованием Cu(I)-катализируемой реакции азид-алкинового циклоприсоединения (CuAAC, «клик-химия») оказалась весьма эффективным инструментом для разработки лекарственных агентов и в медицинской химии. Молекулы, содержащие 1,2,3-триазольные фрагменты, демонстрируют широкий спектр биологической активности, включая противоопухолевое, антибактериальное, фунгицидное и противовирусное действие. В частности, этот подход нашёл широкое применение в синтезе биологически активных стероидов и терпеновых соединений. Особое внимание уделяется производным артемизинина, природного сесквитерпенового лактона с выраженной противомалярийной активностью. Отмечено, что триазолил-связанные гибриды артемизинина и его производных обладают высокой цитотоксичностью и эффективностью в отношении мультирезистентных штаммов малярии, вирусов гепатита и цитомегаловируса человека.

В настоящей работе мы применили реакцию CuAAC для синтеза нового 1,2,3-триазолил-содержащего гликогоньюгата артесуновой кислоты. В качестве исходных соединений использовали предварительно синтезированные пропаргиловый эфир артесуновой кислоты **1** и азид пер-*O*-ацетилированной β -D-лактозы **2**. Реакция протекала в присутствии каталитических количеств $\text{Cu}_2\text{SO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$ и аскорбата натрия в CH_2Cl_2 при комнатной температуре с получением целевого соединения **3** с выходом 89 %. Структура нового соединения подтверждена данными ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии.

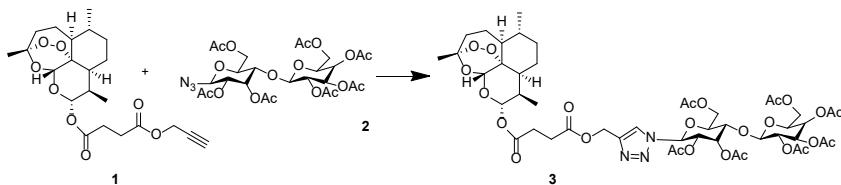


Схема 1. Реагенты и условия: $\text{Cu}_2\text{SO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$, аскорбат натрия, CH_2Cl_2 , комн. т., 8 ч.

Оценка противовирусной активности *in vitro* соединения 3 вывела его значительный ингибирующий эффект в отношении псевдовируса SARS-CoV-2 ($\text{EC}_{50} = 1.5 \mu\text{M}$).

Работа выполнена по теме Госзадания № 125020601629-0.

© Смирнова А.А., Третьякова Е.В., 2025

УДК 547.567.4:547.913.6

СИНТЕЗ МЕРОТЕРПЕНОВ, СОДЕРАЩИХ ФРАГМЕНТ 1,2-НАФТОХИНОНА, НА ОСНОВЕ ЛЕВОПИМАРОВОЙ КИСЛОТЫ

Смыслов А.М., Немтарев А.В., Миронов В.Ф.

ФИЦ КазНЦ РАН Институт органической и физической химии им.

А.Е. Арбузова, Казань, Россия

Хиноны широко распространены в природе, в том числе в виде меротерпенов (природных или полусинтетических соединений, содержащих терпеновые фрагменты). Известен обширный ряд меротерпенов, содержащих хинонный фрагмент, обладающих широким спектром биологической активности, к примеру, противовоспалительной, антиоксидантной, противовирусной, антибактериальной и цитотоксической [1]. В связи с этим представляется интересным синтез новых меротерпенов, содержащих 1,2-нафтохинонное ядро.

В качестве объекта исследования нами была выбрана левопимаровая кислота (ЛПК) 1, в большом количестве (до 27 мас.%) содержащаяся в живице сосны обыкновенной *Pinus silvestris L.* [2]. Известно, что ЛПК с легкостью вступает в реакции циклоприсоединения с хинонами, в частности, взаимодействие ЛПК 1 с 1,2-нафтохиноном было продемонстрировано еще Б.А. Арбузовым [3]. В данной работе были получены аддукты ЛПК 1 с 1,2-нафтохиноном 2a и 6-бром-1,2-нафтохиноном 2b. Показано, что дикетоны 2 в достаточно мягких условиях подвергаются окислению с образованием хинонов 3.

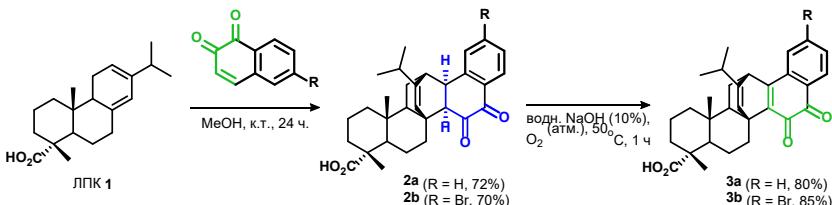


Схема 1. Синтез аддуктов ЛПК с 1,2-нафтохинонами и их окисление.
Работа выполнена при поддержке РНФ № 25-23-00706.

Литература

- Tian X.-H., Hong L.-L., Jiao W.-H., Lin H.-W. Natural sesquiterpene quinone/quinols: chemistry, biological activity, and synthesis // Nat. Prod. Rep., 2023, V. 40, P. 718.
- Толстиков Г.А., Толстикова Т.Г., Шульц Э.Э., Толстиков С.Е., Хвостов М.В. Смоляные кислоты хвойных России. Химия, фармакология. – Новосибирск: Гео, 2011. – 311 с.
- Арбузов Б.А. О некоторых производных левопимаровой кислоты // Журн. Общ. Химии, 1942, Т. 7–8, С. 343.

© Смыслова А.М., Немтарев А.В., Миронов В.Ф., 2025

УДК 547.821.2: 544-971.62: 577.322.23

СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 2-ПИРИДОНА С ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ПРОТИВОВИРУСНОЙ АКТИВНОСТЬЮ

Сорокина В.А., Ковальская А.В., Цыпышева И.П.

Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Аденовирусная инфекция представляет собой заболевание с разнообразными клиническими проявлениями (респираторная патология, кишечные расстройства, передающиеся воздушно-капельным, алиментарным, контактно-бытовым и внутриутробным путями передачи вируса) [1]. Как правило, у иммунокомпетентных пациентов заболевание протекает легко, но у для людей с иммунодефицитами оно представляет серьезную угрозу [2], приводя к тяжелым гепатитам, кератоконыктиvitам, пери- и миокардитам, менингоэнцефалитам, вплоть до летального исхода [3, 4]). Необходимо отметить, что этиотропных лекарственных средств для лечения аденоvирусной инфекции до сих пор не существует, оно сводится лишь к симптоматической терапии. Недавно нами показано [5], что отдельные аддукты Дильса-Альдера N-замещенных 2-пиридинов с N-замещенными имидами малеиновой кислоты способны умеренно ингибировать репродукцию аденоvируса человека 5 типа (AdV5) (рисунок 1).

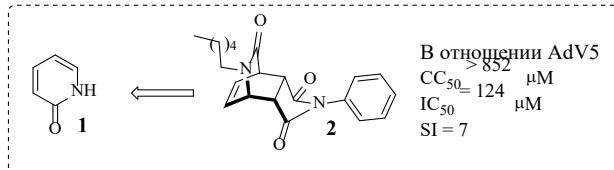
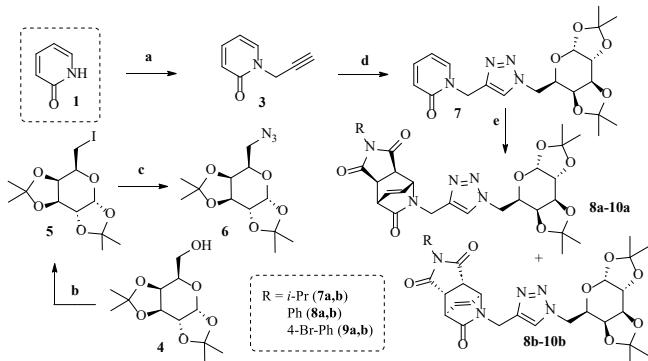


Рис. 1. Аддукт Дильса-Альдера, полученный из 2-пиридона **1**, с антиаденовирусной активностью

С целью разработки новых антиаденовирусных агентов осуществлен синтез конъюгатов гетероциклической субъединицы изоиндольной природы с сахарами путем превращения 2-пиридона **1** в пропаргильное производное **3**, которое далее было вовлечено в катализируемое медью 1,3-диполярное циклоприсоединение (CuAAC) с азидом **6** в условиях, представленных на схеме 1. Углеводсодержащий азид **6**, в свою очередь, получен из спирта **4** действием I_2 в присутствии $PPPh_3$ и имидазола в толуоле (йодид **5**) и, далее, реакцией **5** с NaN_3 в ДМФА ($80\text{--}90^\circ C$) (схема 1). Генерация тетрагидроизоиндольного фрагмента реализована реакцией Дильса-Альдера триазола **7** с замещенными имидами малеиновой кислоты. В результате получены диастереомерные пары α -эндо и β -эндо аддуктов **8a-10a** и **8b-10b** в соотношении 1:1, содержащие трициклический гетероциклический фрагмент и углеводную субъединицу, связанные триазольным линкером.

Схема 1



Реагенты и условия: а) пропаргил бромистый, K_2CO_3 , ацетон, кипячение; б) I_2 , $PPPh_3$, имидазол, толуол, $70^\circ C$; в) NaN_3 , ДМФА, $80\text{--}90^\circ C$; д) азид **5**, $NaAsc$, $CuSO_4 \cdot H_2O$, $t\text{-BuOH}:H_2O=1:1$, $45^\circ C$; е) имид малеиновой кислоты, толуол, $110^\circ C$.

Литература

- Arnold A., Mac-Mahon E. Adenovirus infections // Medicine. – 2021. – Vol. 49(12). – P. 790.

2. Munoz F.M., Piedra P.A., Demmler G.J. Disseminated adenovirus disease in immunocompromised and immunocompetent children // Clin. Infect. Dis. – 1998. – Vol. 27(5). – P. 1194.
3. Rosario R.F., Kimbrough R.C., Van Buren D.H., Laski M.E. Fatal adenovirus serotype-5 in a deceased-donor renal transplant recipient // Transpl. Infect. Dis. – 2006. – Vol. 8(1). – P. 54.
4. Abarca V.K., Le Corre P.N., Perret P.C., Wietstruk P.A., Oddó B.D., Barriga C.F. Disseminated and fatal adenovirus infection in an immunocompromised child // Rev. Chilena Infectol. – 2008. – Vol. 25(2). – P. 127.
5. Сорокина В.А., Ковальская А.В., Лобов А.Н., Ильина П.А., Зарубаев В.В., Цыпышева И.П. Аддукты Дильса-Альдера N-замещенных 2-пиридинов с малеинимидами. Синтез и противовирусная активность // Журнал общей химии. – 2024. – Т. 94(6). – С. 691.

Работа выполнена при поддержке РНФ, проект № 24-23-00363 «Синтез и исследование противовирусной активности производных тритерпеновых кислот солодки и хинолизидиновых алкалоидов термопсиса как ингибиторов аденоовирусов».

© Сорокина В.А., Ковальская А.В., Цыпышева И.П., 2025

УДК 547.72:547.279

НОВЫЕ ОКСАТИАМАКРОЦИКЛЫ НА ОСНОВЕ 2(5*H*)-ФУРАНОНА И ДИТИОЛА: СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ

Тимербаева Г.Р.¹, Раббаниева Э.С.¹, Герасимова Д.П.², Чембулатова М.А.¹, Лодочникова О.А.², Хабибрахманова А.М.¹, Курбангалиева А.Р.¹

¹Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

²Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова –
ОСП ФИЦ КазНЦ РАН, Казань, Россия

Растущий интерес к целенаправленному синтезу новых макроциклов со смешанным набором донорных атомов (O, S, N) обусловлен их важной ролью в супрамолекулярной химии, катализе и медицине. Соединения, содержащие биологически активный фрагмент 2(5*H*)-фуранона, являются перспективными объектами для создания функциональных материалов, молекулярных сенсоров и лигандов с заданными комплексообразующими свойствами. Изучение их строения и реакционной способности открывает пути к направленному конструированию различных новых производных с регулируемой электронной плотностью и стереохимией, что имеет фундаментальное значение для развития супрамолекулярной и медицинской химии.

Для построения макроциклов в качестве ключевого субстрата был выбран бис-эфир, который синтезировали из 5-гидрокси-3,4-дихлор-2(5*H*)-фуранона и пропан-1,3-диола в условиях кислотного катализа.

Далее при взаимодействии бис-эфира с дитиолами (2,2'-оксидаизантантиол, этан-1,2-дитиол, пропан-1,3-дитиол) в присутствии карбоната цезия в условиях высокого разбавления в ДМФА получены новые оксатиамакроциклические соединения состава 1+1, несущие два γ -лактонных фрагмента. Оксатиамакроциклы выделены в виде индивидуальных *dl*- и *мезо*-диастереомеров и далее вовлечены в реакции окисления *m*-хлорнадбензойной кислотой при пониженной температуре. Методом колоночной хроматографии выделены целевые моно- и дисульфинильные производные макрогетероциклов. Строение всех новых стереоизомерно чистых производных 2(5*H*)-фуранона подтверждено методами спектроскопии ИК, ЯМР ^1H и ^{13}C . Молекулярная структура большинства оксатиамакроциклов и продуктов их окисления охарактеризована методом рентгеноструктурного анализа.

Исследование выполнено при поддержке РНФ (№ 24-73-00261, <https://rscf.ru/project/24-73-00261>).

© Тимербаева Г.Р., Раббаниева Э.С., Герасимова Д.П., Чембулатова М.А., Лодочникова О.А., Хабибрахманова А.М., Курбангалиева А.Р., 2025

УДК 547.3

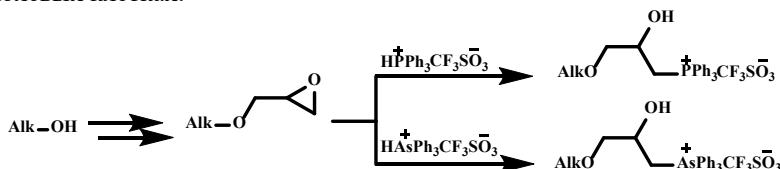
СИНТЕЗ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ Р- И As СОЛЕЙ, СОДЕРЖАЩИХ АЛКИЛОКСИПРОПИЛЬНЫЙ ФРАГМЕНТ – МОДИФИКАТОРОВ ЛИПИДНЫХ СИСТЕМ

Титов Е.А., Немтарев А.В., Паширова Т.Н., Миронов В.Ф.

Институт органической и физической им. А.Е. Арбузова ФИЦ Казанский научный центр РАН, Казань, Россия

Онкологические заболевания являются лидирующими по причинам летальных исходов в России. При этом значительный вклад в смертность вносят побочные эффекты противоопухолевых препаратов, оказывающих общетоксическое действие на организм. Поэтому разработка новых подходов, каким является таргетная терапия, является актуальным междисциплинарным направлением.

Инкапсулирование противоопухолевых лекарственных веществ в липосомальные формы позволяет увеличить их биодоступность, снизить концентрацию и токсическое действие. Направленная модификация векторными функциями липосомальных систем обеспечивает их адресность действия и приводит к селективной индукции апоптоза в опухолевых клетках.



Соединения были получены селективным раскрытием алкилглицидиловых эфиров в мягких условиях Р – Н фосфониевыми и арсониевыми солями с высокими выходами (Схема реакции). Создание липосомальных систем, модифицированных синтезируемыми соединениями, обеспечивало снижение их токсичности (на порядок) в отношении нормальной клеточной линии Wi-38 при сохранении их цитотоксического действия в отношении опухолевой клеточной линии PC3.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ 25-23-00617.

Литература

1. Mironov V. F. et al. Rational design 2-hydroxypropylphosphonium salts as cancer cell mitochondria-targeted vectors: Synthesis, structure, and biological properties //Molecules. – 2021. – Т. 26. – №. 21. – С. 6350.
2. Tsepaeva O. V. et al. Novel triphenylphosphonium amphiphilic conjugates of glycerolipid type: synthesis, cytotoxic and antibacterial activity, and targeted cancer cell delivery //RSC Medicinal Chemistry. – 2023. – Т. 14. – №. 3. – С. 454–469.

© Титов Е.А., Немтарев А.В., Паширова Т.Н., Миронов В.Ф., 2025

УДК 547.841+54.44

УСТАНОВЛЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ДОБАВОК ПОРИСТОГО
УГЛЕРОДСОДЕРЖАЩЕГО МАТЕРИАЛА НА СЕЛЕКТИВНОСТЬ
ОБРАЗОВАНИЯ 4,4-ДИМЕТИЛДИОКСАНА-1,3
ИЗ 2-МЕТИЛПРОПЕНА

Тухватшин В.С., Кузнецов В.А., Исмагилов Р.Р., Фаттахов А.Х.,
Бакулин И.В., Талипов Р.Ф.

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Нами были проведены опыты по выявлению влияния пористости углеродсодержащего материала на селективность образования целевого ДМД [1] в реакции 2-метилпропена с водным формальдегидом (Таблица). В качестве углеродсодержащего пористого материала были взяты искусственно приготовленные смеси, содержащие полиариленфталид (непористый углеродсодержащий материал) и пористый стеклоуглерод.

Таблица 1

Влияние добавок пористого углеродсодержащего материала на селективность образования и выход ДМД из 2-метилпропена (время реакции 2 ч, содержание углеродсодержащего материала ~ 5 мас%, давление 0,5-0,6 МПа, температура реакции 75°C, мольное соотношение *изо*-C₄H₈ : CH₂O = 1 : 2).

| Материал | | Выход ДМД, мас% | Конверсия CH ₂ O, мас% | Селективность ДМД, мас% |
|-------------------|---------------|-----------------|-----------------------------------|-------------------------|
| Содержание мас% | | | | |
| Полиарилен фталид | Стеклоуглерод | | | |
| 100 | 0 | 50 | 72 | 68 |
| 70 | 30 | 53 | 75 | 71 |
| 50 | 50 | 56 | 73 | 76 |
| 30 | 70 | 60 | 71 | 87 |
| 0 | 100 | 73 | 74 | 99 |

В результате проведенных экспериментов показано, что уменьшение содержания (мас%) стеклоуглерода (пористого углеродсодержащего материала) и, наоборот, возрастание полиариленфталида (не пористого углеродсодержащего материала) в составе (ко)катализатора, приводит к значительному снижению выхода и селективности образования ДМД (~ до 53 мас%). Конверсия по формальдегиду практически не изменяется.

Литература

1. Платэ Н.А., Сливинский Е.В. Основы химии и технологии мономеров. М: Наука, 2002, 696 с.

© Тухватшин В.С., Кузнецов В.А., Исмагилов Р.Р., Фаттахов А.Х., Вакулин И.В., Талипов Р.Ф., 2025

УДК 547.917.

СИНТЕЗ δ-ЛАКТОНОВ НА ОСНОВЕ ЛЕВОГЛЮКОЗЕНОНА

Улмасбаева З.А.¹, Халилова Ю.А.², Файзуллина Л.Х.²

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

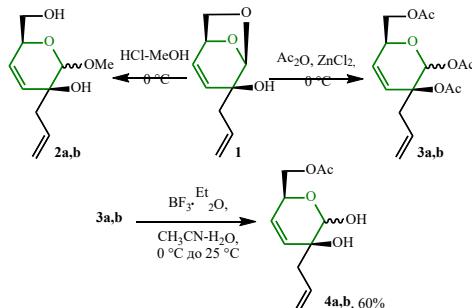
²Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

В природе существует огромное количество гетероциклических молекул, которые участвуют во всех видах биохимических процессов, проявляя ценную биологическую активность. Некоторые из них входят в структуру лекарственных препаратов. К таким соединениям относятся α-пироны (2-пироны), которые являются фармакофорными фрагментами многих природных и синтетических биологически активных веществ [1]. Несмотря на большое количество методов получения α-пиронов [2],

разработка новых подходов из доступных объектов является актуальной задачей.

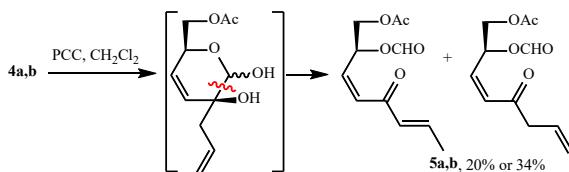
В данной работе в качестве исходного соединения для синтеза пиронов мы использовали аллилпроизводное левоглюкозенона [3]. С этой целью в аддукте **1** 1,6-ангидромостик раскрыли двумя способами – HCl-MeOH и Ac₂O-ZnCl₂. Гидролиз ацетатов в соединение **3a,b** осуществили действием BF₃-Et₂O (Схема 1).

Схема 1



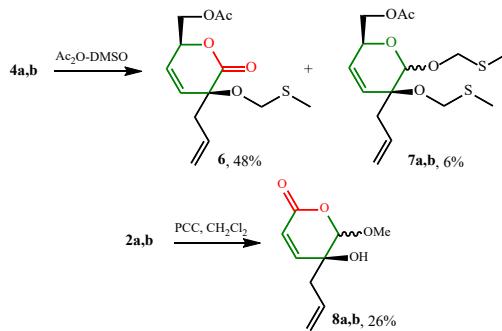
При окислении лактолов **4a,b** действием PCC или реагентом Десса-Мартина вместо желаемого лактона была выделена смесь региоизомерных формиатов **5a,b** (Схема 2).

Схема 2



Целевой лактон **6** удалось получить в условиях окисления Ac₂O-DMSO. На основе метоксипроизводных осуществлен синтез диастериомерных пиронов **8a,b** действием PCC аналогичного строения в работе [4] (Схема 3).

Схема 3



Таким образом, на основе доступной хиральной молекулы левоглюкозенона разработаны удобные синтезы фармакоперспективных α -пиронов, содержащие в своей структуре эндо-двойные связи, метилтиометильную и метоксигруппы.

Анализы выполнены на оборудовании ЦКП «Химия» УФИЦ РАН и РЦКП «Агидель» УФИЦ РАН. Работа выполнена по теме госзадания № 125020601627-6.

Литература

1. Bhat Z. Sh., Rather M. A., Maqbool M., Lah H. UL, Yousuf S. Kh., Ahmad Z. α -pyrones: Small molecules with versatile structural diversity reflected in multiple pharmacological activities-an update // Biomed. Pharmacother. – 2017. – V. 91. P.265–277.
2. Dobler D., Leitner M., Moor N., Reiser O. 2-Pyrone – A Privileged Heterocycle and Widespread Motif in Nature // Eur. J. Org. Chem. – 2021. – P. 6180–6205.
3. Karamysheva L. Sh., Khalilova Yu. A., Salikhov Sh. M., Faizullina L. Kh. Synthesis and Some Features of 1,6-Anhydro Bridge Opening in 1,2-Adducts of Levoglucosenone // Russ. J. Gen. Chem. – 2025. – V. 95. P. 1323–1330.
4. Faizullina, L.K., Khalilova, Y.A., Salikhov, S.M. Valeev F. A. Reverse ketal-acetal rearrangement of levoglucosenone and cyclohexanone Michael adducts and the possibilities of its use in the synthesis of native topology lactones // Chem. Heterocycl. Comp. – 2019. – V. 55. P. 612–618.

© Улмасбаева З.А., Халилова Ю.А., Файзуллина Л.Х., 2025

УДК 547.8 53.3

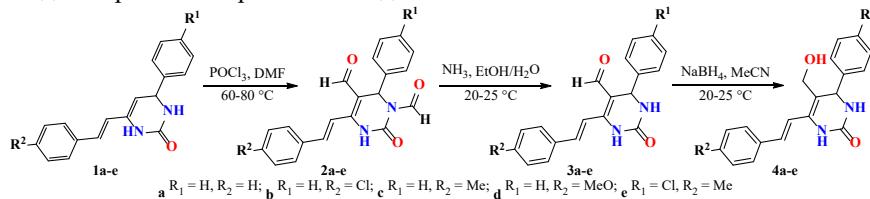
МОДИФИКАЦИЯ 6-СТИРИЛДИГИДРОПИРИМИДИНОНОВ ПО С-5 ПОЛОЖЕНИЮ

Урядова А.М., Макарова Е.С., Филимонов С.И.

*Ярославский государственный технический университет,
Ярославль, Россия*

Стирильный фрагмент представляет собой важный структурный элемент в модификации лекарственных молекул, поскольку его введение приводит к повышению липофильности и биодоступности соединений, что влияет на их биологическую активность [1]. Высокая метаболическая стабильность данного фрагмента в биологических средах позволяет рассматривать его в качестве фармакофора для получения соединений с разнообразной активностью, включая противовоспалительную и антибактериальную [2, 3]. Настоящее исследование направлено на модификацию известных 4-арил-6-стирилдигидропиримидинонов [4] с целью получения новых производных с улучшенными фармакологическими характеристиками. Кроме того, синтезированные соединения могут выступать перспективными субстратами для последующего синтеза конденсированных гетероциклических систем.

При обработке 6-стирилдигидропиrimидинонов **1** трёхкратным мольным избытком хлорокиси фосфора в ДМФА при 60–80 °C в течение 40 мин наблюдалось селективное образование дикарбальдегидов **2** с выходом до 76%. Последующее *N*-деформилирование полученных соединений в условиях 16-кратного избытка аммиака при 20–25 °C позволило получить монокарбальдегиды **3** с выходом до 82%. Для дальнейшего изучения монокарбальдегидов **3** нам удалось восстановить их до спиртов **4** с хорошим выходом 77–84%.



Точное расположение функциональных групп 4-арил-5-гидроксиметил-6-стирилдигидропиrimидинонов **4** подтверждено данными NOESY-спектроскопии на основании кросс-пиков протонов гидроксиметильной группы с протонами фенильного заместителя и протоном при двойной связи (рис. 1).

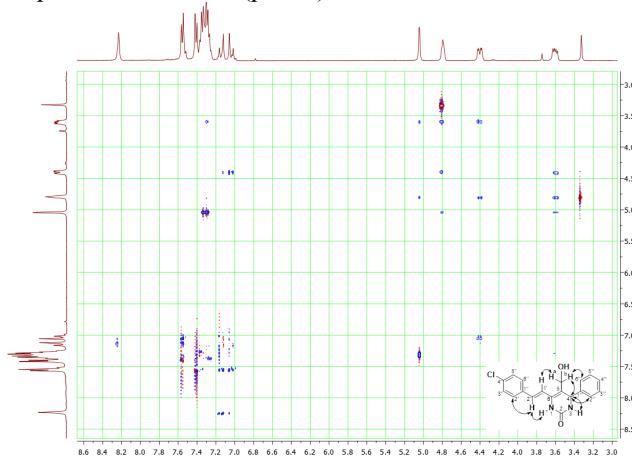


Рис. 1. NOESY-спектр соединения **4b**

Структура синтезированных соединений **2–4** была подтверждена методами ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии, а также на основании данных PCA для структуры **3c** (рис. 2) [5].

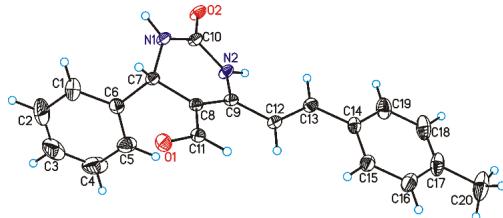


Рис. 2. Общий вид молекулы **3с** в представлении атомов эллипсоидами тепловых колебаний с 50%-ной вероятностью

Литература

1. Bhurta D., Bharate S.B. ChemMedChem. 2022, 17, e202100706.
2. Shaikh A., Meshram J. J. Heterocycl. Chem. 2016, 53, 1176.
3. Nepomuceno G.M., Chan K.M., Huynh V., Martin K.S., Moore J.T., O'Brien T.E., Shaw J.T. ACS Med. Chem. Lett. 2015, 6, 308.
4. Shutalev A.D., Aksenov A.N. Mendeleev Commun. 2005, 15, 73.
5. Урядова А.М., Макарова Е.С., Филимонов С.И., Чиркова Ж.В., Супоницкий К.Ю. Изв. АН. Сер. хим. 2025, 74 (5), 1421.

© Урядова А.М., Макарова Е.С., Филимонов С.И., 2025

УДК 547.1'1

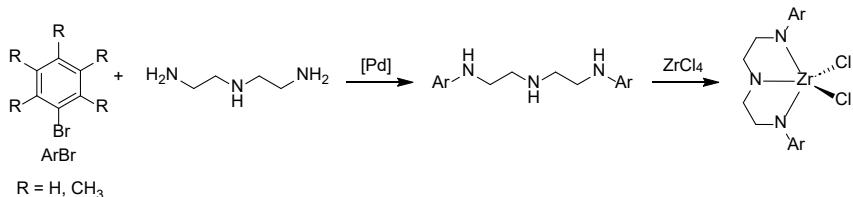
СИНТЕЗ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ЛИГАНДОВ И ИХ КОМПЛЕКСОВ С ЦИРКОНИЕМ ДЛЯ ПРОМЫШЛЕННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ

Федотова Е.А., Отвагин В.Ф., Федоров А.Ю.

ННГУ им. Н.И. Лобачевского, Нижний Новгород, Россия

В последние годы синтез катализаторов имеет ключевое значение для отечественной промышленности, особенно в контексте производства современных катализаторов для полимеризации. Разработка собственных эффективных соединений позволяет существенно снизить зависимость от импортных материалов и технологий, что особенно актуально в условиях необходимости импортозамещения.

Нами произведен синтез ряда азотсодержащих лигандов и их циркониевых комплексов, подобраны оптимальные условия данных реакций, а также произведено масштабирование реакций до граммовых количеств.



Литература

1. Beletskaya, I. P., Bessmertnykh, A. G., Averin, A. D., Denat, F., Guillard, R. Palladium-Catalyzed Arylation of Linear and Cyclic Polyamines. – European journal of organic chemistry. – 2005. – Т. 2005. – №. 2. – С. 261–280.

© Федотова Е.А., Отвагин В.Ф., Федоров А.Ю., 2025

УДК54.057

СИНТЕЗ СЕМИКАРАБАЗОНА ЦИАНУРОВОЙ КИСЛОТЫ

Хабеева А.Н., Лендяева Д.А., Карасева И.Н., Попова Ю.В.

*Самарский государственный технический университет,
Самара, Россия*

s-Триазины (симметричные) представляют собой класс гетероциклических соединений, которые используют как противоопухолевые препараты, пестициды, отбеливатели, красители, фунгициды, взрывчатые вещества и т.д. [1]. Сама циануровая кислота (2,4,6-тригидрокси-1,3,5-триазин), как представитель *s*-триазинов, является ключевым промежуточным соединением для синтеза многих органических продуктов: эпоксидные смолы, антиоксиданты, красители, противоопухолевые препараты и многие другие [2].

В связи с проблемами поставок зарубежных реагентов, все более актуальным становится задача возобновления НИР по синтезу отечественных триазиновых соединений российского производства [3].

В данной работе проведен синтез циануровой кислоты по методике [4]. Перекристаллизацию продукта проводили из воды. Выход продукта 0,52 г (62%), $T_{пл.}=320\text{--}330^\circ\text{C}$ (с разл.). Следующей стадией являлось получение семикарбазона циануровой кислоты, где реакционную смесь выдерживали в течение суток при комнатной температуре, а полученный осадок очищали перекристаллизацией из смеси бензол-ацетон (1:1). Выход полученного продукта составил 67 %, $T_{пл.}=320\text{--}330^\circ\text{C}$ (с разл.). Данные подтверждены методами ИК-спектрометрии [5].

Таким образом, синтезированы перспективные продукты, способствующие решению задач импортозамещения важных полупродуктов органического синтеза.

Литература

1. Горбатова О.Н., Жердев А.В., Королева О.В. Триазиновые пестициды: структура, действие на живые организмы, процессы деградации // Успехи биологической химии. – 2006. – Т. 46. – С. 323-348.
2. SheD.-M., YuH.-L. HuangQ.-L. et al. Liquid-phase synthesis of cyanuric acid from urea // Molecules. 2010. – V. 15. P. 1898-1902.
3. Курылев А.Ю., Правдина А.И. Физико-химические основы синтеза меламина // Башкирский химический журнал. – 2008. Т. 15. – № 4. – С. 70-74.

4. Бакибаев А.А., Мамаева Е.А., Яновский В.А., и др. Препаративные методы синтеза азотсодержащих соединений на основе мочевин. Томск: Аграф-Пресс, 2007. – 164 с.
5. Ганиев Б.Ш., Умаров Б.Б., Холикова Г.К., и др. Синтез, строения, таутомерия и исследование некоторых квантово-химических параметров соединения 2-(4,6-диоксо-1,3,5-триазинан-2-илиден)гидразинкарбоксиамида // Евразийский Союз Ученых. 2020. – Т.76. – № 7. – С. 65-68.

© Хабеева А.Н., Лендеяев Д.А., Карасева И.Н., Попова Ю.В., 2025

УДК 547-311

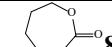
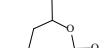
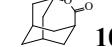
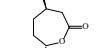
ОКИСЛЕНИЕ ЦИКЛОГЕКСАНОНОВ РЕАГЕНТОМ НУК-15
ПО БАЙЕРУ-ВИЛЛИГЕРУ

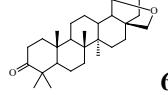
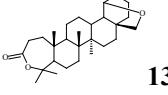
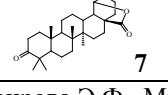
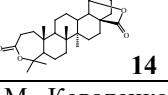
Хаирова Э.Ф.¹, Миннибаева Э.М.¹, Коваленко А.А.²,
Выдрина В.А.², Яковлева М.П.²

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Удобным методом получения лактонов является окисление кетонов по Байеру-Виллигеру различными надкислотами – мононадфталевой, надбензойной и некоторыми другими, в большинстве же случаев используют *мета*-хлорнадбензойную кислоту. Последняя является импортным продуктом и в настоящее время из-за санкций на территорию РФ не продается. Нами для окисления предлагается промышленно доступный реагент НУК-15, производимый отечественными химическими предприятиями и широко используемый как дезинфицирующее средство на предприятиях пищевого и медицинского назначении, а также в быту. Препарат НУК-15 представляет из себя водный раствор 15%-ной надуксусной кислоты (НУК) и 20%-ной H₂O₂. Окисление проводилось после экстрагирования смеси НУК и H₂O₂ из воды в CH₂Cl₂ с добавлением Na₂CO₃ для предотвращения раскрытия лактонов. Окисление кетонов (1-7) протекало региоспецифично с высокими выходами.

| № | Исходный кетон | Продукт реакции | Выход, % |
|---|---|---|----------|
| 1 |  |  | 86 |
| 2 |  |  | 80 |
| 3 |  |  | 80 |
| 4 |  |  | 95 |

| | | | |
|---|---|---|----|
| 5 |  |  | 98 |
| 6 |  |  | 90 |
| 7 |  |  | 88 |

© Хаирова Э.Ф., Миннибаева Э.М., Коваленко А.А., Выдрина В.А., Яковлева М.П., 2025

УДК 547.789.6:547.859

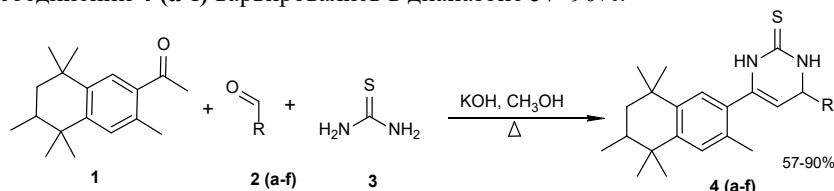
6-АЦЕТИЛ-1,1,2,4,4,7-ГЕКСАМЕТИЛТЕТРАЛИН В СИНТЕЗЕ НОВЫХ ФОСФОНИЛИРОВАННЫХ ТИАЗОЛО[3,2-*a*]ПИРИМИДИНОВ

Хворов В.Н., Скрылькова А.С., Егоров Д.М.

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

Пиридин и его производные привлекают огромное внимание исследователей, благодаря широкому спектру биологической активности. Но данные соединения обладают низкой растворимостью, данную проблему можно решить введением фосфорного фрагмента, который приводит к повышению растворимости и расширению спектра биологической активности, поэтому синтез новых фосфорорганических соединений интересен для учёных.

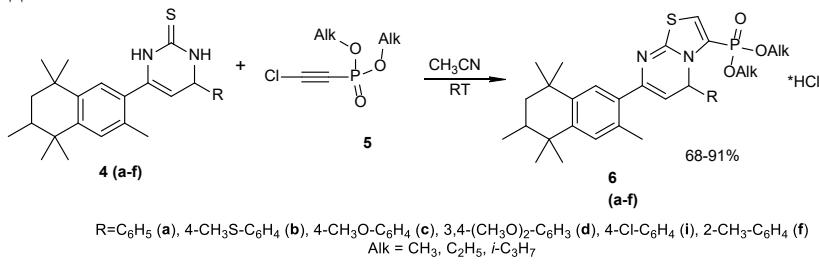
Дигидропиридины были получены взаимодействием 6-ацетил-1,1,2,4,4,7-гексаметилтетралина **1** с соответствующими ароматическими альдегидами **2 (a-f)** и тиомочевиной **3** в присутствии избытка гидроксида калия при кипячении в метаноле в течение 4–5 часов. Выходы соединений **4 (a-f)** варьировались в диапазоне 57–90%.



R=C₆H₅ (**a**), 4-CH₃S-C₆H₄ (**b**), 4-CH₃O-C₆H₄ (**c**), 3,4-(CH₃O)₂-C₆H₃ (**d**), 4-Cl-C₆H₄ (**e**), 2-CH₃-C₆H₄ (**f**)

Фосфонилирование осуществляли взаимодействием хлорацетиленфосфанатов **5** с соответствующими 3,4-дигидропиридин-2(*I*H)-оними **4 (a-f)** в среде безводного ацетонитрила. Время протекания

реакции составляло 8–16 часов. Выходы продуктов **6** (**a–f**) варьировались в диапазоне 68–91%.



Строение полученных соединений подтверждено методом ЯМР-спектроскопии на ядрах ^1H , ^{13}C , ^{31}P и масс-спектроскопии.

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (FSEN-2023-0002) с использованием оборудования Инженерного центра Санкт-Петербургского государственного технологического института

© Хворов В.Н., Скрылькова А.С., Егоров Д.М., 2025

УЛК 546.185 + 547.787.1

СИНТЕЗ 3-МЕТИЛ-1Н-2-ОКСА-4А,9-ЛИАЗОФЛУОРЕНА

Цикалов В.В., Чалова Е.С., Цикалова В.Н., Полдубов А.И.

Институт биохимических технологий, экологии и фармации, ФГАОУ ВО «КФУ им. В.И. Вернадского», Симферополь, Россия

В нашей работе циклическое соединение 3-метил-1Н-2-окса-4а,9-диазофлуорен был получен двумя разными путями. В первом случае происходила конденсация между 2-гидроксиметилбензимидазолом и пропаргилбромидом, взятыми в эквимолярных количествах, в щелочной среде при нагревании смеси в толуоле (рис.1) [1]. После обработки и выделения вещества **2** выход его составил 57%.



Рис. 1. Схема образования 3-метил-1Н-2-окса-4a,9-диазофлуорена прямым методом.

Во втором случае 1-пропаргилбензимидазол **3** подвергался изомеризации по принципу ацетилен-алленовая перегруппировка в щелочных условиях. Первоначально в реакционной смеси образовывалась смесь, состоящая из алленового производного **4** и циклического **2**, что было доказано методом ПМР-спектроскопии после разделения смеси. С целью выявления закономерностей данного

процесса нами было изучено поведение 1-пропадиенил-2-гидроксиметилбензимидазола **4** при кипячении в растворе спирта в щелочи (рис.2). Было установлено, что в результате 4-часового кипячения 1-пропадиенил-2-гидроксиметилбензимидазола **4** в щелочных условиях происходит внутримолекулярная конденсация с образованием трициклического производного **2**.

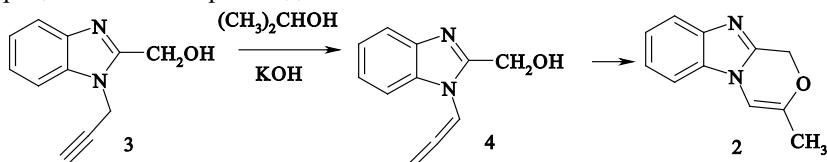


Рис. 2. Схема ацетилен-алленовой перегруппировки с последующей циклизацией
Литература

- Пожарский А.Ф., Симонов А.М. Синтез бензимидазолов / Журнал общей химии. – 1963. – Т. 33. – С. 17-181.
- © Цикалов В.В., Чалова Е.С., Цикалова В.Н., Поддубов А.И., 2025

УДК 546.185 + 547.787.1

СИНТЕЗ РЯДА БЕНЗИМИДАЗОЛОВ НА ОСНОВЕ ФЕНОКСИУКСУСНЫХ КИСЛОТ

Цикалова В.Н., Гусейнова У.Р., Баевский М.Ю., Поддубов А.И.
Институт биохимических технологий, экологии и фармации, ФГАОУ ВО «КФУ им. В.И. Вернадского», Симферополь, Россия

Известно, что среди наиболее эффективных гербицидов, то есть веществ, которые существенно замедляют рост растений и микроорганизмов, в настоящее время используются как феноксиуксусная кислота, так и ряд её производных. К таким веществам, в частности, относятся 2,4-дихлорфеноксиуксусная и 2-метил-4-хлоруксусная кислоты [1]. Однако мало изученным является вопрос о биологическом воздействии бензимидазольных соединений, содержащих остатки феноксиуксусной кислоты и её модификаций.

В нашей работе проводился синтез ряда бензимидазолов на основе различных феноксиуксусных кислот **2 а-з** методом конденсации их с 1,2-фенилдиамином в условиях сплавления в присутствии ортоборной кислоты при температуре 150°C (рис.1) [2]. После обработки и выделения методом кристаллизации выходы продуктов **3 а-з** составили 78% – 87%.

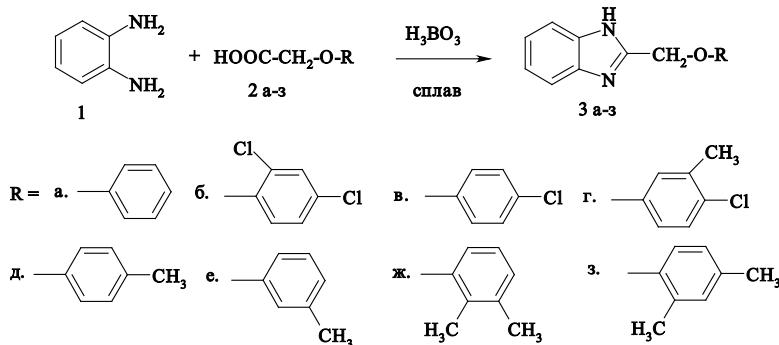


Рис. 1. Схема синтеза ряда бензимидазолов 2 а-з.

Литература.

- Кретович В.Л. Основы биохимии растений. – М.: Высшая школа, 1971. – С. 190-191.
- Баевский М. Ю., Поддубов А. И., Раваева М. Ю., Цикалов В. В., Цикалова В. Н., Соловьев В. Н. Синтез и расчетная биологическая активность производных 2- α -гидроксиалкилбензимидазола // Ученые записки Крымского федерального университета имени В.И. Вернадского. Биология. Химия. – 2021. – Т. 7 (73). – № 3. – С. 289-296.

© Цикалова В.Н., Гусейнова У.Р., Баевский М.Ю., Поддубов А.И., 2025

УДК 547.72:547.796.1

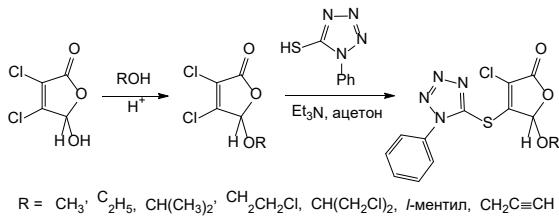
СИНТЕЗ И ПРОТИВОГРИБКОВЫЕ СВОЙСТВА ТЕТРАЗОЛИЛСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ РЯДА 2(5*H*)-ФУРАНОНА И 3-ПИРРОЛИН-2-ОНА

Чарушин Н.С., Сайгитбаталова Е.Ш., Колышкина С.В., Латыпова Л.З.,
Дымов К.А., Каюмов А.Р., Курбангалиева А.Р.

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

Для направленной модификации свойств биологически активных соединений в их структуру все чаще вводится фрагмент тетразола, который способен повышать метаболическую устойчивость, понижать токсичность и влиять на биологическую активность модифицированных соединений. Целью данной работы явилась разработка метода синтеза новых тетразолосодержащих гетероциклов на основе 2(5*H*)-фуранона и 3-пирролин-2-она, а также исследование их противогрибковых свойств.

На первом этапе получена серия псевдоэфиров на основе мукохлорной кислоты и спиртов в условиях кислотного катализа. Далее в γ -лактонный цикл был введен тетразолилсульфанильный фрагмент путем региоселективного тиилирования с участием 5-меркапто-1-фенилтетразола:



Тетразолильный фрагмент был связан напрямую с фураноновым циклом при взаимодействии псевдоэфиров с натриевыми солями 5-фенил- и 5-метилтетразола. В реакциях тетразолилсульфанильных производных 2(5*H*)-фуранона с аммиаком, первичными аминами и аминоспиртами получены соответствующие новые производные ряда 3-пирролин-2-она.

Изучена способность синтезированных соединений подавлять рост бактерий *E. coli* и *S. aureus*, дрожжей *C. albicans*, а также ряда мицелиальных грибов, приводящих к биодеструкции строительных материалов и влажных поверхностей помещений. Определены МПК соединений в отношении бактериальных и грибковых культур. Выявлены 4 гетероцикла, проявившие fungicidную активность по отношению к *A. niger*, *F. solani* и *C. albicans*, 2 тетразола фуранонового ряда показали активность также в отношении грибов *A. alternata*.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (грант № 23-73-10182).

© Чарушин Н.С., Сайгитбаталова Е.Ш., Колышкина С.В.,
Латыпова Л.З., Дымов К.А., Каюмов А.Р., Курбангалиева А.Р., 2025

УДК 547.78, 547.83

СИНТЕЗ 3-АМИНО-4,6-ДИАРИЛФУРО[2,3-*b*]ПИРИДИН-2-КАРБОКСАМИДОВ

Шитиков Н.В., Строганова Т.А., Василин В.К.

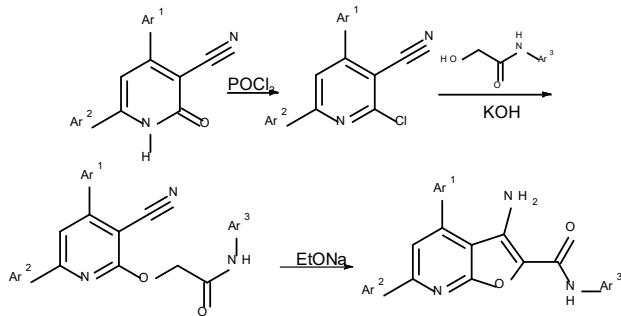
*Кубанский государственный технологический университет,
г. Краснодар, Россия*

Производные 3-аминотиено- и фуро[2,3-*b*]пиридинов на протяжении длительного времени привлекают внимание исследователей, поскольку среди них выявлено много соединений, проявляющих различные виды биологической активности. Кроме того, эти соединения представляют собой хорошо функционализированные структуры, представляющие интерес для изучения разнообразных циклизаций, приводящих к формированию новых полициклических систем. Обычно в реакциях такого типа принимает участие заместитель в положении 2 тиено- и или фуро[2,3-*b*]пиридинового каркаса.

Несмотря на то, что 3-аминофуро[2,3-*b*]пиридины являются гетероаналогами широко известных 3-аминотиенопиридинов, их химические свойства изучены гораздо меньше. Поэтому получение новых представителей этой гетероциклической системы и изучение их трансформаций представляет несомненный интерес.

Продолжая наши исследования в ряду производных 3-аминофуропиридинов, мы синтезировали ряд новых представителей этой гетероциклической системы – 4,6-диарилфуропиридины, используя последовательность реакций, представленную на Схеме 1.

Схема 1



Структуры целевых соединений доказаны с использованием комплекса физико-химических методов анализа, включая ЯМР, ИК спектроскопию.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства образования и науки РФ (проект FZEZ-2023-004).

© Шитиков Н.В., Строганова Т.А., Василин В.К., 2025

УДК 547.491.4 : 547.756

РЕАКЦИИ S-АЛКИЛИРОВАНИЯ 2-ОКСО-1-(2-ОКСОИНДОЛИН-3-ИЛИДЕН)-2-ФЕНИЛЭТАН-1-ТИОЛАТА ТРИЭТИЛАММОНИЯ

Шраменко В.В., Беспалов А.В., Доценко В.В.

Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия

α -Роданокарбонильные соединения являются перспективными исходными реагентами для синтеза S/N-гетероциклов [1]. α -Фенацилроданид, легко доступный по известной методике [2], реагирует с изатином и триэтиламином с образованием функционально замещенного тиолата **1** (Рис.1).

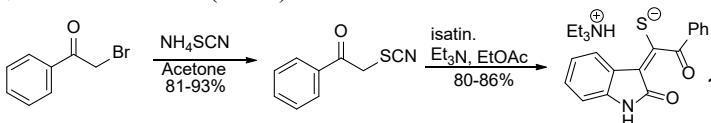


Рис. 1. Синтез исходного 2-оксо-1-(2-оксоАндолин-3-илиден)-2-фенилэтан-1-тиолата триэтиламмония **1**

Тиолат **1** реагирует с линейкой аликирующих агентов с образованием ранее не описанных в литературе продуктов S-алкилирования **2-5**. Строение полученных продуктов подтверждено данными ИК и ЯМР спектроскопии.

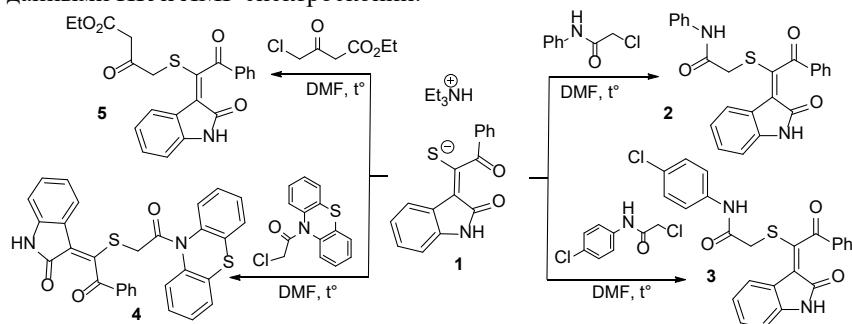


Рис. 2. Синтез новых продуктов S-алкилирования тиолата **1**

Литература

1. Kindop V. K., Bespalov A. V., Dotsenko V. V. α -Thiocyanato ketones in the synthesis of heterocycles (microreview) // Chem. Heterocycl. Compd. – 2024. – Vol. 60. – №. 7. – P. 345-347.
2. Bhalerao D. S., Akamanchi K. G. Mild and efficient method for α -thiocyanation of ketones and β -dicarbonyl compounds using bromodimethylsulfonium bromide–ammonium thiocyanate // Synth. Commun. – 2010. – Vol. 40. – №. 6. – P. 799-807.

© Шраменко В.В., Беспалов А.В., Доценко В.В., 2025

**СИНТЕЗ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ ТЕТРАЛИНОВ
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ 2-АРИЛЦИКЛОРПАН-1,1-
ДИКАРБОКСИЛАТОВ С АРОМАТИЧЕСКИМИ АЛЬДЕГИДАМИ ПОД
ДЕЙСТВИЕМ $TaCl_5$**

Юлбарисов А.Б.¹, Зосим Т.П.², Кадикова Р.Н.², Рамазанов И.Р.²

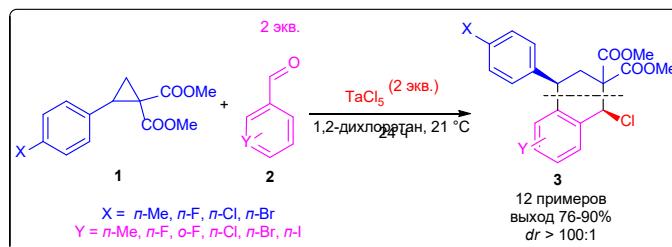
¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Донорно-акцепторные циклопропаны (ДАЦ) нашли широкое применение в органическом синтезе в качестве универсальных строительных блоков для получения карбо- и гетероциклических соединений, в том числе обладающих биологической активностью. Известно, что тетралиновый фрагмент является широко распространенным структурным элементом множества физиологически активных веществ [1].

В настоящей работе разработан однореакторный метод синтеза функционализированных тетралинов – ди- и тригалозамещенных-диалкил-3,4-дигидронапталин-2,2(1Н)-дикарбоксилатов **3**, на основе реакции диметил-2-арилциклопропан-1,1-дикарбоксилатов **1** с производными альдегида **2** в присутствии $TaCl_5$. Установлено, что использование именно $TaCl_5$, в отличие от других кислот Льюиса, обеспечивает формирование тетралинового фрагмента. Строение синтезированных соединений подтверждено данными ЯМР-спектроскопии, масс-спектрометрии и РСА.

Следует подчеркнуть, что наличие атома хлора в тетрагидронапталиновом кольце получаемых продуктов **3** значительно расширяет спектр дальнейших возможных химических превращений. Исключительная стереоспецифичность обнаруженного процесса и проведение реакции в мягких условиях демонстрируют большой синтетический потенциал использования соединений тантала в органическом синтезе.



Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации FMRS-2025-0029. Структурные исследования соединений проведены в Центре коллективного пользования «Агидель» при ИНК УФИЦ РАН.

Литература

- Shah B. M., Kachhadiya R. N. Shaping the future of medicine through diverse therapeutic applications of tetralin derivatives // Medicinal Chemistry Research. – 2025. – Т. 34. – №. 1. – С. 86-113.

© Юлбарисов А.Б., Зосим Т.П., Кадикова Р.Н., Рамазанов И.Р., 2025

УДК 541.14:547.551.2

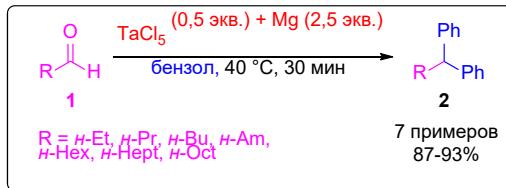
АРИЛИРОВАНИЕ АЛИФАТИЧЕСКИХ АЛЬДЕГИДОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ СИСТЕМЫ РЕАГЕНТОВ $TaCl_5\text{-Mg}$
Юлбарисов А.Б.^{1,2}, Габдуллин А.М.², Кадикова Р.Н.²,
Мозговой О.С.², Рамазанов И.Р.²

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Конденсация ароматических соединений с альдегидами и кетонами является эффективным методом синтеза арильных и алкильных производных бензола с различными структурами, включая 1,1-диарилалканы. Данные структурные фрагменты представляют собой важные фармакофорные группы, широко распространенные в структурах биологически активных соединений [1]. Классический подход к синтезу 1,1-диарильных производных алканов основан на алкилирование ароматических соединений алифатическими альдегидами под действием кислот Льюиса и Бренстеда. Однако, выбор альдегидов в данном методе часто ограничен, а селективность превращений наблюдается умеренной. В связи с этим, разработка новых эффективных методов получения 1,1-диарилканов является актуальной задачей органической химии.

В данной работе описано получение 1,1-дифенилалканов **2** на основе реакции арилирования алкилальдегидов **1** в присутствии 0.5 экв. $TaCl_5$ и 2.5 экв. металлического магния при 40 °C в течение 30 минут. Использование $TaCl_5$, $ZnCl_2$ или $FeCl_3$ в реакции октанала с бензолом при 21 °C в отсутствие металлического магния сопровождается исключительным образованием продукта альдольно-кротоновой конденсации с E-конфигурацией через 4 часа с выходом 28-68 %.



Таким образом нами разработан селективной метод синтеза 1,1-дифенилалканов на основе реакции арилирования алкилальдегидов под действием системы реагентов $\text{TaCl}_5\text{-Mg}$.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации FMRS-2025-0029. Структурные исследования соединений проведены в Центре коллективного пользования "Агидель" при ИНК УФИЦ РАН.

Литература

1. Ameen D., Snape T. J. Chiral 1, 1-diaryl compounds as important pharmacophores // MedChemComm. – 2013. – Т. 4. – №. 6. – С. 893-907.
2. Gabdullin A. M., Kadikova R. N., Mozgovoj O. S., Yulbarisov A. B., Ramazanov, I. R. Arylation of aldehydes under the influence of tantalum (V) chloride and magnesium // Inorganica Chimica Acta. – 2025. – Т. 578. – С. 122540.

© Юлбарисов А.Б., Габдуллин А.М., Кадикова Р.Н.,
Мозговой О.С., Рамазанов И.Р., 2025

УДК 541.14:547.551.2

ТА-КАТАЛИЗИРУЕМОЕ АМИДИРОВАНИЕ ОДНООСНОВНЫХ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ С ПОМОЩЬЮ ФУНКЦИОНАЛЬНО ЗАМЕЩЕННЫХ ПЕРВИЧНЫХ АРОМАТИЧЕСКИХ АМИНОВ

Юлбарисов А.Б.¹, Габдуллин А.М.², Кадикова Р.Н.²,
Мозговой О.С.², Рамазанов И.Р.²

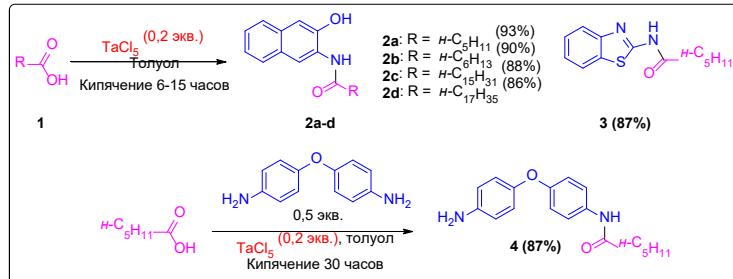
¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Амидная группа является широко распространенной функциональной группой, входящей в структуру множества физиологически активных синтетических и природных молекул, а также биополимеров [1]. Учитывая широкое применение амидов в различных отраслях промышленности, разработка новых эффективных подходов к синтезу амидов различного строения является важной задачей.

В настоящее время нами предложен метод синтеза амидов, позволяющий осуществить селективное амидирование насыщенных и ненасыщенных карбоновых кислот с помощью аминов различного строения в присутствии каталитических количеств хлорида тантала(V)

[2]. В продолжение исследований по Та-катализируемому амидированию карбоновых кислот была изучена реакция одноосновных карбоновых кислот с первичными ароматическими аминами под действием $TaCl_5$. Установлено [3], что реакция насыщенных одноосновных карбоновых кислот с 2.5 экв. бензо[d]тиазол-2-амина в присутствии 0.2 экв. $TaCl_5$ в растворе в толуоле при кипячении сопровождается селективным образованием амидов карбоновых кислот **2a-d** и **3** с высоким выходом. Реакция амидирования гексановой кислоты с 0.5 экв. диамина – 4,4'-оксидианилина, в присутствии 0.4 экв. хлорида тантала(V) приводит к селективному образованиюmonoамида карбоновой кислоты **4** (87%).



Таким образом, нами разработан селективный однореакторный метод синтеза арилзамещенных амидов на основе реакции одноосновных насыщенных карбоновых кислот с функционально замещенными первичными ароматическими аминами в присутствии $TaCl_5$. К преимуществам разработанного метода синтеза ароматических амидов следует отнести высокую селективность реакции, одностадийность синтеза амидов, использование каталитических количеств пентахлорида тантала, мягкие условия реакции и высокие выходы целевых продуктов.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации FMRS-2025-0029. Структурные исследования соединений проведены в Центре коллективного пользования «Агидель» при ИНК УФИЦ РАН.

Литература

- Pitzer J., Steiner K. Amides in nature and biocatalysis //Journal of biotechnology. – 2016. – Т. 235. – С. 32-46.
- Gabdullin A. M., Kadikova R. N., Mozgovoj O. S., Ramazanov I. R. $TaCl_5$ -Catalyzed Amidation of Carboxylic Acids with Amines // Chemistry Select. – 2023. – Т. 8. – №. 7. – С. e202204298.
- Gabdullin A. M., Kadikova R. N., Yulbarisov A. B., Mozgovoi O. S., Ramazanov, I. R. $TaCl_5$ in the synthesis of amides from saturated monobasic carboxylic acids and functionally substituted primary aromatic amines // Russian Chemical Bulletin. – 2023. – Т. 72. – № 10. – С. 2350-2356.

© Юлбарисов А.Б., Габдуллин А.М., Кадикова Р.Н., Мозговой О.С., Рамазанов И.Р., 2025

Секция II. Физико-химические исследования кислород- и азотсодержащих органических соединений и их превращений

УДК 543.552

СОЗДАНИЕ ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНОГО СЕНСОРА НА ОСНОВЕ
МОЛЕКУЛЯРНО ИМПРИНТИРОВАННОГО ПОЛИПИРРОЛА ДЛЯ
АНАЛИЗА ЭНАНТИОМЕРОВ КЛОПИДОГРЕЛА

Абдуллин Я.Р., Перфилова Ю.А., Назыров М.И., Умутбаев Н.С.
Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Для хирального распознавания энантиомеров клопидогрела, был создан энантиоселективный сенсор на основе молекулярно импринтированного полипиррола (МИППи). Электрополимеризацию МИППи проводили в растворе, содержащем 5 мМ пиррола, 1 мМ S-клопидогрела и 0.1 М LiClO₄. На первом этапе на поверхность стеклоуглеродного электрода (СУЭ) наносили каплю 1%-го раствора хитозана в 0.5% уксусной кислоте и высушивали под ИК-лампой. Затем выполняли электрополимеризацию, промывание в течение 5 минут и регистрацию сигнала. Полученный сенсор продемонстрировал коэффициент энантиоселективности (I_{pD}/I_{pL}) 1.25 и разность потенциалов $\Delta E_p = 20$ мВ. Линейная зависимость токов окисления R- и S-энантиомеров наблюдалась в диапазоне концентраций от 0.03 до 0.5 мМ, при пределах обнаружения 5 мкМ и 3.5 мкМ соответственно. Относительное стандартное отклонение не превышало 7.4%, а правильность составила 99–108%. При увеличении доли R-формы наблюдается смещение потенциала окисления в положительную область и уменьшение тока пика (рис. 1).

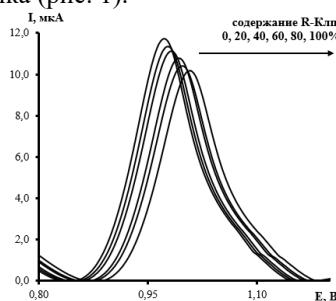


Рис. 1. ДИВ смесей клопидогрела с различным соотношением энантиомеров

Литература

1. Nazyrov M.I. et al. Voltammetric sensors based on mesoporous graphitized carbon black and cyclopentadiene derivatives for determination and recognition of clopidogrel enantiomers // Zh. Anal. Khim. 2024. V. 79. № 6. P. 591–602.

© Абдуллин Я.Р., Перфилова Ю.А., Назыров М.И.,
Умутбаев Н.С., 2025

УДК: 543.42:543.424. 543.062.

КИСЛОТНО-АКТИВИРОВАННОЕ ВОЛОКНО ФИБРОИНА,
С ИММОБИЛИЗОВАННЫМ НА НЁМ ФЕРРОНОМ, РАЗРАБОТАНО
В КАЧЕСТВЕ ОПТИЧЕСКОГО СЕНСОРА ДЛЯ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА

Авазязов М.А., Аширов М.А.

Хорезмская академия Мамуна, Хива, Узбекистан

Шелковый фибронин (Bombyx mori) - перспективный биоматериал для аналитических применений благодаря биосовместимости и возможности химической модификации. Его структура на основе β -складчатых слоев обеспечивает механическую прочность [1-3].

Наличие реакционноспособных аминокислотных остатков позволяет проводить химическую модификацию фибронина различными методами. Феррон, содержащий гидроксильную и сульфогруппы, является комплексообразующим агентом для металлов. В работе исследуется иммобилизация феррона на фиброниновое волокно для создания сенсора ионов железа [1-3].

Экспериментальная часть

Реагенты и методика

Феррон ($\geq 98,5\%$) - Macklin Biochemical Co., Ltd. Фиброниновые волокна обезжиривали кипячением в растворе $\text{Na}_2\text{CO}_3/\text{NaHCO}_3$ (0,2 М, 85°C, 5 циклов). Активацию проводили HCl (3-10%) при 25°C в течение 20 мин - 48 ч. Иммобилизацию выполняли в 0,02 М растворе феррона (1 ч, 25°C).

Спектральный анализ

Спектры диффузного отражения регистрировали на спектрофотометре EFI ES-2000 (380-780 нм). Данные преобразовывали в функцию Кубельки-Мунка:

$$F(R) = \frac{(1 - R)^2}{2 * R},$$

где $F(R)$ представляет значение функции Кубельки-Мунка, а R - измеренный коэффициент диффузного отражения [4].

Результаты и обсуждение

Оптимизация активации фибронина показала, что обработка 10% HCl в течение 2 ч с последующим старением при 25 °C в течение 48 ч обеспечивает максимальную иммобилизацию феррона, что

подтверждается выраженным изменением спектра функции Кубельки–Мунка $F(R)$. Этот режим использовали во всех последующих экспериментах.

На рисунке 1 представлены спектры Кубельки–Мунка: (I) активированный фиброн без феррона (синяя линия) и (II) фиброн с иммобилизованным ферроном (оранжевая линия). Спектр образца I – относительно плоский ($F(R) = 0,15$ – $0,40$), что типично для слабопоглощающего материала. В отличие от него, образец II демонстрирует четкую полосу поглощения с резким снижением $F(R)$ от 380 до 550 нм и выходом на плато (~0,10) выше 600 нм, подтверждая успешную иммобилизацию феррона.

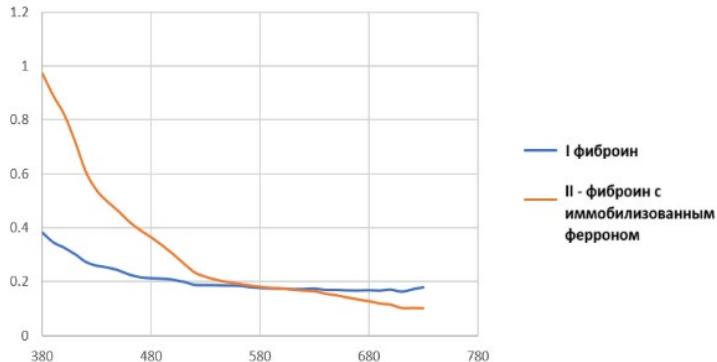


Рис. 1. Спектры Кубельки-Мунка: I - активированный фиброн, II - фиброн с иммобилизованным ферроном.

Снижение $F(R)$ отражает усиление поглощения из-за хромофорных свойств феррона ($\lambda_{\text{max}} \approx 420$ – 450 нм в растворе). Уширение и небольшой красный сдвиг в иммобилизованном состоянии, вероятно, обусловлены взаимодействием феррона с фиброном – водородными связями, электростатикой или гидрофобными эффектами, усиленными кислотной активацией. Протокол активации, по-видимому, увеличивает шероховатость поверхности, вводит протонированные аминогруппы ($-\text{NH}_3^+$) и карбоксильные группы за счёт частичного гидролиза, создавая центры связывания для сульфонатных и фенольных групп феррона. Старение обеспечивает набухание и структурную перестройку фиброна, максимизируя доступность этих центров.

Таким образом, кислотно-активированный фиброн – эффективная, биосовместимая и недорогая подложка для иммобилизации феррона. Четкая спектральная сигнатура указывает на потенциал системы как твердотельного оптического сенсора для $\text{Fe}^{2+}/\text{Fe}^{3+}$. Дальнейшие исследования будут направлены на оценку селективности, чувствительности и обратимости сенсора в водных средах с целью

создания многоразовой волоконной платформы для детектирования ионов железа.

Литература

1. Mavluda, Y., Mukhammad, A., Mansur, A., & Zulaykho, S. (2025). Immobilization mechanism and spectroscopic analysis of the organic reagent nitroso-r salt on a polymer support. Universum: химия и биология, 3(5 (131)), 22-27.
2. Murphy, A. R., & Kaplan, D. L. (2009). Biomedical applications of chemically-modified silk fibroin. Journal of materials chemistry, 19(36), 6443-6450.
3. Maia, M. V., Egito, E. S. T. D., Sapin-Minet, A., Viana, D. B., Kakkar, A., & Soares, D. C. F. (2025). Fibroin-Hybrid Systems: Current Advances in Biomedical Applications. Molecules, 30(2), 328.
4. Apyari, V. V., Dmitrienko, S. G., & Zolotov, Y. A. (2013). Unusual application of common digital devices: Potentialities of Eye-One Pro mini-spectrophotometer—A monitor calibrator for registration of surface plasmon resonance bands of silver and gold nanoparticles in solid matrices. Sensors and Actuators B: Chemical, 188, 1109-1115.

© Авазъязов М.А., Аширов М.А., 2025

УДК 691.175

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ БАРЬЕРНЫХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Алдошина Д.Д.¹, Лифанова Е.Г.¹, Лифанов А.Д.²

¹Казанский (Приволжский) Федеральный университет, Казань, Россия

²Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

Полимеры находят широкое применение в качестве упаковочных материалов, мембран для разделения и очистки газов, доставки биологически активных соединений [1]. Для полимеров, используемых в качестве мембран и пищевых пленок, барьерные свойства являются наиболее важными. Способность полимерного материала пропускать жидкости, пары или газы определяется свойством, называемым проницаемостью [2].

Проницаемость газов и газовых смесей через непористую пленочную полимерную упаковку рассматривают обычно в рамках механизма «рас-творение –диффузия». Имеющиеся в настоящее время физические и математические модели механизма перемещения диффундирующего вещества разработаны с привлечением понятий свободного (незанятого) объема полиме-ра, статистической механики,

равновесной и неравновесной термодинамики, энергетических, структурных и других параметров.

Учет информации о барьерных свойствах полимеров (газопроницаемость, коэффициент диффузии и растворимость) являются важным направлением мембранных технологий разделения газов и растворителей. Свойства переноса газа определяются тремя коэффициентами переноса, которые представляют собой коэффициенты проницаемости (P), растворимости (S) и диффузии (D). Скорость, с которой вещество проникает через полимерный материал можно определить с помощью коэффициента проницаемости P .

В работе использовался набор данных, содержащий информацию о 6469 полимерах с известными значениями коэффициентов проницаемости (3748 полимеров), растворимости (709 полимеров) и диффузии (550 полимеров). Данные характеристики являются функционально-связанными. Поэтому их прогнозирование нельзя осуществлять по отдельности, в методе машинного обучения необходимо учитывать их функциональную связь между собой.

В данном исследовании мы учитываем химическую природу диффундирующих веществ через полимерный материал. Мы считаем целесообразным использовать компьютерное представление молекул газа ($C(=O)=O - CO_2$, $C - CH_4$, $O=O - O_2$, $N\#N - N_2$, $[HH] - H_2$ и $[He] - He$) и рассчитывать дескрипторы.

В качестве компьютерных представлений полимеров мы использовали классическую систему SMILES [3]. Данный вид компьютерных представлений является линейным. В этом случае информация о молекулярной структуре полимера кодируется на основе дескрипторов, которые рассчитываются на основе SMILES [3]. Для каждой пары химических объектов (полимера и газа) результирующий дескриптор получен в результате конкатенации структурных дескрипторов полимеров и газов [4,5].

Для обучения нейронной сети нами варьировались такие параметры как функции активации (ReLU, LeakyReLU, Sigmoid, Tanh и Softmax), оптимизаторы (Adam, SGD, RMSprop), скорость обучения нейронной сети, количество эпох (epochs), т.е. число итераций, в течение которых модель полностью пропускает через себя обучающий набор данных [6].

Статистические показатели для газопроницаемости $R^2=0,78$ и $RMSE=1,94$, для коэффициента диффузии $R^2=0,51$, $RMSE=2,06$ и растворимость $R^2=0,89$ $RMSE=0,63$ (после пятикратного скользящего перекрестного контроля). Таким образом, построенные регрессионные

модели является надежным инструментом прогнозирования барьерных свойств полимеров [1, 7].

Литература

1. Лифанов А.Д., Получение ударопрочного полистирола, стойкого к растрескиванию в циклопентане / А.Д. Лифанов, В.П. Архиреев // Вопросы материаловедения. 2010. № 2 (62). С. 58-63.
2. Jin, Z.; Zhang, Z.; Demir, K.; Gu, G.X. Machine learning for advanced additive manufacturing. Matter 2020, 3, 1541-1556.
3. Weininger, D. SMILES, a Chemical Language and Information System. 1. Introduction to Methodology and Encoding Rules. Journal of Chemical Information and Computer Sciences 1988, 28, 1, 31-36.
4. <https://rdkit.org/>
5. Rakhimbekova, A.; Lopukhov, A.; Klyachko, N.; Kabanov, A.; Mardzhidov, T.I.; Tropsha, A. Efficient design of peptide-binding polymers using active learning approaches. Journal of Controlled Release 2023, 353, 903-914.
6. Dong, J.; Cao, D.S.; Miao, H.Y. et al. ChemDes: an integrated web-based platform for molecular descriptor and fingerprint computation J Cheminform 2015, 7, 60.
7. Лифанов А.Д., Полиуретан-стирольные композиты, модифицированные слоистыми силикатами / А.Д. Лифанов // Каучук и резина. 2012. № 3. С. 41-42.

© Алдошина Д.Д., 2025

УДК: 546.881.543.426.546

ПРИМЕНЕНИЕ УГЛЕРОДНЫХ ТОЧЕК ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИОНОВ МЕТАЛЛОВ

Алламбергенова Ф.Р., Сманова З.А., Ахмадов У.Н., Адилова М.Х.,
Кутлимуротова Н.Х.

Национальный университет Узбекистана, Ташкент, Узбекистан

Углеродные точки – это класс наноразмерных углеродсодержащих наноматериалов, обладающих высокими люминесцентными свойствами. Они в основном состоят из углерода, водорода, кислорода и азота, имеют сферическую морфологию, хорошо диспергируются в воде и характеризуются сильными флуоресцентными (светоизлучающими) свойствами. Размеры углеродных точек обычно меньше 10 нм [1], однако также сообщалось о существовании более крупных углеродных точек размером до 60 нм [2,3]. Введение в состав углеродных точек гетероатомов, таких как азот (N), сера (S), фосфор (P) и бор (B), может изменить их электронную структуру и значительно улучшить оптические

и химические свойства. Кроме того, углеродные точки могут быть обогащены дополнительными функциональными группами с помощью различных методов химической модификации, что позволяет повысить их стабильность и поверхностно-активные свойства [4].

Углеродные точки были синтезированы на основе хитозана и меламина с помощью одностадийного гидротермального метода. Наиболее важной характеристикой синтезированных углеродных точек является их флуоресцентное свойство. Для них характерны максимальные длины волн поглощения и испускания – соответственно 338 нм и 412 нм (рисунок 1). Данный результат указывает на то, что углеродные точки обладают высокой интенсивностью флуоресценции. Такие оптические свойства позволяют использовать углеродные точки в качестве перспективного наноматериала для обнаружения ионов металлов и других оптических биосенсорных применений. Поведение тушения флуоресценции углеродных точек было изучено в присутствии ванадат-аниона (VO_3^-). Согласно результатам исследования, при $\text{pH} = 9,87$ было обнаружено значительное тушение флуоресценции углеродных точек. Данное явление объясняется образованием устойчивого комплекса между углеродными точками и ванадат-анионами в щелочной среде. Образовавшийся комплекс приводит к снижению интенсивности флуоресценции.

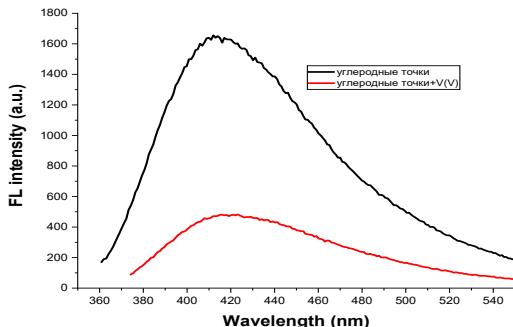


Рис. 1. Флуоресценция углеродных точек и их взаимодействие с ионами ванадия (V).

Состав, форма и природа функциональных групп углеродных точек были исследованы методами ИК-спектроскопии, СЭМ и ТЭМ. Установлено, что они имеют сферическую форму и содержат аминные и гидроксильные группы. Было установлено, что покрывающие функциональные группы образуют комплексы с ионами V^{5+} в щелочной среде, что приводит к тушению флуоресценции. На основании этого

свойства углеродные точки были рекомендованы для определения ванадат-анионов.

Литература

1. Treepet, S., Chokradjaroen, C., Kim, K., Saito, N., & Watthanaphanit, A. (2022). Saccharide-originated fluorescent carbon dots synthesized by in-liquid plasma with controlled orderliness of carbon core through precursor alteration for selective and rapid metal ion detection. *Materials Today Chemistry*, 26, 101139.
2. Bhat, A. P., Dhoble, S. J., & Rewatkar, K. G. (2022). Medical applications of quantum dots. In *Elsevier eBooks* (pp. 803–836).
3. Mansuriya, B. D., & Altintas, Z. (2021). Carbon Dots: Classification, properties, synthesis, Characterization, and Applications in Health Care—An updated Review (2018–2021). *Nanomaterials*, 11(10), 2525.
4. Sagbas, S., & Sahiner, N. (2019). Carbon dots: preparation, properties, and application. In *Elsevier eBooks* (pp. 651–676).

© Алламбергенова Ф.Р., Сманова З.А., Ахмадов У.Н., Адилова М.Х., Кутлимуровата Н.Х., 2025

УДК 541.6

ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СУШКИ НА СВОЙСТВА КРИОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СМЕСЕЙ НАТРИЕВЫХ СОЛЕЙ N-СУКЦИНИЛХИТОЗАНА И КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ

Алмаев Б.Ф., Базунова М.В.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В настоящий момент традиционные тканевые ранозаживляющие материалы постепенно заменяются на материалы на основе биорезорбируемых полимеров, в частности, полисахаридов, среди которых перспективные характеристики демонстрируют материалы на основе натриевых солей N-сукцинилхитозана и карбоксиметилцеллюлозы. При этом криоструктурированные материалы, полученные посредством лиофильной сушки, традиционно демонстрируют более высокие показатели пористости по сравнению с материалами, полученными посредством сушки под атмосферным давлением. Существенное влияние на свойства подобных материалов оказывают условия различных этапов обработки исходных растворов, например, условия нагревания материалов в процессе сушки.

Как показывают проведенные нами физико-механические испытания, повышение скорости нагрева с 0,02°C/мин до 0,06°C/мин, в некоторой степени снижает показатели прочности (напряжение при разрыве) и эластичности (относительное удлинение при разрыве) материалов

различных составов (табл. 1). Это происходит, возможно, про причине того, что при быстром нагреве, неравномерность процесса нагрева системы, ограниченного скоростью теплопереноса, приводит к тому, что в определенных областях внутри конденсированной фазы сублимируется одновременно достаточное количество льда, для того чтобы возросшее давление пара растворителя, либо непосредственно приводило к коллапсу пор, либо оказывалось достаточным для преодоления тройной точки растворителя, в результате чего протекает процесс плавления, образуется микрофаза жидкости и возникают капиллярные напряжения, интенсифицирующие процесс коллапса пор.

Таблица 1

Показатели разрывной прочности (σ) и эластичности ($\Delta l/l$) для материалов, высушенных с различными скоростями нагрева.

| Состав исходных растворов | Скорость нагрева = 0,02°C/мин | | Скорость нагрева = 0,06°C/мин | |
|---|-------------------------------|------------------|-------------------------------|------------------|
| | σ , Н/мм ² | $\Delta l/l$, % | σ , Н/мм ² | $\Delta l/l$, % |
| 3% масс. СХТЗ | 0,17 | 5,16 | 0,11 | 3,52 |
| 3% масс. СХТЗ, 1,5% масс. КМЦ | 0,18 | 9,11 | 0,03 | 8,79 |
| 3% масс. СХТЗ, 1,5% масс. КМЦ, 1% масс. глицерина | 0,77 | 24,40 | 0,47 | 16,71 |

Таким образом, наиболее перспективными с точки зрения физико-механических показателей являются материалы, полученные в условиях медленной сушки.

Литература

- Okay O. (ed.). Polymeric Cryogels: Macroporous gels with remarkable properties. – Springer, 2014. – Т. 263.

© Алмаев Б.Ф., Базунова М.В., 2025

УДК 547.458.81:66.081:546.34

СОРБЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ СОРБЕНТОВ НА ОСНОВЕ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ К ИОНАМ ЛИТИЯ

Ахмедова У.Р., Кутлимуротова Н.Х.

Национальный университет Узбекистана, Ташкент, Узбекистан

В последние годы литий-ионные батареи широко применяются в электрических устройствах, транспортных средствах и сфере возобновляемой энергетики. Поэтому объемы добычи лития и спрос на него возросли. Поскольку извлечение лития из традиционных руд

является дорогостоящим и наносит экологический ущерб, в настоящее время основное внимание уделяется технологиям его получения из солёных вод, подземных источников и промышленных отходов [1, 2].

В этом направлении важное значение имеют сорбенты, полученные из целлюлозы и её производных. Материалы на основе целлюлозы являются возобновляемыми, экологически чистыми, недорогими и удобными для модификации, а введение различных функциональных групп значительно улучшает их сорбционные свойства [3, 4].

Цель данного исследования заключается в определении и сравнении степени сорбции ионов лития на сорбентах, модифицированных фосфорной кислотой, на основе микрокристаллической целлюлозы (МКЦ) и ацетилцеллюлозы.

Сорбент на основе микрокристаллической целлюлозы (МКЦ): для синтеза использовали 1,0 г МКЦ (чистота 99,99%), 1,0 мл 95%-ного раствора фосфорной кислоты, 4 мл тетраэтоксисилана (TEOS, 99,99%) и 5 мл раствора полистирола в ацетоне. Полученную смесь промывали водой, фильтровали и высушивали.

Сорбент на основе ацетилцеллюлозы: навеску ацетилцеллюлозы (10 г) обрабатывали 6 мл 85%-ной фосфорной кислоты и подвергали кипячению в ультразвуковой ванне в 100 мл бидистилированной воды. Далее сорбент промывали бидистилированной водой, проводили качественный анализ с использованием молибденового реагента и сушили при 150 °C.

Исследование сорбционных свойств: способность синтезированных сорбентов связывать ионы лития изучали в растворе LiOH с концентрацией 1000 ppm. Навеску каждого сорбента (0,2 г) помещали в исследуемый раствор. Концентрацию лития после сорбции определяли методом пламенной фотометрии, на основании чего рассчитывали сорбционную ёмкость. Количество функциональных групп устанавливали потенциометрическим методом с использованием pH-метра (Mettler Toledo).

Сорбенты на основе микрокристаллической целлюлозы (МКЦ) благодаря высокой механической прочности и большой площади поверхности эффективно адсорбируют ионы лития. Статическая ёмкость МКЦ-сорбента, модифицированного фосфорной кислотой, тетраэтоксисиланом и полистиролом, составляет 44,3 мг/г, что значительно выше по сравнению с целлюлозным сорбентом, модифицированным только фосфорной кислотой.

Сорбенты, приготовленные на основе ацетилцеллюлозы, благодаря наличию функциональных групп ($-O-C(O)CH_3$) при обработке фосфорной кислотой проявили высокую сорбционную активность. Фосфатированная ацетилцеллюлоза показала сорбционную ёмкость по

отношению к ионам Li^+ до 51,4 мг/г. Этот результат несколько выше по сравнению с сорбентами на основе МКЦ, что указывает на более высокую способность модифицированных сорбентов на основе ацетилцеллюлозы удерживать ионы. Эти результаты можно объяснить высокой сорбционной ёмкостью сорбента на основе ацетилцеллюлозы его структурой и эффективным расположением фосфатных групп.

В литературе сообщается, что ёмкость обычной фосфорилированной целлюлозы составляет около 9,6 мг/г [1]. В других источниках установлено, что сорбционная ёмкость модифицированных нанокристаллов целлюлозы достигает 30–40 мг/г [2,4]. С этой точки зрения наши результаты подтверждают высокую эффективность.

Сорбенты на основе микрокристаллической целлюлозы (МКЦ) и ацетилцеллюлозы, модифицированные фосфорной кислотой, показали высокую эффективность при извлечении ионов лития. Сорбент на основе ацетилцеллюлозы обладает некоторым преимуществом, что связано с более прочным связыванием фосфатных групп, гибкостью полимерной матрицы и повышенной скоростью ионного обмена. Таким образом, оба сорбента являются доступными, экологически безопасными и перспективными материалами для извлечения лития из солёных вод и промышленных отходов.

Литература:

1. Recepoglu Y. K., Yüksel A. Cross-linked phosphorylated cellulose as a potential sorbent for lithium extraction from water: dynamic column studies and modeling //ACS omega. – 2022. – Т. 7. – №. 43. – С. 38957-38968.
2. Zhang Z. et al. Sustainable and efficient wastewater treatment using cellulose-based hydrogels: a review of heavy metal, dye, and micropollutant removal applications //Separations. – 2025. – Т. 12. – №. 3. – С. 72.
3. Wahib S. A. et al. Adsorption and recovery of lithium ions from groundwater using date pits impregnated with cellulose nanocrystals and ionic liquid //Journal of hazardous materials. – 2022. – Т. 421. – С. 126657.
4. Zhao T. et al. Eco-friendly lithium separators: a frontier exploration of cellulose-based materials //International Journal of Molecular Sciences. – 2024. – Т. 25. – №. 13. – С. 6822.

© Ахмедова У.Р., Кутлимуровата Н.Х., 2025

УДК 542.943-92:547.85

КИНЕТИЧЕСКИЕ И АКТИВАЦИОННЫЕ ПАРАМЕТРЫ РЕАКЦИИ
ОЗОНА С 5,6-ДИМЕТИЛУРАЦИЛОМ

Бадретдинова Ю.И.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Широкое применение озона (O_3) в клинической практике требует понимания его влияния на биологические молекулы, в первую очередь на ДНК и РНК. Для изучения механизмов таких реакций обычно используют модельные соединения, в частности, пиримидиновые и пуриновые основания или их производные. Поэтому целью работы явилось получение кинетических и активационных параметров реакции O_3 с одним из производных тимина – 5,6-диметилурацилом (5,6-ДМУ).

Кинетику реакции озона с 5,6-диметилурацилом изучали спектрофотометрически. Исследования проводили при равных начальных концентрациях реагентов. Установлено, что реакция протекает по кинетическому уравнению второго порядка (первого – и по O_3 , и по 5,6-ДМУ). Изучена температурная зависимость константы скорости второго порядка k (табл. 1).

Таблица 1

Температурная зависимость константы скорости реакции окисления
5,6-диметилурацила озоном в водной среде

| T, K | 281 | 285 | 289 | 293 | 297 | 301 | 305 | 309 |
|-----------------------------------|------|------|------|------|------|------|------|------|
| $k \cdot 10^{-2}$, л/(моль·с) | 1.56 | 1.73 | 1.85 | 2.20 | 2.84 | 3.31 | 4.75 | 5.45 |

* Погрешность определения константы не превышала 10 %.

На основании температурной зависимости k получены активационные параметры реакции O_3 с 5,6-ДМУ, которые удовлетворительно линеаризуются в координатах уравнения $E = f(\lg A)$ с данными, взятыми из литературных источников [1, 2].

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 озоном в водных растворах // Журнал физической химии. 2019. Т. 93. № 9. С. 1322–1327.

© Бадретдинова Ю.И., 2025

ВЛИЯНИЕ ОКСИДА ЦИНКА И ХИТОЗАНА НА ПОКАЗАТЕЛЬ
ТЕКУЧЕСТИ РАСПЛАВА КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ
ПОЛИЛАКТИДА И ПОЛИКАПРОЛАКТОНА

Бакирова Э.Р., Сунаргулов А.Б., Кулиш Е.И.

Уфимский университет науки и технологии, Уфа, Россия

Создание новых полимерных материалов биомедицинского назначения для регенерации поврежденных тканей является одной из актуальных проблем современной науки о полимерах. Это обусловлено возрастающим комплексом требований к физико-химическим, биологическим и структурным свойствам полимерных пленочных образцов и объемных каркасов. Одним из перспективных полимеров для биомедицинских целей является хитозан (ХТЗ), что обусловлено уникальным набором свойств, к которым относятся отсутствие токсичности, гипоаллергенность, биоразлагаемость и т.д. Успешное применение ХТЗ в качестве основы тканезамещающих материалов ограничивается низкой прочностью и сложностью формования изделий из него и может быть решено совмещением с термопластичными биоразлагаемыми и биосовместимыми полимерами. Перспективным представляется комплексное использование свойств ХТЗ и полиэфиров, в частности полилактида (ПЛ) и поликапролактона (ПКЛ) [1], которые уже широко применяются в медицине. Для придания антисептических свойств в материал можно добавлять такие вещества, как оксид цинка (ZnO). Целью работы является исследование зависимости показателя текучести расплава от содержания ХТЗ и ZnO в смесях на основе ПКЛ и ПЛ.

В работе использовали ПЛ марки bio-101 (Biopoly, Китай), ПКЛ марки Экопластик (Ecoplastiс, Китай), ХТЗ («Биопрогресс», Россия), ZnO (ST-Cosmetics, Россия). Получение пленок проводили в расплаве на лабораторном пластографе с последующим прессованием [2]. Показатель текучести расплава (ПТР) определяли на экструзионном пластометре mi 2.2 (Göttfert, Германия).

В ходе проделанной работы установлено, что в отсутствие ZnO и ХТЗ, а также при содержании ХТЗ до 70 масс.ч. и ZnO до 10.0% отклонение ПТР в системе ПЛ-ПКЛ наблюдается в большую сторону от аддитивных значений. Из рисунка 1 видно, что введение ZnO 10.0% и ХТЗ 70 масс.ч. в композицию ПЛ-ПКЛ изменяет характер отклонения ПТР смеси полимеров от аддитивной линии. В присутствии ZnO 10.0% и ХТЗ 70 масс.ч. имеет место отклонение ПТР смеси от аддитивных величин в сторону меньших значений.

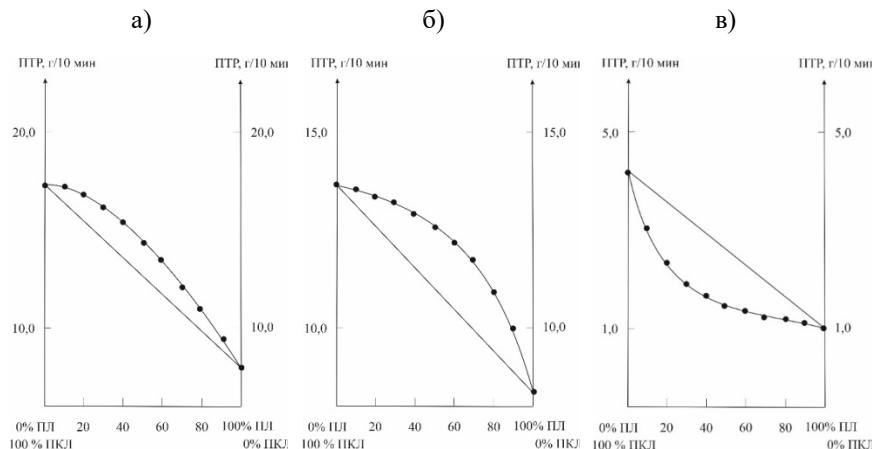


Рис. 1. Зависимость ПТР композиций ПКЛ–ПЛ (а), ПКЛ–ПЛ–ХТЗ 20 масс.ч. (б), ПКЛ–ПЛ–ХТЗ 70 масс.ч. (в) от соотношения полиэфиров в смеси. Содержание оксида цинка в композициях 5,0%.

Литература

1. Bakirova E.R., Sunargulov A.B., Lazdin R.Y. et al. Study of Properties of Polymer Film Materials Based on Polycaprolactone–Chitosan–Ceftriaxone Blends. *Polym. Sci. Ser. A*. – 2024. – V. 66. – Р. 650–654.
2. Бакирова Э.Р., Лаздин Р.Ю., Котяшов М.С. [и др.]. Влияние условий переработки на физико-механические показатели поликапролактона, полилактида и их смесей. Бутлеровские сообщения. – 2023. – Т. 76, № 12. – С. 10–16.

© Бакирова Э.Р., Сунаргулов А.Б., Кулиш Е.И., 2025

УДК 547.97

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ АТОМА ГАЛОГЕНА И МЕЗО-ЗАМЕСТИТЕЛЯ НА СПЕКТРАЛЬНЫЕ, ГЕНЕРАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА И СТАБИЛЬНОСТЬ КОНЬЮГАТОВ BODIPY С МОНОТЕРПЕНОИДАМИ
Белякова Е.Ю.^{1,2}, Еремеева Ю.В.¹, Лапшина Е.Н.¹, Гусева Г.Б.¹, Антина Е.В.¹

¹Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии наук, Иваново, Россия

²Ивановский государственный химико-технологический университет, Иваново, Россия

Поиск путей борьбы с инфекциями, вызванными устойчивыми к антибиотикам патогенами, в настоящее время является важнейшей задачей здравоохранения. Один из перспективных современных подходов лечения сложных инфекционных заболеваний – антимикробная

фотодинамическая терапия (АФДТ) связан с разработкой эффективных фотосенсибилизаторов (ФС). Среди большого разнообразия известных ФС, галогензамещенные BODIPY в последние десятилетия приобрели наибольшую популярность. Молекулярный дизайн BODIPY, реализуемый в нашей работе, преследует комплексную цель. Замещение в дипиррометеновых пиррольных ядрах атомов водорода на «тяжелые» атомы иода или брома позволяет придать соединениям фотосенсибилизирующие свойства, необходимые для проведения АФДТ. Введение в мезо-позицию BODIPY люминофоров объемного эфирного остатка ($-\text{CH}_n\text{-COOR}$) карбоновых кислот с монотерпеноидами направлено на улучшение показателей сродства коньюгата к клеточной мемbrane и эффективности его проникновения внутрь клеток патогенов [1]. Кроме того, собственная antimикробная активность терпеновой группы может дополнять лечебный эффект АФДТ в адъювантной терапии.

Целью нашего исследования стала разработка нового класса ФС на основе коньюгатов галоген-BODIPY с биологически-активными монотерпеноидами, нацеленных на липидный бислой и способных эффективно генерировать синглетный кислород (${}^1\text{O}_2$) под действием видимого света, сохраняя свои спектральные свойства в биосредах. В докладе будут представлены результаты сравнительного анализа влияния структуры сложнозефирного заместителя, природы атома галогена и растворителя на спектральные, генерационные характеристики, стабильность и особенности агрегации дибром- и дийодзамещенных мезо-BODIPY коньюгатов с тиотерпеноидом и (+)-миртенолом в органических и водно-органических средах (Рис. 1). Синтезированные люминофоры 1–4 наделены интенсивными хромофорными свойствами ($\lg \varepsilon \sim 4.47\text{--}5.01$) при $\lambda_{\text{max}}^{\text{abs}} = 524\text{--}537$ нм и флуоресценцией в области $\lambda_{\text{max}}^{\text{fl}} = 543\text{--}557$ нм. Эффект «тяжелого атома» проявляется в красном сдвиге максимума полос поглощения и испускания (до 36 и 42 нм, соответственно), а также в тушении флуоресценции (до $\varphi_{\text{fl}} \sim 1\text{--}30\%$) люминофоров 1–4 по сравнению с негалогенированными прекурсорами.

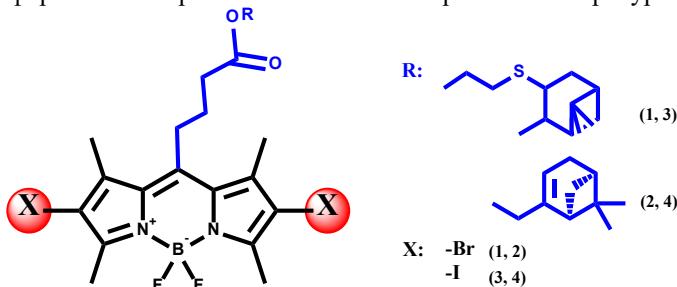


Рис. 1. Молекулярные структуры BODIPY 1–4

Преимуществом полученных дийод- и дибромзамещенных коньюгатов **1–4** является их высокая способность генерировать $^1\text{O}_2$ ($\Phi\Delta \sim 58\text{--}92\%$) независимо от природы растворителя. Введение в *мезо*-спейсер BODIPY сложноэфирного заместителя с монотерпеновым остатком существенно ограничивает протекание агрегационных процессов в водно-органических средах, что позволяет расширить концентрационные диапазоны, в которых спектральные и генерационные характеристики фотосенсибилизаторов остаются неизменными. Кроме того, установлено почти четырехкратное увеличение стабильности ФС **1–4** под действием УФ облучения по сравнению с *мезо*-незамещенными аналогами.

Проведенные биологические исследования показали, что коньюгаты **1–4** эффективнее встраиваются в липидные мембранные клеток патогенов (*Candida albicans*, *Aspergillus niger*) и модифицируют предпочтительную биомишень (ядро, митохондрия) по сравнению с галоген-BODIPY эфирами. Кроме того, соединения продемонстрировали в 2–4 раза более высокую эффективность фотоинактивации грибковых клеток уже при использовании микромолярных концентраций (~31–125 мкг/мл) в сравнении с результатами, полученными без УФ-облучения даже при значительно больших концентрациях ФС.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ № 25-23-00084 (<https://www.rscf.ru/project/25-23-00084/>).

Литература

1. Guseva G. B., Eremeeva Y. V., Belyakova E. Yu., Lisovskaya S. A., Gilfanov I. R., Nikitina L. E., Antina E. V. BODIPY conjugates with monoterpenoids for photodynamic diagnostics and therapy: Design, spectral properties, photostability and antifungal activity. *J. of Photochem. and Photobiol. A: Chem.* 2026. Vol. 470, p. 116611.

© Белякова Е.Ю., Еремеева Ю.В.,
Лапшина Е.Н., Гусева Г.Б., Антина Е.В., 2025

УДК 519.633:544.723.21

ВЛИЯНИЕ ЧИСЛА АТОМОВ Li НА СОРБЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ГРАФЕНА

Блохина А.Н.¹, Крылова К.А.²

¹Уфимский Университет Науки и Технологий, Уфа, Россия

²Институт проблем сверхпластичности металлов РАН, Уфа,
Россия

Современные разработки в области нанотехнологий фокусируются на изучении трёхмерных графеноподобных структур, включая скомканный графен, отличающийся выраженной пористостью и высокой

удельной площадью поверхности [1]. Структура скомканного графена (СГ) формируется за счёт хаотично свернутых графеновых чешуек, между которыми действуют слабые межслоевые ван-дер-ваальсовые взаимодействия. Такие свойства делают его весьма перспективным материалом для хранения и транспортировки водорода [2].

В данной работе рассматривается влияние легирования графеновой чешуйки атомами Li на способность к адсорбции водорода. Методом молекулярной динамики была проведена серия вычислительных экспериментов в программной среде LAMMPS, межатомное взаимодействие C-C и C-H описывалось с помощью потенциала AIREBO, а взаимодействие C-Li и H-Li описывалось потенциалом Морзе. Моделировалось поведениеnanoструктур с различным числом атомов лития (1, 5 и 10 атомов) в атмосфере водорода при температуре 77 К. Основное внимание уделялось анализу влияния времени выдержки и концентрации лития на эффективность водородного насыщения.

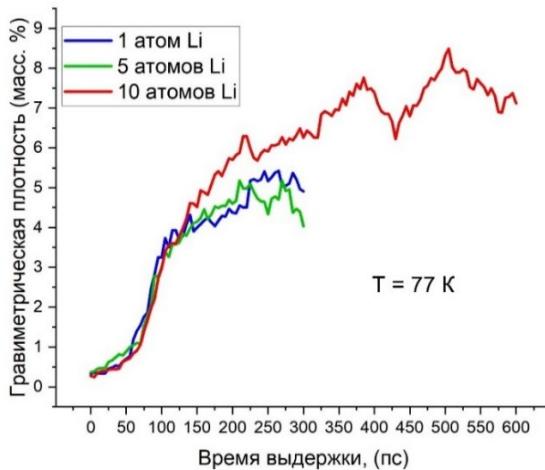


Рис. 1. Зависимость гравиметрической плотности от времени выдержки при 77К

Наилучшая водород-сорбционная ёмкость наблюдается у структур, содержащих 10 атомов Li (Рис. 1). Структуры с 5 атомами Li демонстрируют промежуточный результат, показывая начальное быстрое насыщение водородом. Таким образом, можно сделать вывод, что увеличение концентрации лития на графеновой чешуйке способствует росту водородной ёмкости.

Литература

- Баимова Ю.А., Мулюков Р.Р., Графен, нанотрубки и другие углеродные nanoструктуры: монография Баимова Ю. А., Мулюков Р. Р. – М.: РАН, 2018.

2. Krylova K.A., Baimova J.A., Lobzenko I.P., Rudskoy A.I., – Crumpled graphene as a hydrogen storage media: Atomistic simulation, Physica B: Condensed Matter. 2020 583P. 412020.

© Блохина А.Н., Крылова К.А., 2025

УДК 546.04+543.48

КОЛОРИМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР ИОНОВ Zn^{2+} НА ОСНОВЕ
ОКТАМЕТИЛЗАМЕЩЕННОГО 3,3'-БИС(ДИПИРРОМЕТЕНА)

Бочаров П.С., Бумагина Н.А., Антина Е.В.

*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии
наук, Иваново, Россия*

Обнаружение ионов тяжелых металлов, относящихся к числу приоритетных загрязнителей объектов окружающей среды, является актуальной задачей экомониторинга [1]. Применение колориметрических сенсоров, которые изменяют свой цвет в присутствии иона определяемого металла, позволяет с высокой чувствительностью и селективностью оценить концентрацию аналита – иона металла визуально и с помощью спектрофотометрии.

В докладе обсуждаются результаты спектрофотометрического обнаружения ионов Zn^{2+} с применением лиганда октаметилзамещенного 3,3'-бис(дипиррометена) H_2L в водно-органической среде ДМФА/ H_2O (9:1, об./об.). Подобраны условия для количественного определения аналита: оценены спектральные отклики реакции сенсора с аналитом – $Zn(AcO)_2$ при различных соотношениях ДМФА/ H_2O . Установлено, что максимальный оптический отклик наблюдается при соотношении ДМФА/ H_2O = 9:1 (об./об.). Реакция $Zn(AcO)_2$ с H_2L в ДМФА/ H_2O (9:1, об./об.) сопровождается яркими колористическими откликами: цвет растворов меняется с желтого на розовый и значительными изменениями электронных спектров поглощения с гиперхромным эффектом и красным (на 54 нм) сдвигом характеристической полосы, обусловленными образованием комплекса $[Zn_2L_2]$. Получена калибровочная зависимость оптического отклика от концентрации аналита, из которой определен предел обнаружения ионов Zn^{2+} : LOD = $3 \cdot 10^{-8}$ моль/л.

Разработана методология получения тест-систем на основе октаметилзамещенного 3,3'-бис(дипиррометена) для “naked-eye” экспресс-анализа ионов Zn^{2+} в водных средах. Общий принцип анализа заключается в реакции аналитического агента, иммобилизованного в твердотельный носитель, с водным раствором аналита, что обеспечивает получение визуально наблюдаемого и легко измеряемого колористического отклика тест-систем.

Работа выполнена при финансовой поддержке правительства Ивановской области (гранта в форме субсидии в целях финансового обеспечения реализации научного проекта по приоритетному

направлению деятельности Российского научного фонда, № 30-2025-004031).

Литература

1. Т. И. Моисеенко. Биодоступность и экотоксичность металлов в водных системах: критические уровни загрязнения. Геохимия. – 2019. – Т. 64. – № 7. – С. 675–688.

© Бочаров П.С., Бумагина Н.А., Антина Е.В., 2025

УДК 544.72

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИИ 4-АМИНО-3,5,6-ТРИХЛОРПИРИДИН-2-КАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ НА АКТИВИРОВАННОМ УГЛЕ

Булкин С.А., Шарифуллина Л.Р.

ФГБВОУ ВО «Академия гражданской защиты МЧС России», г. Химки

Биологически активные соединения, используемые в сельском хозяйстве, обладают различными функциональными группами. В структуре многих биологически активных соединений, в том числе и пестицидов, содержатся атомы азота, кислорода и галогенов, что обуславливает их высокую токсичность. Опасность гербицидов заключается в их возможности накопления в различных биогенных структурах [1]. Актуальной задачей в настоящее время является разработка эффективных методов удаления подобных азот-, галоген-, кислородсодержащих соединений из водных сред. Адсорбция на активированных углях считается одним из наиболее перспективных подходов благодаря доступности, высокой удельной поверхности и возможности модификации – это поверхности. Целью данной работы стало комплексное физико-химическое исследование адсорбции 4-амино-3,5,6-трихлорпирридин-2-карбоновой кислоты на активированных углях разных марок, включая изучение кинетики, адсорбционного равновесия и влияния текстурных параметров сорбента на эффективность этого процесса.

В данной работе рассматривается взаимодействие 4-амино-3,5,6-трихлорпирридин-2-карбоновой кислоты (пиклорам) (рис.1) с поверхностью углеродных адсорбентов из водных растворов различных концентраций [2].

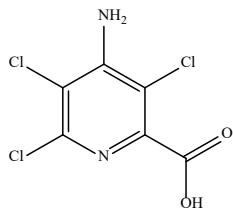


Рис. 1. 4-амино-3,5,6-трихлорпиридин-2-карбоновая кислота

В качестве адсорбента в работе применялись активированные угли различных марок, такие как Сибунит, МНУМ-2 и АУКО, характеризующиеся различным распределением пор по размерам и удельной поверхностью, с целью установления оптимального отношения степень извлечения пиклорама из водного раствора. Концентрацию пиклорама в процессе адсорбции определяли методом спектрофотометрического анализа при длине волны 223 нм. Кинетику процесса анализировали с помощью моделей псевдопервого и псевдовторого порядков реакций, а равновесные данные обрабатывали в соответствии с изотермами Ленгмюра, Фрейндлиха и Темкин.

В результате анализа полученных экспериментальных данным нами было установлено, что скорость адсорбции 4-амино-3,5,6-трихлорпиридин-2-карбоновой кислоты наиболее близко описывается моделью псевдопервого порядка, что свидетельствует о физико-химическом механизме взаимодействия между функциональными (амино-, хлор- и карбонильной) группами этой молекулы и активными центрами поверхности активированного угля. Отметим, что время достижения адсорбционного равновесия в зависимости от типа адсорбента и начальной концентрации адсорбата изменялось от нескольких часов до нескольких суток. Также анализ полученных кинетических кривых позволяет определить оптимальное соотношение массы сорбента к количеству извлекаемого сорбата для каждого набора данных.

Анализ изотерм адсорбции показал, что лучшее соответствие расчетных данных с экспериментальными наблюдается по модели Ленгмюра, что указывает на мономолекулярное покрытие поверхности адсорбента. При этом, наибольшую эффективность проявил адсорбент тип МНУМ-2, что вероятно связано с преобладанием кислородсодержащих поверхностных групп, обеспечивающих более нейтральное значение поверхности адсорбента.

Таким образом, проведенное исследование демонстрирует высокую эффективность активированных углей для извлечения 4-амино-3,5,6-трихлорпиридин-2-карбоновой кислоты из водных растворов. Полученные данные могут быть в дальнейшем использованы для

разработки технологий очистки водных сред от биологически активных кислород- и азотсодержащих соединений.

Литература

1. Швецова И.Н., Батракова Г.М., Слюсарь Н.Н., Вайсман Я.И. К вопросу оценки объемов и опасности отходов от ликвидации сооружений хранения пестицидов // Вестник Пермского государственного технического университета. Охрана окружающей среды, транспорт, безопасность жизнедеятельности. 2011. № 2. С. 13-20.
2. Булкин С.А., Веденяпина М.Д., Шарифуллина Л.Р., Ракишев А.К., Стрельцова Е.Д. Адсорбция 3,5,6-трихлор-4-аминопикриновой кислоты на сибунице в водной среде // Химия твердого топлива. 2025. № 4. С. 64-69.

© Булкин С.А., Шарифуллина Л.Р., 2025

УДК 543.552.054.1

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ ЯЗЫК ДЛЯ КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА ПРЕПАРАТОВ ТИМОЛОЛА

Булышева Е.О., Зильберг Р.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Тимолола малеат (Тимолол) – β -адреноблокатор, широко используемый в офтальмологии для лечения глаукомы и других заболеваний, сопровождающихся повышенным внутриглазным давлением. Вследствие высокой распространённости препарата, выпускаемого множеством фармацевтических компаний, возникает необходимость в экспрессных методах идентификации и определения его подлинности. Разработка и внедрение вольтамперометрических «электронных языков» для контроля качества тимолола малеата – перспективное направление, способное существенно повысить надёжность и безопасность лекарственных средств.

В данном исследовании разработана мультисенсорная система «электронный язык» [1] на основе стеклоуглеродных электродов, модифицированных полиэлектролитным комплексом хитозана N-сукцинил-хитозана с алюмоシリкатными (MFI, BEA, FAU, CHA) и алюмофосфатными (AEL, AFI) цеолитами для идентификации фармацевтических препаратов «Тимолол» следующих производителей: Окупрес-Е (АО «Кадила Фармасьютикалз Лимитед», Индия), Тимолол Реневал (АО «ПФК Обновление», Россия), Тимолол Солофарм («Гротекс ООО», Россия), Окумед (АО «Сентисс Фарма Пвт. Лтд» Индия), Тимолол-ДИА (АО «ДИАФАРМ Институт молекулярной диагностики», Россия), Тимолол МЭЗ (АО «Московский эндокринный завод», Россия), Тимолол Белмедпрепараты (АО «Белмедпрепараты», Беларусь). По данным дифференциально-импульсной вольтамперометрии можно сделать вывод о незначительных различиях по форме

вольтамперометрической кривой (ВА). Для повышения надежности вольтамперометрического распознавания применили хемометрическую обработку данных. Результаты визуализируются на графике главных компонент (ГК), где каждая ВА представлена в виде точки. Полученная трехсенсорная система образует на плоскости ГК непересекающиеся кластеры, что позволяет точно определить препараты атенолола по производителю. Доля правильно распознанных образцов составила 100%, а ошибки второго рода не превысили 20%.

Литература

1. Zilberg R.A., Bulysheva E.O., Teres Y.B., Volkova A.A., Ishmakaeva G.I., Mukhametdinov G.R., Vakulin I.V. Voltammetric electronic tongue for identification of naproxen pharmaceuticals by manufacturer // Chimica Techno Acta. – 2025. – Vol. 12, No. 2. – P. 12204.

© Булышева Е.О., Зильберг Р.А., 2025

УДК 543.552.054.1

ВОЛЬТАМПЕРРОМЕТРИЧЕСКАЯ СЕНСОРНАЯ СИСТЕМА НА
ОСНОВЕ ПАСТОВЫХ ЭЛЕКТРОДОВ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ
КОМПЛЕКСНЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ НИКЕЛЯ (II), ДЛЯ КОНТРОЛЯ
КАЧЕСТВА ПРЕПАРАТОВ АТЕНОЛОЛА

Волкова А.А., Терес Ю.Б., Зильберг Р.А.

Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

Хиральность – одна из ключевых характеристик биомолекулы, которую необходимо учитывать при разработке современных лекарств. Поскольку на фармацевтическом рынке ежегодно растёт доля дешевых аналогов различных препаратов, важной задачей становится контроль их качества и энантиочистоты. Решением данной проблемы является разработка мультисенсорной системы «электронный язык» [1,2].

Данная работа была направлена на создание мультисенсорной системы на основе пастовых электродов из графитированной термической сажи Carboblack C, модифицированных комплексными соединениями никеля (II) с хиральными органическими лигандами, для селективного распознавания и определения энантиомеров атенолола (Atn). Полученный массив вольтамперометрических обрабатывался хемометрическими методами МГК и SIMCA.

Таблица 1
Результаты SIMCA-классификации R- и S-, RS-Atn (%)

| Сенсор | ЭО* | | | |
|----------------------------------|-----|-----|-----|-----|
| | | R | S | RS |
| CBPE@(S)-Ni1 | R | 100 | 0 | 10 |
| | S | 0 | 100 | 20 |
| | RS | 10 | 0 | 100 |
| CBPE@(S,S)-Ni2 | R | 100 | 0 | 30 |
| | S | 10 | 100 | 20 |
| | RS | 10 | 10 | 100 |
| CBPE@(S)-Ni1 и CBPE@(S,S)-Ni2 | R | 100 | 0 | 0 |
| | S | 0 | 100 | 0 |
| | RS | 0 | 0 | 100 |

Анализ результатов классификации по методу SIMCA демонстрирует высокую результативность разработанной вольтамперометрической сенсорной системы в процессе определения энантиомеров атенолола. Использование двухсенсорной системы позволяет полностью исключить вероятность возникновения ошибок первого и второго рода.

Литература

1. Zilberg R. A., Teres Y. B., Bulysheva E. O. [et al.]. A chiral Ni(II) complex immobilized on Carboblack C as a readily available and effective enantioselective voltammetric sensor for recognition of atenolol enantiomers in real samples – *Electrochimica Acta*, 2025. – V. 529, P. 146309.
2. Zilberg R., Salikhov R., Mullagaliev I. [et al.]. Chitosan-based polyelectrolyte complex in combination with allotropic forms of carbon as a basis of thin-film organic electronics – *Chimica Techno Acta*, 2024. – V. 11, P. 202411302.
3. Сидельников А. В., Майстренко В. Н., Зильберг Р. А. [и др.]. Энантиоселективный вольтамперометрический сенсор для распознавания стереоизомеров пропранолола. – Журнал аналитической химии, 2017. – Т. 72, № 5, 486 с.
4. Кабирова Л. Р., Дубровский Д. И., Никонова Н. А. [и др.]. Вольтамперометрическое обнаружение метионина в лекарственных средствах с использованием методов хемометрики – *Известия Уфимского научного центра РАН*, 2019. – № 2, 15 с.

5. Сидельников А. В., Зильберг Р. А., Кудашева Ф. Х. [и др.]. Вольтамперометрическая идентификация многокомпонентных растворов с использованием метода главных компонент – Журнал аналитической химии, 2008. – Т. 63, № 10, 1072 с.

© Волкова А.А., Терес Ю.Б., Зильберг Р.А., 2025

УДК 691.175.2

МОДИФИКАЦИЯ ПОЛИЭФИРНЫХ КОМПОЗИТОВ АЗОТ- И
СЕРЕБРОСОДЕРЖАЩИМИ БИОЦИДНЫМИ ДОБАВКАМИ:
ОЦЕНКА АНТИМИКРОБНЫХ СВОЙСТВ

Габдуллина Э.Р.¹, Фараизов И.И.¹, Тимофеев В.П.¹,
Ковшов А.Ю.¹, Латыпова Э.Р.²

¹ООО «Автопласт», Нефтекамск, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, ИХЗЧС, Уфа, Россия

Перспективной областью применения разработанных композитов являются модульные медицинские здания и сооружения, где особенно актуальна стойкость материалов к микробиологическому обрастианию и возможность обеспечения санитарно-гигиенических требований. Использование биоцидно-модифицированных композитов на основе ненасыщенной полиэфирной смолы позволяет снизить риск бактериального заражения поверхностей, повысить долговечность конструкций.

Биоцидная активность модифицированных композитов обеспечивалась за счёт введения функционализированной добавки, содержащей серебро-, азот органический комплекс, стабилизованный на поверхности высокодисперсного неорганического носителя.

Композиты получали методом полимеризации ненасыщенной полиэфирной смолы с введением биоцидных агентов на стадии формирования композиции. Антибактериальную активность оценивали через 1, 3, 6 и 24 часа по отношению к бактериальным штаммам E. Coli ATCC 25922, S. Aureus ATCC 25923, P. Aeruginosa ATCC 27853 с использованием стандартных микробиологических методик. [1].

Таблица 1

Микробиологическая активность композита

| Срок выживания микроорганизмов | Результат, КОЕ/см ² | | |
|------------------------------------|---------------------------------------|--------------|--------------|
| | Ввод биоцида в композицию, % по масс. | | |
| | 0 | 1 | 2 |
| E. Coli ATCC 25922 через 1 час | $8,2 * 10^2$ | $1,7 * 10^2$ | $1,7 * 10^1$ |
| E. Coli ATCC 25922 через 3 часа | $8,9 * 10^1$ | $2,8 * 10^1$ | 1 |
| E. Coli ATCC 25922 | Не | Не | Не |

Окончание табл. 1

| | | | |
|---|---------------|---------------|---------------|
| через 6 часов | обнаружено | обнаружено | обнаружено |
| E. Coli ATCC 25922 через 24 часа | Не обнаружено | Не обнаружено | обнаружено |
| S. Aureus ATCC 25923 через 1 час | $1,7 * 10^3$ | $2,0 * 10^2$ | $1,9 * 10^1$ |
| S. Aureus ATCC 25923 через 3 часа | $1,2 * 10^3$ | $7,8 * 10^2$ | $5,4 * 10^1$ |
| S. Aureus ATCC 25923 через 6 часов | $1,3 * 10^1$ | $1,4 * 10^1$ | 1 |
| S. Aureus ATCC 25923 через 24 часа | Не обнаружено | Не обнаружено | Не обнаружено |
| P. Aeruginosa ATCC 27853 через 1 час | $7,7 * 10^2$ | $8,3 * 10^1$ | $8,5 * 10^1$ |
| P. Aeruginosa ATCC 27853 через 3 часа | Не обнаружено | Не обнаружено | Не обнаружено |
| P. Aeruginosa ATCC 27853 через 6 часов | Не обнаружено | Не обнаружено | Не обнаружено |
| P. Aeruginosa ATCC 27853 через 24 часа | Не обнаружено | Не обнаружено | Не обнаружено |

Показана возможность модификации композитов на основе ненасыщенной полиэфирной смолы биоцидными добавками, содержащими органо-металлические комплексы. Установлено, что введение данных систем способствует формированию выраженной антибактериальной активности материалов в отношении споровых и неспоровых бактерий, а также фунгицидной активностью против плесневых грибов (включая черную плесень), мхов, водорослей, возбудителей кандидоза и трихофитии.

Литература

1. Коляго Г.Г., Струк В.А. Материалы на основе ненасыщенных полиэфиров. – Минск: Наука и техника, 1990.

© Габдуллина Э.Р., Фараизов И.И., Тимофеев В.П., Ковшов А.Ю., Э.Р. Латыпова, 2025

УДК 691.175.2

ВЛИЯНИЕ АЗОТ- И МЕДЬСОДЕРЖАЩИХ БИОЦИДНЫХ ДОБАВОК
НА АНТИМИКРОБНЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИЭФИРНЫХ
КОМПОЗИТОВ

Габдуллина Э.Р.¹, Фараизов И.И.¹, Тимофеев В.П.¹,
Ковшов А.Ю.¹, Латыпова Э.Р.²

¹ООО «Автопласт», Нефтекамск, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, ИХЗЧС, Уфа, Россия

Перспективным направлением применения изготовленных полиэфирных композитов являются модульные медицинские здания и сооружения, где особое значение имеет устойчивость конструкционных материалов к микробиологическому загрязнению и соответствие санитарно-гигиеническим требованиям эксплуатации. Использование полиэфирных композитов, модифицированных биоцидными компонентами, позволяет существенно снизить риск бактериального обрастаия поверхностей и увеличить срок службы изделий в условиях повышенных санитарных нагрузок.

Антимикробный эффект полученных материалов обеспечивался за счёт введения в композицию функциональной добавки, представляющей собой медь- и азотсодержащий органический комплекс, закреплённый на поверхности высокодисперсного неорганического носителя. Введение данной добавки осуществляли на стадии формирования композиции в процессе полимеризации ненасыщенной полиэфирной смолы.

Оценку антимикробной активности модифицированных композитов проводили в отношении штаммов *Escherichia coli* ATCC 25922, *Staphylococcus aureus* ATCC 25923 и *Pseudomonas aeruginosa* ATCC 27853. Испытания выполняли с экспозицией 1, 3, 6 и 24 часа в соответствии со стандартными микробиологическими методиками [1].

Таблица 1

Микробиологическая активность

| Срок выживания микроорганизмов | Результат, КОЕ/см ² | | |
|-------------------------------------|---------------------------------------|-----------------------|-----------------------|
| | Ввод биоцида в композицию, % по масс. | | |
| | 0 | 1 | 2 |
| E. Coli ATCC 25922 через 1 час | 8,2 * 10 ² | 2,1 * 10 ² | 1,9 * 10 ² |
| E. Coli ATCC 25922 через 3 часа | 8,9 * 10 ¹ | 1 | Не обнаружено |
| E. Coli ATCC 25922 через 6 часов | Не обнаружено | Не обнаружено | Не обнаружено |
| E. Coli ATCC 25922 через 24 часа | Не обнаружено | Не обнаружено | Не обнаружено |
| | | | |

Окончание табл. 1

| | | | |
|---|---------------|---------------|---------------|
| S. Aureus ATCC 25923 через 1 час | $1,7 * 10^3$ | $1,69 * 10^3$ | $1,7 * 10^3$ |
| S. Aureus ATCC 25923 через 3 часа | $1,2 * 10^3$ | $7,0 * 10^2$ | $5,7 * 10^2$ |
| S. Aureus ATCC 25923 через 6 часов | $1,3 * 10^1$ | 4 | 3 |
| S. Aureus ATCC 25923 через 24 часа | Не обнаружено | Не обнаружено | Не обнаружено |
| P. Aeruginosa ATCC 27853 через 1 час | $7,7 * 10^2$ | $7,7 * 10^2$ | $5,4 * 10^2$ |
| P. Aeruginosa ATCC 27853 через 3 часа | Не обнаружено | Не обнаружено | Не обнаружено |
| P. Aeruginosa ATCC 27853 через 6 часов | Не обнаружено | Не обнаружено | Не обнаружено |
| P. Aeruginosa ATCC 27853 через 24 часа | Не обнаружено | Не обнаружено | Не обнаружено |

Доказана возможность повышения биостойкости полизифирных композитов за счёт введения биоцидных добавок, содержащих органометаллические комплексы. Такие системы обеспечивают значительное снижение микробиологического обраствания поверхностей, проявляя активность против широкого спектра микроорганизмов – от споровых и неспоровых бактерий до плесневых грибов, мхов, водорослей, а также возбудителей кандидоза и трихофитии.

Литература

1. Коляго Г.Г., Струк В.А. Материалы на основе ненасыщенных полизифиров. – Минск: Наука и техника, 1990.

© Габдуллина Э.Р., Фараизов И.И.,
Тимофеев В.П., Ковшов А.Ю., Латыпова Э.Р., 2025

УДК 542.943-92:547.857.4

**РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ОЗОНА ПО ОТНОШЕНИЮ
К НЕКОТОРЫМ ПРОИЗВОДНЫМ ПУРИНА**

Гималетдинова Э.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Пурин – это гетероциклическое органическое соединение, состоящее из двух конденсированных колец (пиримидинового и имидазольного). Сам пурин не играет значительную биологическую роль, однако некоторые его производные чрезвычайно важны для живых существ. Так, пуриновые основания аденин и гуанин входят в состав нуклеиновых кислот. Алкалоиды кофеин и теобромин обладают психоактивными и стимулирующими свойствами (кофеин содержится в кофе и чае,

теобромин – в основном в какао). Мочевая кислота – конечный продукт метаболизма пуринов в организме человека. Поскольку озон (O_3) сегодня широко применяется в медицине, косметологии, очистке сточных вод, дезинфекции и других областях, исследование его реакционной способности по отношению к пуриновым производным (ПП) представляет немалый научный и практический интерес.

Кинетику реакций озона с гуанином, кофеином, теобромином и мочевой кислотой изучали спектрофотометрическим методом в водной среде. Исследования проводили при избыточной начальной концентрации O_3 . Установлено, что все реакции протекают по кинетическому уравнению второго порядка (первого – по O_3 и первого – по ПП). В интервале 281–309 К изучена температурная зависимость констант скорости второго порядка. Обработка полученных данных в координатах уравнения Аррениуса позволила определить значения логарифма предэкспоненциального множителя $Ig A$ и энергии активации E . Обнаружено, что значения активационных параметров, найденные в настоящей работе и взятые из литературы [1, 2], удовлетворительно линеаризуются в координатах $E = f(Ig A)$. Данная линеаризация указывает, скорее всего, на единый механизм лимитирующей стадии озонированного окисления изученных производных пурина и 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 озоном в водных растворах // Журнал физической химии. 2019. Т. 93. № 9. С. 1322–1327.

© Гималетдинова Э.Р., 2025

УДК 628.16.081

ПРИМЕНЕНИЕ ФЕНТОН-ПОДОБНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРОБЛЕМ ДЕТОКСИКАЦИИ ОРГАНИЧЕСКИХ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ ПРОМЫШЛЕННЫХ СТОЧНЫХ ВОД

Женисова Д.Т., Сафаров Р.З.

*Евразийский национальный университет им. Л.Н. Гумилёва, Астана,
Казахстан*

Индустриализация сопровождается ростом объёмов промышленных сточных вод, содержащих токсичные органические соединения,

синтетические красители и фармацевтические препараты. Эти соединения отличаются высокой химической стойкостью и низкой биодеградируемостью, что приводит к их накоплению в водных экосистемах и негативному влиянию на здоровье человека. Традиционные методы очистки, такие как фильтрация, коагуляция и биологическая обработка, не обеспечивают полного удаления устойчивых органических соединений. В связи с этим растёт интерес к продвинутым окислительным процессам, в частности к Фентон-подобным системам, основанным на генерации гидроксильных радикалов ($\cdot\text{OH}$) при взаимодействии пероксида водорода с ионами переходных металлов, которые позволяют проводить разложение этих загрязнителей с высокой эффективностью.

Был проведён обзор публикаций 2017–2025 гг. (Scopus, Web of Science, ScienceDirect), посвящённых применению Фентон-подобных систем для очистки сточных вод. Рассмотрены гомогенные и гетерогенные модификации (Фото-Фентон, Электро-Фентон, Соно-Фентон) и комбинированные методы, обеспечивающие эффективную генерацию активных форм кислорода (рисунок 1). Особое внимание удалено катализаторам на основе Fe, Cu, Mn, Co и металлоорганических каркасов (MOF), которые сохраняют активность в широком диапазоне pH (3–7) и позволяют достигать высокой степени минерализации загрязнителей.

Процессы Фентон-подобного окисления показали эффективность до 90–99% удаления целевых загрязнителей. Для токсичных органических соединений, таких как бензол и 1,4-диоксан, достигнута степень минерализации более 85% [1]. В системах очистки сточных вод от синтетических красителей (метиленовый синий, родамин) получено полное обесцвечивание и снижение органического углерода более чем на 95%. При деградации фармацевтических соединений (диклофенак, 5-фторурацил, парацетамол) фото- и электро-Фентон-процессы обеспечивают почти полную минерализацию и снижение токсичности. Применение гибридных систем повышает скорость реакции, устойчивость катализатора и снижает энергозатраты.



Рис. 1. Классификация Фентон-подобных процессов

Фентон-подобные процессы демонстрируют высокий потенциал в решении задач детоксикации промышленных сточных вод. Их применение обеспечивает глубокое окисление и разрушение устойчивых органических соединений до безопасных продуктов.

Перспективными направлениями развития являются расширение диапазона pH, использование наноструктурированных катализаторов и внедрение гибридных систем. Эти подходы позволяют создать экологически безопасные и энергоэффективные технологии очистки воды в условиях индустриализации.

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

Литература

1. Liu G., et al. Advanced oxidation of benzene using Fenton-like processes. – Journal of Environmental Chemical Engineering, 2017.

© Женисова Д.Т., Сафаров Р.З., 2025

УДК 665.7.038

ЭКОЛОГИЧНЫЕ ПРОТИВОИЗНОСНЫЕ ДОБАВКИ ДЛЯ
ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА И БИОДИЗЕЛЯ

Замахина К.Д.¹, Раскильдина Г.З.¹, Нелькенбаум К.С.²

¹Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа,
Россия

²ООО «Синтез ТНП», Уфа, Россия

Острая потребность в присадках и добавках к дизельному топливу (ДТ), повышающих его эксплуатационные характеристики, связана с резким сокращением их поставок из-за рубежа. Этим определяется важность и актуальность разработки отечественных и доступных реагентов и композиций, способных при введении в ДТ обеспечить его эксплуатационные характеристики в соответствии с требованиями современных стандартов.

Основной тенденцией в мировой практике по снижению негативного воздействия на окружающую среду от ДТ является снижение содержания серы и ароматических соединений. Удаление последних происходит в процессе гидроочистки ДТ, при этом утрачивается смазывающая способность ДТ, необходимая для защиты двигателя от износа и поломок.

Решением данной проблемы является использование смазывающих присадок, компенсирующих понижение смазывающей способности в ДТ с низким содержанием серы. В качестве смазывающих присадок используют жирные кислоты (C₁₆-C₂₂) и их сложные эфиры.

С целью получения экологически чистых биодобавок к дизелю с улучшенными свойствами мы осуществили переэтерификацию растительных масел с использованием одноатомных и двухатомного спиртов. Составленные композиции содержали 99%, 95%, 90% товарного малосернистого ДТ и – 1%, 5%, 10 % синтезированной смазывающей присадки (таблица 1).

Таблица 1
Соотношение компонентов смазывающей присадки

| Номер образца | Компонент, масс. % | | | | Катализатор, масс. % |
|---------------|--------------------|--------------------|----------------------------------|--|----------------------|
| | Подсолнечное масло | CH ₃ OH | C ₄ H ₉ OH | C ₂ H ₆ O ₂ | |
| 1 | 75 | 25 | - | - | 1 |
| 2 | 75 | - | 25 | - | 1 |

| | | | | | |
|---|----|---|---|----|---|
| 3 | 75 | - | - | 25 | 1 |
|---|----|---|---|----|---|

Смазывающие свойства присадок изучались с использованием метода HFRR (ГОСТ Р ИСО 12156). В таблице 2-4 представлены результаты определения среднего диаметра пятна износа (СДПИ) дизельного топлива в зависимости от количества биодобавки при использовании сложных эфиров жирных кислот растительного масла (ЖКРМ) со следующими спиртами: метилового спирта, бутилового спирта и этиленгликоля.

Таблица 2
СДПИ дизельного топлива при введении сложного эфира ЖКРМ и этиленгликоля

| Номер образца | Базовое ДТ | Содержание сложного эфира % | | |
|---------------------------|---------------|-----------------------------|-----|-----|
| | | 1 | 5 | 10 |
| Диаметр пятна износа, мкм | 630 | 151 | 133 | 113 |

Как видно из таблицы 2, при введении синтезированной присадки средний диаметр пятна износа ДТ снижается с 630 до 113 мкм (10 % масс.).

Таблица 3
СДПИ дизельного топлива при введении сложного эфира ЖКРМ и метанола

| Номер образца | Базовое ДТ | Содержание сложного эфира % | | |
|---------------------------|---------------|-----------------------------|-----|-----|
| | | 1 | 5 | 10 |
| Диаметр пятна износа, мкм | 630 | 310 | 270 | 130 |

Как видно из таблицы 3, при введении синтезированной присадки средний диаметр пятна износа ДТ снижается с 630 до 130 мкм (10 % масс.).

Таблица 4
СДПИ дизельного топлива при введении сложного эфира ЖКРМ и бутанола

| Номер образца | Базовое ДТ | Содержание сложного эфира % | | |
|---------------------------|---------------|-----------------------------|-----|-----|
| | | 1 | 5 | 10 |
| Диаметр пятна износа, мкм | 630 | 280 | 240 | 115 |

Как видно из таблицы 4, при введении синтезированной присадки средний диаметр пятна износа ДТ снижается с 630 до 115 мкм (10 % масс.).

Таким образом, результаты показывают, что продукты перэтерификации жирных кислот растительных масел могут рассматриваться как противоизносные добавки к дизельному топливу, повышающие его смазывающие свойства.

Работа выполнена в рамках государственного задания Минобрнауки России в сфере научной деятельности, номер для публикаций FEUR – 2025-0001 «Нефтехимические реагенты, добавки и материалы».

Литература

1. Данилов, А.М. Применение присадок в топливах для автомобилей : справ. изд. / А.М. Данилов. Москва: Химия, 2000. 232 с.
2. Power Service Products [электронный ресурс]: технический ликбез / Режим доступа: http://www.antigeli.ru/articles/smazuvayushaya_sposobnost_dieselnoego_topliv
3. Пат. 2393209 Российская Федерация МПК C11C3/04. Приемопередающее устройство / Селиванов Н. И., заявитель и патентообладатель Федеральное Гос. Образовательное учреждение высшего профессионального образования Красноярск. гос. аграрный ун-т. № 2008140024/13 заявл. 08.10.08, опубл. 27.06.10, Бюл. № 23 (II ч.). 3 с.
4. Нагорнов, С.А. Техника и технологии производства и переработки растительных масел: учебное пособие / С.А. Нагорнов, Д.С. Дворецкий, С.В. Романцова, В.П. Таров. Тамбов: Изд. ГОУ ВПО ТГТУ, 2010. 96 с.
5. Данилов А.М. Присадки к топливам, используемые в России / А.М. Данилов // Мир нефтепродуктов. 2004. № 2. С. 2-6.

© Замахина К.Д., Раскильдина Г.З., Нелькенбаум К.С., 2025

УДК 543.552.054.1

КОМПОЗИТНЫЙ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР ДЛЯ
РАСПОЗНАВАНИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ
МЕТИОНИНА НА ОСНОВЕ ХИРАЛЬНОГО БОРОФОСФАТА МЕДИ С
ОТКРЫТОЙ КАРКАСНОЙ СТРУКТУРОЙ И НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА

Зекиева А.Ф., Булышева Е.О., Зильберг Р.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Метионин (2-амино-4-метилтиобутановая кислота, Met) – незаменимая серосодержащая алифатическая аминокислота, входящая в состав белков человеческого организма и поступающая в него исключительно с пищей. Met выступает ключевым донором метильных групп в реакциях трансметилирования, которые критически важны для синтеза нуклеотидов, фосфолипидов и нейромедиаторов, а также служит

биохимическим предшественником таких соединений, как цистеин, глутатион, таурин и фосфатидилхолин. Метионин, обладая хиральным альфа-углеродным атомом, существует в виде пары оптических изомеров – L- и D-энантиомеров. Их биологическая активность кардинально различается: в метаболизме человека и построении белков используется исключительно L-форма, тогда как D-форма практически не проявляет метаболической активности. Дефицит L-Met в организме приводит к ряду тяжелых нарушений, таких как замедление роста, жировая дистрофия печени, мышечная слабость, поражения кожи и угнетение иммунитета. Нарушение метаболизма метионина, в частности изменение соотношения его L- и D-энантиомеров, ассоциировано с развитием онкологических заболеваний, таких как рак легких. В связи с этим, количественное определение уровня и соотношения оптических изомеров метионина в биологических жидкостях представляет значительный потенциал для неинвазивной ранней диагностики.

Таким образом, создание высокочувствительных, селективных и экономически эффективных методов для дифференциального определения энантиомеров представляет собой актуальную научно-практическую задачу. Несмотря на распространность традиционных методов хирального анализа (таких как ВЭЖХ и капиллярный электрофорез), они часто требуют дорогостоящего оборудования и сложной пробоподготовки. Перспективной альтернативой выступают электрохимические сенсоры, которые сочетают высокую чувствительность и селективность с быстротой анализа, низкой стоимостью и возможностью портативного использования [1-3].

В работе представлен новый сенсор для селективного распознавания и определения энантиомеров метионина, в котором используется модифицированный стеклоуглеродный электрод (СУЭ). Модифицирующий слой представляет собой композитный материал, состоящий из полиэлектролитного комплекса хитозана-сукциниамида хитозана (ПЭК), хирального борофосфата меди с открытой каркасной структурой $\text{LiCu}_2[\text{BP}_2\text{O}_8(\text{OH})_2]$ и наночастиц золота. Добавление частиц $\text{LiCu}_2[\text{BP}_2\text{O}_8(\text{OH})_2]$ и Au в ПЭК, способствует увеличению эффективной площади поверхности электрода, увеличению энантиоселективности, стабильности получаемых результатов.

Установлен оптимальный состав композитов: соотношение ПЭК: $\text{LiCu}_2[\text{BP}_2\text{O}_8(\text{OH})_2]$ – 1 мл: 0.001 г; соотношение ПЭК@ $\text{LiCu}_2[\text{BP}_2\text{O}_8(\text{OH})_2]$: Au – 50 мкл : 5 мкл. Методами циклической вольтамперометрии, сканирующей электронной микроскопии и электрохимической импедансной спектроскопии изучена морфология и электрохимические характеристики предложенного композитного сенсора; рассчитана площадь его эффективной поверхности ($A = 6.02 \pm 0.4 \text{ mm}^2$) и сопротивление переносу заряда ($R_{ct} = 2560 \pm 0.5$). Изучены

аналитические характеристики предложенного сенсора: линейный диапазон определяемых концентраций от $1 \cdot 10^{-6}$ до $1 \cdot 10^{-3}$ М и от $5 \cdot 10^{-5}$ до $1 \cdot 10^{-3}$ М, пределы обнаружения $2.91 \cdot 10^{-7}$ М и $4.17 \cdot 10^{-7}$ М и нижние границы определяемых концентраций $9.7 \cdot 10^{-7}$ и $1.39 \cdot 10^{-6}$ для D- и L-метионина соответственно. Наибольшую чувствительность сенсор проявляет к D-метионину, при этом разница в потенциалах составила 16 мВ, коэффициент энантиоселективности 1.43. Проведенные испытания подтвердили эффективность предложенного сенсора для определения энантиомеров метионина как в модельных растворах, так и в образцах биологических жидкостей, при этом относительное стандартное отклонение не превышает 2.0 %.

Литература:

1. Майстренко, В. Н. Энантиоселективные вольтамперометрические сенсоры / В. Н. Майстренко, Г. А. Евтугин, Р. А. Зильберг. – Уфа: Башкирский государственный университет, 2018. 189 с.
2. Chiral Cobalt(III) Complexes Based on (1R,2R)-Cyclohexanediamine and 4-Bromo-5-methylsalicylaldehyde: Synthesis, Modification, and Application in Catalysis and Enantioselective Sensors / O. V. Khromova, A. F. Smol'yakov, R. A. Zil'berg [et al.] // Russian Journal of Coordination Chemistry. 2025. V. 51, No. 3. P. 200-210.
3. Синтез и применение хелатных комплексов $[\text{Zn}(\text{L-arg})_2(\text{H}_2\text{O})]$ и $[[\text{Zn}(\text{L-arg})_2(\text{H}_2\text{O})](\text{SO}_4)]^{2-}$ в качестве хиральных селекторов / Р. Р. Гизатов, Ю. Б. Терес, М. Н. Галимов [и др.] // Координационная химия. 2025. Т. 51, № 5. С. 315-326.

© Зекиева А.Ф., Булышева Е.О., Зильберг Р.А., 2025

УДК 543.544

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХИРАЛЬНОГО РАСПОЗНАВАНИЯ ЦЕОЛИТОПОДОБНОГО МАТЕРИАЛА БОРОФОСФАТА АММОНИЯ $(\text{NH}_4)_4[\text{H}_2\text{B}_2\text{P}_4\text{O}_{16}]$

Изibaева Д.В., Нурутдинова А.Ш., Утеева Ж.Д.
Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Селективная адсорбция оптических изомеров имеет важное значение для фармацевтики, поскольку энантиомеры могут существенно различаться по биологической активности. Однако разделение рацемических смесей остаётся сложной задачей. Перспективным направлением является использование хиральных пористых материалов с надмолекулярной структурой, таких как цеолитоподобные структуры. В данной работе исследована адсорбционная способность энантиомеров лимонена на борофосфате аммония $(\text{NH}_4)_4[\text{H}_2\text{B}_2\text{P}_4\text{O}_{16}]$.

Эксперименты проведены при температуре 70 °С. Изотермы адсорбции относятся к III типу по классификации БЭТ. Значение

адсорбции S-(-)-лимонена составило 9.61, R-(+)-лимонена – 8.81, что соответствует коэффициенту энантиоселективности 1.09.

Аппроксимация изотерм уравнением Фрейндлиха показала различие в константе адсорбционной ёмкости (K_x) и интенсивности адсорбции (n): для R-(+)-лимонена параметр n составил 0.52, константа адсорбционной ёмкости K_x – 1.45, коэффициент корреляции r = 0.9758. Для S-(-)-лимонена значение n оказалось выше – 0.61, K_x составила 1.59, а коэффициент корреляции достиг 0.9885. Значения n < 1 указывают на неблагоприятную адсорбцию, вероятно, вследствие неоднородности поверхности сорбента.

По уравнению Дубинина–Радушкевича были получены параметры ёмкости пор (W_0) и характеристической энергии адсорбции (E): при температуре 70°C наблюдается сильное различие в емкости пор двух энантиомеров (для R-(+)-лимонена W_0 = 30,2, для S-(-)-лимонен W_0 = 17,2), однако характеристическая энергия адсорбции одинакова для обоих энантиомеров (~11 кДж/моль), что подтверждает физическую природу взаимодействий.

Таким образом, борофосфат $(\text{NH}_4)_4[\text{H}_2\text{B}_2\text{P}_4\text{O}_{16}]$ борофосфат $(\text{NH}_4)_4[\text{H}_2\text{B}_2\text{P}_4\text{O}_{16}]$ продемонстрировал энантиоселективность и может быть рассмотрен в качестве материала для разделения оптических изомеров.

Литература

1. Mane, S., Racemic drug resolution: a comprehensive guide. Analytical Methods, 2016. 8: p. 20.

© Изibaева Д.В., Нуретдинова А.Ш., Утеева Ж.Д., 2025

УДК 543.544

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНОСТИ ЦЕОЛИТОПОДОБНОГО МАТЕРИАЛА БОРОФОСФАТА АММОНИЯ $(\text{NH}_4)_4[\text{H}_2\text{B}_2\text{P}_4\text{O}_{16}]$ НА ПРИМЕРЕ α -ПИНЕНА

Избаева Д.В., Нуретдинова А.Ш., Утеева Ж.Д.
Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Разработка хиральных материалов для селективной адсорбции оптических изомеров имеет важное значение для фармацевтики, где требуется точное разделение энантиомеров с различной биологической активностью. Перспективным направлением считаются цеолитоподобные материалы с хиральной организацией пор, способные формировать стереоспецифические центры адсорбции. В данной работе изучена адсорбционная способность борофосфата аммония $(\text{NH}_4)_4[\text{H}_2\text{B}_2\text{P}_4\text{O}_{16}]$, синтезированного ионотермическим методом, по отношению к энантиомерам α -пинена – важного терпеноидного соединения, применяемого в парфюмерии, медицине и органическом синтезе.

Методом обращённой газовой хроматографии получены изотермы адсорбции в диапазоне 50–120 °С и проанализированы по моделям Ленгмюра и Дубинина–Радушкевича. При 120 °С выявлены различия: (–)- α -пинен адсорбируется сильнее, что подтверждается коэффициентами энантиоселективности ($\alpha=1.06$ по адсорбции, $\alpha=1.04$ по удерживаемым объёмам) и t-критерием. Изотермы относятся к I типу по классификации БЭТ.

Аппроксимация по модели Ленгмюра показала большую ёмкость монослоя для (–)- α -пинена ($A_\infty=41$), тогда как (+)- α -пинен ($A_\infty=31$) характеризуется более сильным начальными взаимодействиями/

Анализ по уравнению Дубинина–Радушкевича подтвердил значимые различия: (–)- α -пинен ($W_0=0,51$) заполняет в два раза больше микропор, чем (+)- α -пинен ($W_0=0,27$), благодаря меньшему размеру. Однако характеристическая энергия адсорбции у (+)- α -пинена выше ($E=17,5$ против 15,2 у (–)- α -пинена), что указывает на более прочное связывание с поверхностью адсорбента и, соответственно, на необходимость затраты большей энергии для десорбции.

Таким образом, борофосфат $(\text{NH}_4)_4[\text{H}_2\text{B}_2\text{P}_4\text{O}_{16}]$ проявил выраженную энантиоселективность и может рассматриваться как перспективный материал для разделения оптических изомеров.

Литература

1. Xing, H., et al., Spontaneous crystallization of a new chiral open-framework borophosphate in the ionothermal system. *Dalton Trans*, 2010(9): p. 3

© Изibaева Д.В., Нуретдинова А.Ш., Утеева Ж.Д., 2025

УДК 541.14:547.551.2

СЕНСОРНАЯ ПЛАТФОРМА НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСА Ni(II) ДЛЯ РАСПОЗНАВАНИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ НАПРОКСЕНА

Ишмакаева Г.И., Мухаметдинов Ч.Р., Зильберг Р.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Напроксен (Nap) – нестериоидный противовоспалительный препарат с жаропонижающим и противовоспалительным действием, который существует в виде двух энантиомеров. Поскольку R-энантиомер обладает весьма негативными эффектами на организм человека, в фармацевтическом рынке используется только S-Nap, что обуславливает необходимость контроля энантиочистоты препаратов Nap.

Цель исследования заключается в разработке энантиоселективного вольтамперметрического сенсора [1–3] на основе пастового электрода из графитированной термической сажи, модифицированный хиральным комплексом никеля Ni(II). Для изучения способностей ЭВС распознавать энантиомеры Nap, вольтамперограммы регистрировали в

дифференциально-импульсном режиме (ДИВ). С помощью ДИВ было установлено, что сенсор CBPE@(S)-Ni более чувствителен к S-Nap, $i_{p1S}/i_{p1R} = 1,43$ (для первого пика) и $i_{p2S}/i_{p2R} = 1,27$ (для второго пика), ΔE по обоим пикам окисления 10 мВ. Энантиодифференцированный аналитический сигнал сразу по двум пикам окисления увеличивает надежность идентификации энантиомеров.

Таблица 1
ДИВ-характеристики 1 мМ растворов энантиомеров Nap на CBPE и CBPE@(S)-Ni (фосфатный буферный раствор pH=6,86, v=20 мВ/с)

| Параметр | CBPE | | CBPE@(S)-Ni | |
|-------------------|----------|----------|-------------|----------|
| | (R)-Nap | (S)-Nap | (R)-Nap | (S)-Nap |
| 1 пик | | | | |
| E_{p1} , мВ | 910±3 | 910±4 | 910±2 | 920±3 |
| i_{p1} , мкА | 6.11±0.0 | 6.17±0.1 | 4.99±0.0 | 7.16±0.0 |
| | 8 | 1 | 3 | 6 |
| ΔE , мВ | — | — | | 10 |
| i_{p1S}/i_{p1R} | — | — | | 1.43 |
| 2 пик | | | | |
| E_{p1} , мВ | 1190±2 | 1190±4 | 1180±3 | 1190±4 |
| i_{p1} , мкА | 6.45±0.0 | 6.45±0.0 | 5.84±0.0 | 7.42±0.0 |
| | 9 | 7 | 5 | 8 |
| ΔE , мВ | — | — | | 10 |
| i_{p1S}/i_{p1R} | — | — | | 1.27 |

Предложенный сенсор успешно апробирован для определения энантиомеров Nap в биологических жидкостях и лекарственных формах. Стандартное отклонение не выше 4,7%, а правильность определения в диапазоне 99,2–101,3%. Разработанный сенсор характеризуется простотой изготовления, стабильностью при хранении, а по параметрам энантиоселективности превосходит многие сенсоры, ранее описанные в литературе [4–10].

Литература

1. Майстренко В. Н., Евтугин, Г. А., Зильберг, Р. А. Энантиоселективные вольтамперометрические сенсоры. – Уфа: Башкирский государственный университет, 2018. – 189 с.
2. Maistrenko V.N., Evtyugin G.A., Zilberg R.A. Enantioselective Voltammetric Sensors: New Solutions // Journal of Analytical Chemistry. – 2018. – V. 73, №. 1. – P. 1-9
3. Maistrenko V.N., Zil'berg R.A. Enantioselective Voltammetric Sensors on the Basis of Chiral Materials // Journal of Analytical Chemistry. – 2020. – V. 75, №. 12. – P. 1514–1526.
4. Гизатов Р. Р., Терес Ю. Б., Галимов М. Н. [и др.] Синтез и применение хелатных комплексов $[Zn(L-ARG)2(H2O)]$ и $[Zn(L-ARG)2(H2O)]^{2-}$ в

- качестве хиральных селекторов // Координационная химия. – 2025. – Т. 51, № 5. – С. 315–326.
5. Khromova O.V., Smol'yakov A.F., Zil'berg R.A. [et al.] Chiral Cobalt(III) Complexes Based on (1R,2R)-Cyclohexanediamine and 4-Bromo-5-methylsalicylaldehyde: Synthesis, Modification, and Application in Catalysis and Enantioselective Sensors // Russian Journal of Coordination Chemistry. – 2025. – V. 51, №. 3. – P. 200–210.
 6. Zilberg R. A., [et al.] 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 // Journal of Analytical Chemistry. – 2023. – V. 78, №. 7. – P. 933–944.
 7. Zilberg R.A., Berestova T.V., Gizatov R.R. [et al.] Chiral selectors in voltammetric sensors based on mixed phenylalanine/alanine Cu(II) and Zn(II) complexes // Inorganics. – 2022. – V. 10, №. 8. – P. 117.
 8. 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.
 9. Zilberg, R.A., Teres, Y.B., Vakulin, I.V. [et al.] Voltammetric sensor for naproxen enantiomers based on a pasteelectrode modified with a Chiral nickel (II) complex // Chirality. – 2025. – V. 37, №. 2. – P. e70025.
 10. Gizatov R. R., Teres Yu. B., Galimov M. N. [et al.] Synthesis and Application of Chelate Complexes $[\text{Zn}(\text{L-arg})_2(\text{H}_2\text{O})]$ and $[[\text{Zn}(\text{L-arg})_2(\text{H}_2\text{O})](\text{SO}_4)_2]^{2-}$ as Chiral Selectors // Russian Journal of Coordination Chemistry. – 2025. – V. 51, №. 2. – P. 119-128.

© Ишмакаева Г.И., Мухаметдинов Ч.Р., Зильберг Р.А., 2025

УДК 544.022: 544.122.4

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛ
ИНДОМЕТАЦИНА В РАЗЛИЧНЫХ СРЕДАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ
МЕТОДА NOESY

Ковалев А.Е., Белов К.В., Ходов И.А.

*Институт химии растворов им. Г.А. Крестова Российской академии
наук*

Соединения с конформационно определяемым полиморфизмом представляют интерес как с фундаментальной, так и с прикладной точки зрения – при исследовании процессов нуклеации и поиске новых твердых форм с улучшенными характеристиками. Особую актуальность это явление приобретает в современной фармацевтической химии, поскольку пространственная структура малых молекул лекарственных соединений (ЛС) может изменяться в зависимости от внешних факторов. В связи с этим исследование паттернов стабилизации структуры может стать

ключом к решению вопросов формирования различных твердых форм с улучшенными физико-химическими свойствами [1].

В настоящей работе, в качестве объекта исследования выбрано кислород- и азотсодержащее соединение индометацин (ИНД) (см. рис. 1), которое является нестероидным противовоспалительным препаратом и используется в терапии ревматических заболеваний. Стоит отметить, что ИНД способен находится в син- и анти-конформациях в зависимости от расположения парахлорбензоильного фрагмента относительно индольного остова. Именно данные группы конформеров определяют формирование различных твердых форм исследуемого ЛС [2]. Эффективным инструментом для определения химической и пространственной структуры, а также количественной оценки долей групп конформеров малых молекул в растворах, является спектроскопия ядерного магнитного резонанса (ЯМР) [3].

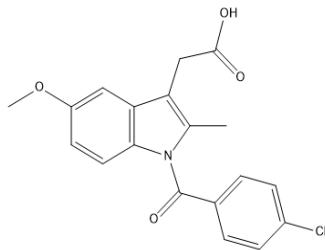


Рис. 1. Химическая структура индометацина (1-(4-хлорбензоил)-5-метокси-2-метил-1Н-индол-3-уксусной кислоты)

В рамках проведения исследования, получены 1D и 2D ЯМР спектры ИНД в среде дейтерированных растворителей – диметилсульфоксида ($\text{DMSO}-\text{d}_6$) и хлороформа (CDCl_3). На основе данных анализа двумерных карт ^1H - ^{13}C HSQC и ^1H - ^{13}C HMBC проведено отнесение резонансных сигналов в протонных и углеродных спектрах ЯМР соответствующим группам атомов в структуре объекта исследования. Данные о значениях химических сдвигов резонансных сигналов в спектре ^1H ЯМР позволили подтвердить отнесение кросс-пиков на спектрах ^1H - ^1H NOESY, благодаря чему удалось получить информацию о значениях межъядерных расстояний, которыми характеризуются конформационные изменения. С использованием модели двухпозиционного обмена установлено соотношение долей син- и анти-конформеров молекул ИНД в средах растворителей, характеризующихся разным значением полярности, а именно более полярного – $\text{DMSO}-\text{d}_6$ (68.4% и 31.6%) и менее полярного – CDCl_3 (15.3% и 84.7%). На основании полученных результатов можно сделать вывод, что изменение среды растворителя приводит к смене преобладающей группы конформеров с син- на анти-. Кроме того, полученные результаты могут стать основой для

целенаправленного создания новых форм ИНД с улучшенными характеристиками, а также улучшения известных.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ № 24–23–00318.

Литература

1. Sobornova V.V., Belov K.V., Krestyaninov M.A., Khodov I.A. Influence of Solvent Polarity on the Conformer Ratio of Bicalutamide in Saturated Solutions: Insights from NOESY NMR Analysis and Quantum-Chemical Calculations. – Int. J. Mol. Sci., 2024. – 8254 art.no.
2. Hori T., Ishijima J., Yokomizo T., Ago H., Shimizu T., Miyano M., et. al. Crystal structure of anti-configuration of indomethacin and leukotriene B₄ 12-hydroxydehydrogenase/15-oxo-prostaglandin 13-reductase complex reveals the structural basis of broad spectrum indomethacin efficacy. – J. Biochem., 2006. – 457–466 p.
3. Khodov I., Dyshin A., Efimov S., Ivlev D., Kiselev M. High-pressure NMR spectroscopy in studies of the conformational composition of small molecules in supercritical carbon dioxide. – J. Mol. Liq., 2020. – 113113 art.no.

© Ковалев А.Е., Белов К.В., Ходов И.А., 2025

УДК 577.151.45 + 542.943 + 535.379

ВЛИЯНИЕ ДОБАВОК НА ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИЮ ПРИ ЛАККАЗНОМ ОКИСЛЕНИИ ТРЕХАТОМНЫХ ФЕНОЛОВ

Кравченко Е.М., Одарюк И.Д., Дорошевич В.С.

Донецкий государственный университет, Донецк, Россия

Окисление ряда многоатомных фенолов молекулярным кислородом в присутствии ферментов лакказ, так же, как и в условиях автоокисления в щелочной водной среде [1], сопровождается хемилюминесцентным свечением. Природа эмиттеров свечения и элементарные стадии ферментативного окисления, ответственные за это свечение, до конца не ясны.

Целью данной работы было выяснение влияния добавок, способных изменять скорость радикальных процессов, на хемилюминесценцию при окислении трехатомных фенолов в присутствии лакказы *Trametes versicolor*.

Ионы Cu(II) ингибируют радикально-цепное автоокисление фенолов в водных средах. [2]. При лакказном окислении пирогаллола и флороглюцина ионы Cu(II) вызывают снижение интенсивности хемилюминесценции, зависящее от концентрации, проявляющееся как при включении меди в реакционную смесь до начала реакции, так и при введении на максимуме интенсивности хемилюминесценции (рис. 1). Для достижения заметного гасящего эффекта требуется использовать высокие концентрации меди, превосходящие в несколько раз концентрацию

окисляющегося фенола. При добавлении в реакционную смесь пероксида водорода в концентрации, равной концентрации фенолов, свечение практически прекращается. Примечательно, что эти добавки практически не изменяют скорость накопления продуктов лакказного окисления пирогаллола и флороглюцина, определяемую спектрофотометрически. Небольшой эффект наблюдается лишь при высоких концентрациях ионов меди и пероксида водорода, на 1-2 порядка превышающих концентрации субстратов, то есть, вероятно, объясняется частичной денатурацией фермента. Такие же закономерности характерны для окисления других субстратов лакказы. Тот факт, что влияние на скорость изменения концентраций реагентов минимально, указывает на протекание основной части радикальных превращений внутри сферы активного центра фермента. С другой стороны, само наличие хемилюминесцентного свечения и его чувствительность к этим добавкам говорит в пользу выхода небольшой доли радикальных интермедиаторов из активного центра и их неферментативных превращений.

Небольшие количества ABTS, быстро окисляющегося в реакционной смеси до стабильного катион-радикала и проявляющего медиаторные свойства, повышают интенсивность свечения при лакказном окислении пирогаллола примерно на порядок (рис. 2).

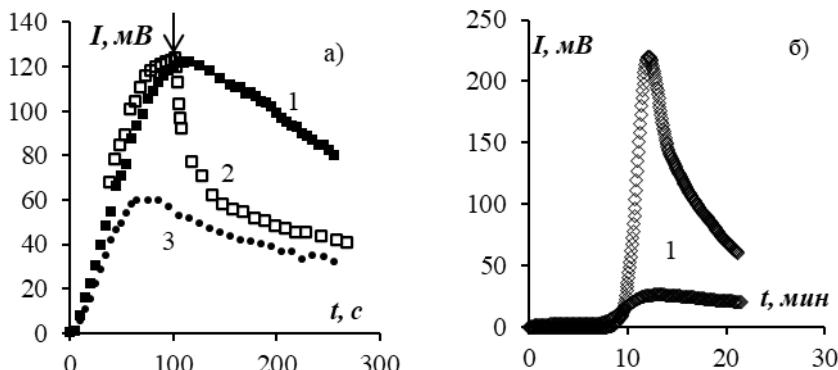


Рис.1. Кинетические кривые хемилюминесценции при лакказном окислении пирогаллола. цитр. буфер pH 4,6; T 308 K.

- а) добавки Cu^{2+} . $[\text{S}]_0 = 50 \text{ мкМ}$, $[\text{E}]_0 = 50 \text{ мг/л}$. 1) контроль, 2) $0,2 \text{ мМ Cu}^{2+}$ с начала реакции; 3) $0,2 \text{ мМ Cu}^{2+}$ введено на максимуме (стрелка).
 б) добавки ABTS. $[\text{S}]_0 = 0,5 \text{ мМ}$, $[\text{E}]_0 = 20 \text{ мг/л}$, 1) контроль, 2) 20 мкМ ABTS .

Введение аскорбиновой кислоты как с начала реакции лакказного окисления, так и на максимуме хемилюминесцентной кривой приводит к появлению периодов индукции на кинетических кривых,

пропорциональных концентрации добавки, не влияя на интенсивность свечения по его завершению. Однако в отличие от процесса автоокисления, где ингибиование связано с восстановлением радикальных интермедиатов и хинонов, при лакказном окислении имеет место также конкурентное ингибиование – аскорбиновая кислота является субстратом лакказы.

Характер влияния добавок, ускоряющих и ингибирующих радикальное окисление фенолов, с одной стороны, подтверждает радикальный механизм их окисления и в присутствии фермента (ABTS, аскорбиновая кислота), а с другой указывает на вклад неферментативных стадий в процесс окисления и в появление эмиттеров хемилюминесценции (Cu^{2+} , H_2O_2).

Исследования проводились в рамках гос. задания (№ госрегистрации 124012400355-7).

Литература

1. Кравченко Е. М. Особенности механизма ферментативного окисления многоатомных фенолов молекулярным кислородом [Текст] / Е. М. Кравченко, И. Д. Одарюк // Вестн. Новгородского гос. ун-та. – 2017. – Вып. 5 (103). – 65-70.
2. Автоокисление фенольных антиоксидантов в водных средах [Текст]: монография / А. Н. Шендрик [и др.]. – Донецк: ДонНУ, 2013. – 147 с.

© Кравченко Е.М., Одарюк И.Д., Дорошкевич В.С., 2025

УДК 667.6

ПРОИЗВОДСТВО ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ГРУНТОВКИ НА ПОЛИУРЕТАНОВОЙ ОСНОВЕ В РАМКАХ ИМПОРТОЗАМЕЩЕНИЯ: ОТ ВЫЗОВА К ВОЗМОЖНОСТИ

Красникова А.В., Тимофеев В.П., Ковшов А.Ю.
ООО «Автопласт», Нефтекамск, Россия

В условиях современных геополитических реалий, импортозамещение становится не просто трендом, а стратегической необходимостью для развития отечественной промышленности. Производство специальных двухкомпонентных (2К) материалов, таких как грунтовки на полиуретановой (ПУ) основе, имеет ключевое значение для широкого спектра отраслей – от строительства и машиностроения до мебельной промышленности и производства спортивных покрытий. Этот процесс представляет собой комплексную задачу, требующую глубокого анализа, технологических разработок и инвестиций, но в то же время открывает значительные возможности для роста и укрепления отечественного рынка ПУ материалов.

Исторически сложилось так, что значительная часть сырья и готовых 2К ПУ грунтовок импортировалась. Это создавало зависимость от зарубежных поставщиков, высокие риски возникновения перебоев в

поставках, значительные колебания цен и сложности в адаптации 2К ПУ продуктов к специфическим требованиям отечественных потребителей.

Основным компонентом 2К ПУ систем является полиол, вторым ключевым компонентом – изоцианат. Эти два компонента при смешении, вступают в реакцию, образуя полиуретановую связь (-NH-CO-O-), которая является основой всех ПУ.

Грунтовка была получена методом диспергирования пигментов, наполнителей и функциональных добавок в растворе полиола (Компонент А). При непосредственном нанесении на поверхность в нее вводился изоцианат (Компонент В) и состав доводился до рабочей вязкости разбавителем (Компонент С) в соотношении:

| Компонент | По объему | По массе |
|-----------|-----------|----------|
| A | 100 | 100 |
| B | 25 | 14 |
| C | 25 | 13 |

Кроме вопроса с импортозамещением решался вопрос безопасного применения грунтовки в окрашивании изделий из стеклопластика. Так вместо ароматического изоцианата, который относится к особо токсичным веществам был использован алифатический изоцианат, считающийся более экологичным по сравнению с ароматическим и является менее токсичным.

Еще одним плюсом использования алифатического изоцианата стало увеличение стойкости грунтовки к воздействию УФ - излучения, что позволило перевозить загрунтованные детали к месту покраски без опасения фотохимической деградации лакокрасочного покрытия, приводящее к необратимому изменению цвета (пожелтение). В таблице 1 показаны показатели качества для заграничной и полученной новой ПУ грунтовки

Таблица 1
Сравнение свойств 2К ПУ грунтовок

| Наименование показателя | | Грунтовка | |
|-------------------------|-------------|-----------|------------|
| | | импортная | полученная |
| 1.Плотность, г/л | Компонент А | 1660 | 1660 |
| | Компонент В | 960 | 960 |
| | Компонент С | 892 | 890 |

Окончание табл. 1

| | | | |
|---|------|------------|-----------|
| 2.Время высыхания до степени 3, не более | 20°C | 3-3,5 часа | 3 часа |
| | 60°C | 30-40 мин | 40 мин |
| 3.Твердость пленки по маятниковому прибору ТМЛ, усл. ед., не менее | | 0,40 | 0,43 |
| 4.Эластичность пленки при изгибе, мм, не более | | 1 | 1 |
| 5.Прочность пленки при ударе на приборе типа У-1, см не менее | | 50 | 50 |
| 6.Адгезия пленки, баллы, не более | | 1 | 0 |
| 7.Жизнеспособность смеси при $(20\pm0,5)^\circ\text{C}$, час, не менее | | 1,5 | 1,5 |
| 8.Способность пленки шлифоваться | | Шлифуется | Шлифуется |

Показана возможность производства отечественной 2К ПУ грунтовки с применением алифатического изоцианата по свойствам не уступающим импортным грунтовкам.

Литература

1. 12.1.005-76 Система стандартов безопасности труда (ССБТ). Воздух рабочей зоны. Общие санитарно-гигиенические требования.
2. Химия полиуретанов [Текст] / Дж. Х. Саундерс, К.К. Фриш; Пер. с англ. З. Кочновой А. и Коркишко Ж.Т. Под ред. д-ра хим. наук С.Г. Энтелиса. Москва: Химия, 1968. 1 т.

© Красникова А.В., Тимофеев В.П., Ковшов А.Ю., 2025

УДК 541.64+541.68+547.467

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ НИЗКО- И ВЫСОКОМЕТОКСИЛИРОВАННОГО ПЕКТИНОВ И ДИГИДРАЗИДОВ ДИКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ

Лежнина В.О.¹, Искандьрова Р.Г.², Сагитова А.Ф.², Мингалеева Г.Р.²

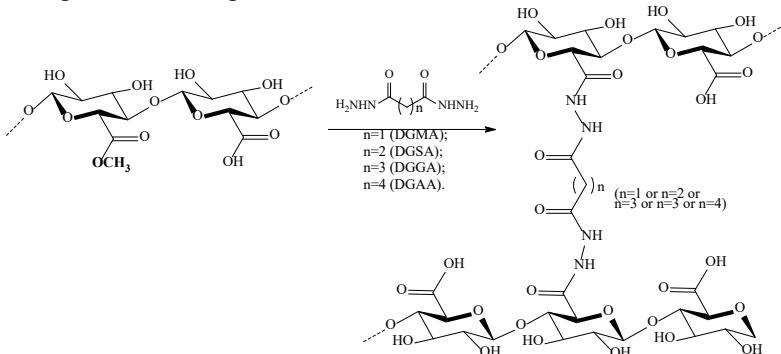
¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия.

Гидрогели являются перспективными материалами для применения в различных высокотехнологичных областях и особенно в биомедицинских технологиях. Поиск факторов, позволяющих регулировать молекулярное строение полимерных сетей гидрогелей, а следовательно баланс их

вязкоупругих свойств, важен для настройки механических свойств гидрогелевых материалов под конкретную задачу.

В данной работе проведены исследования синтеза и реологических свойств гидрогелей из пектина с разным содержанием метоксильных групп (определяли степень этерификации DE%), сшитого ацилгидразонными группами с помощью дигидразидов дикарбоновых кислот в отсутствии катализаторов. Показано, что ковалентно сшитые гидрогели формируются из высокометоксилированного пектина (HP, DE=77%) даже при малом содержании кросс-линкеров. Однако для получения химически сшитых гидрогелей из низкометоксилированного пектина (LP, DE=41%) требуется большее количество кросс-линкеров. Использование 2-, 4-, 6- и 10-% растворов дигидразидов карбоновых кислот в качестве кросс-линкеров позволяет регулировать реологические и механические свойства гидрогелей в широких пределах за счет концентрации ацилгидразонных сшивок.



На основании реологических данных были выполнены расчеты параметров сети (табл.1), где G -модулья сдвига, ν -средняя молярная концентрация сшивок, ξ -средний размер ячеек, M_c -средняя величина молекулярной массы фрагмента цепи между соседними сшивками. Установлено, что при варьировании концентрации метоксильных групп и концентрации кросс-линкеров могут быть получены гидрогели, для которых модуль потерь выше модуля накопления (текущие гидрогели с низкой концентрацией ковалентных сшивок) и для которых модуль накопления выше модуля потерь (упругие гидрогели с высокой концентрацией ковалентных сшивок). При этом модуль сдвига пектиновых гидрогелей, непосредственно характеризующий их механическую прочность, изменяется в пределах от 553 ± 40 до 22345 ± 4851 Па.

Таблица 1

Модуль сдвига и параметры молекулярного строения полимерных сетей гидрогелей на основе LP и HP. Результаты указаны как среднее значение по трем реологическим тестам \pm стандартное отклонение.

| Шифр | Масс. % кросс-линкера | G , Па | v , моль/м ³ | ζ , нм | M_c , Кг/моль |
|-------------------------------|-----------------------|------------------|---------------------------|----------------|-----------------|
| Гидрогели на основе HP | | | | | |
| Кросс-линкер - DGMA | | | | | |
| HP1MA | 2 | 553 \pm 40 | 0.23 \pm 0.05 | 23.9 \pm 1.9 | 288 \pm 69 |
| HP2MA | 4 | 2140 \pm 160 | 0.80 \pm 0.1 | 15.1 \pm 0.8 | 73 \pm 13 |
| HP3MA | 6 | 9416 \pm 1755 | 3.92 \pm 0.70 | 9.3 \pm 0.6 | 17 \pm 5 |
| HP4MA | 10 | 21345 \pm 4378 | 8.00 \pm 0.76 | 7.1 \pm 0.4 | 7 \pm 2 |
| Кросс-линкер - DGSA | | | | | |
| HP1SA | 2 | 578 \pm 66 | 0.23 \pm 0.02 | 23.7 \pm 1.7 | 273 \pm 78 |
| HP2SA | 4 | 2210 \pm 159 | 0.86 \pm 0.1 | 15.3 \pm 0.4 | 72 \pm 17 |
| HP3SA | 6 | 9400 \pm 1164 | 3.71 \pm 0.87 | 9.5 \pm 0.5 | 16 \pm 2 |
| HP4SA | 10 | 21850 \pm 1842 | 8.15 \pm 0.16 | 7.1 \pm 0.1 | 7 \pm 1 |
| Кросс-линкер - DGGA | | | | | |
| HP1GA | 2 | 654 \pm 118 | 0.30 \pm 0.14 | 23.1 \pm 1.8 | 221 \pm 56 |
| HP2GA | 4 | 2279 \pm 192 | 0.91 \pm 0.07 | 15.1 \pm 0.4 | 70 \pm 15 |
| HP3GA | 6 | 9852 \pm 366 | 3.99 \pm 0.25 | 9.3 \pm 0.2 | 15 \pm 3 |
| HP4GA | 10 | 22031 \pm 3002 | 8.13 \pm 0.94 | 7.2 \pm 0.2 | 7 \pm 2 |
| Кросс-линкер - DGAA | | | | | |
| HP1AA | 2 | 702 \pm 60 | 0.28 \pm 0.07 | 20.3 \pm 1.5 | 207 \pm 62 |
| HP2AA | 4 | 2296 \pm 159 | 0.80 \pm 0.05 | 15.7 \pm 0.6 | 79 \pm 14 |
| HP3AA | 6 | 9991 \pm 567 | 3.97 \pm 0.45 | 9.3 \pm 0.4 | 15 \pm 1 |
| HP4AA | 10 | 22566 \pm 4851 | 8.04 \pm 1.37 | 7.3 \pm 0.8 | 7 \pm 2 |

| Гидрогели на основе LP | | | | | |
|------------------------|----|--------|-----------|----------|---------|
| LP4MA | 10 | 559±15 | 0.22±0.05 | 24.3±1.1 | 233±68 |
| LP4SA | 10 | 565±20 | 0.22±0.02 | 24.0±1.2 | 228±99 |
| LP4GA | 10 | 617±19 | 0.24±0.03 | 23.3±1.1 | 221±97 |
| LP4AA | 10 | 690±29 | 0.27±0.04 | 22.5±1.1 | 213±101 |

Такие широкие диапазоны изменения реологических и механических свойств полученных гидрогелей позволяют рассматривать их в качестве многообещающих кандидатов как для инъекционных гидрогелей, так и для биоразлагаемых гидрогелевых имплантов и медицинских пленок. Эти материалы в последнее время активно используются в технологиях адресной доставки лекарств и тканевой инженерии.

© Лежнина В.О., Исканьярова Р.Г., Сагитова А.Ф., Мингалеева Г.Р., 2025

УДК 66.046.7

УСТАНОВЛЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ ФАКТОРОВ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИХ ТЕМ-ПЕРАТУРУ КИПЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Лифанов А.Д.¹, Лифанова Е.Г.²

¹*Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия*

²*Казанский (Приволжский) Федеральный университет, Казань, Россия*

Температура кипения является фундаментальным свойством химических соединений, позволяя разрабатывать новые химические технологии и промышленные процессы. Именно при температуре кипения начинается переход вещества из жидкого состояния в газообразное (кипение). Исследование физико-химических основ этого процесса необходимо в различных областях науки и техники [1-3]. Поэтому, например, информация о температуре кипения используется в процессах нефтепереработки и технологии органических веществ.

Установление структурных факторов, определяющих температуру кипения органических соединений необходимо для обеспечения безопасности рабочих мест на производстве и в лабораториях. Кроме того, на температуре кипения основана энергоэффективность технологических процессов и снижение затрат на разработку новых материалов и совершенствование существующих технологий [4-5]. Перспективным подходом к прогнозированию температуры кипения органических соединений являются методы машинного обучения.

Для построения моделей машинного обучения нами осуществлен сбор данных из базы данных PubChem [4]. Мы собрали информацию о температуре кипения для 1588 органических соединений. Информация

была извлечена из базы данных PubChem [4] в виде строк SMILES (The Simplified Molecular-Input Line-Entry System) [5] с соответствующими значениями температуры кипения. С использованием библиотеки Lazy Predict нами обучены и оценены несколько стандартных алгоритмов машинного обучения на данном наборе данных.

Лучшие результаты получены для модели, построенной с использованием ансамблевых методов AdaBoostRegressor и AdaBoostClassifier.

С использованием дескрипторов RDKit, PaDEL и CDK [6-8], по всей обучающей выборке из 1271 органических соединений получены следующие показатели оценки качества регрессионных моделей: на обучающей выборке $R^2 = 0.89$, RMSE 43.67 К и на тестовой выборке $R^2=0.85$ и RMSE = 44.25 К.

Для решения задачи классификации в наборе данных выделили два класса: легкокипящие жидкости – класс «0» (Ткип ≤ 423.15 К) (n=1053) и вы-сококипящие – класс «1» (Ткип > 423.15 К) (n=535). Статистические характеристики модели имеют следующие значения: ACC=0.94, precision (по классу «0» - 0.92, по классу «1» - 0.95), recall (по классу «0» - 0.91, по классу «1» - 0.96), F1-score (по классу «0» - 0.92, по классу «1» - 0.96).

С целью установления структурных факторов на температуру кипения органических соединений нами проведен структурный анализ органических соединений с целью выявления «сильных» и «слабых» функциональных групп [9-12]. Показана высокая корреляция температуры кипения с молекулярной массой ($r=0.91$), числом вращающихся связей ($r=0.86$) и числом ато-мов углерода ($r=0.84$).

Литература

1. Ziyatdinov A., Marco S., Chaudry A., Persaud K., Caminal P., Perera A. Drift compensation of gas sensor array data by common principal component analysis // Sensors and Actuators B: Chemical. – 2010. – V. 146. – N. 1–3. – P. 460–465.
2. Morgan H.L. The Generation of a Unique Machine Description for Chemical Structures-A Technique Developed at Chemical Abstracts Service / H.L. Morgan // Journal of Chemical Documentation. – 1965. – V. 5, Is. 2. – P. 107-113.
3. D.K. Agrafiotis. A Constant Time Algorithm for Estimating the Diversity of Large Chemical Libraries / D.K. Agrafiotis. // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. – 2001. – T. 41, № 1. – C. 159-167.
4. <http://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov.siterate.org/>
5. David Weininger SMILES, a chemical language and information system. Introduction to methodology and encoding rules. // Journal of Chemical Information and Computer Sciences. – Vol.28(1). – P. 31-36.

6. <https://rdkit.org/>
7. <http://padel.nus.edu.sg/software/padeldescriptor/>
8. <http://sourceforge.net/projects/cdk>
9. Salvador M.M., Budka M., Gabrys B.. IEEE Transactions on Automation Science and Engineering. 2018. V. 16 (2). - P. 946-959.
10. Bergstra J., Yamins D., Cox D. Making a science of model search: Hyperparameter optimization in hundreds of dimensions for vision architectures, in: Int. Conf. Mach. Learn., 2013: pp. 115–123.
11. Powers D.M. (2008). Evaluation: From Precision, Recall and F-Factor to ROC, Informedness, Markedness & Correlation. ArXiv.
12. Guha R., Van Drie J.H. Structure-Activity Landscape Index: Identifying and Quantifying Activity Cliffs / R. Guha, J.H. Van Drie. // Journal of Chemical Information and Modeling. – 2008. – Т. 48, No 3. – С. 646-658.

© Лифанов А.Д., Лифанова Е.Г., 2025

УДК 543.068.8

ПРИМЕНЕНИЕ МАССИВА ПЬЕЗОСЕНСОРОВ ДЛЯ ЭКСПРЕСС-
ОПРЕДЕЛЕНИЯ СВОБОДНЫХ ЛЕГКОЛЕТУЧИХ КОМПОНЕНТОВ
В ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТАХ

Лифанова Е.Г.¹, Лифанов А.Д.²,

¹Казанский (Приволжский) Федеральный университет, Казань, Россия

²Казанский национальный исследовательский технологический
университет, Казань, Россия

В настоящее время идентификация свободных легколетучих органических соединений в пищевых продуктах является актуальной задачей, позволяющей судить о их качестве и безопасности [1-3]. Для этих целей применяют системы типа «электронный нос», включающий массив пьезосенсоров, совокупность которых позволяет получить индивидуальный «отпечаток» запаха.

Сканирование летучих органических соединений осуществляется массивов пьезокварцевых сенсоров с перекрестной чувствительностью. Затем полученная совокупность аналитических сигналов (многомерный отклик системы) анализируется с использованием методов машинного обучения [4-5].

В нашей работе использованы сенсоры на основе селективных и универсальных полимерных сорбентов (полиэтиленгликоль себацинат, полиэтиленгликоль адипината, дициклогексано-18-краун-6, Тритон X-100, полиэтиленгликоль 2000, полиэтиленгликоль сукцинат, полидизтиленгликоль сукцинат, поливинилпирролидон, Tween 80, триоктилфосфин оксид, полиоксиэтилен бис арсенат, пчелиный воск). Данный массив сенсоров характеризуются равномерной поверхностью пленок и хорошей воспроизводимостью сорбционных свойств по

отношению к основным летучим органическим соединениям пищевых продуктов (спиртов, альдегидов, кетонов, карбоновых кислот и т.п.).

Нами исследован процесс формирования многомерного сигнала мультисенсорной системы, в результате протекающих адсорбционных процессов на покрытиях пьезокварцевых сенсоров. Это позволило разработать алгоритмы извлечения наиболее информативных признаков для оценки совокупности характеристик объекта и распознавания типичных химических образов по геометрическим параметрам для экспресс-оценки подлинности и безопасности пищевых продуктов [6, 7].

В результате разработана мультисенсорная интеллектуальная система химического анализа объектов (качественного и количественного), включающая рекомендации по снижению размерности в пространстве признаков, выбору архитектуры нейронных сетей и оптимизации процесса обучения моделей для решения классификационных и регрессионных задач на основе многомерных данных, полученных с сенсоров электронного носа.

Результативность предложенного подхода подтверждена разработанными методиками экспресс-оценки безопасности и качества пищевых продуктов, определения массового содержания сои в мясных изделиях, созданием портативного прибора, который можно использовать для экспресс-анализа газов в пищевой и химической отраслях промышленностях, медицине и во время экологического мониторинга [7].

Литература

1. Ziyatdinov A., Marco S., Chaudry A., Persaud K., Caminal P., Perera A. Drift compensation of gas sensor array data by common principal component analysis // Sensors and Actuators B: Chemical. – 2010. – V. 146. - N. 1–3. – P. 460–465.
2. Natale C., Davine F., D'Amico A., A self-organizing system for pattern classification: time varying statistics and sensor drift effects // Sensors and Actuators B: Chemical. – 1995. – V. 25. – P. 237-241.
3. Holmberg M., Davide F., DiNatale C., D'Amico A., Winquist F., Lundstrom I., Drift counteraction in odour recognition applications: lifelong calibration method // Sensors and Actuators B: Chemical. – 1997. – V. 42. N. 3. – P. 185-194.
4. Escuderosa M.E., Sánchezb S., Jiméneza A., Virgin olive oil sensory evaluation by an artificial olfactory system, based on quartz crystal microbalance (QCM) sensors // Sensors and Actuators, B: Chemical. – 2010. – V. 147. – N 1. – P. 159-164.
5. Di Natale C., Macagnano A., Nardis S., Paolesse R., Falconi C., Proietti E., Siciliano P., Rella R., Taurino A., D'Amico A., Comparison and integration of arrays of quartz resonators and metal-oxide semiconductor chemoresistors in the quality evaluation of olive oils // Sensors and Actuators, B: Chemical. – 2001. – V. 78. – P. 303-309.

6. Reboredo-Rodríguez P., González-Barreiro C., Cancho-Grande B., Simal-Gándara J., Dynamic headspace/GC-MS to control the aroma fingerprint of extra-virgin olive oil from the same and different olive varieties // Food Control. – 2012. – V. 25. – № 2. – P. 684-695.
7. Haddi Z., Alami H., El Bari N., Tounsi M., Barhoumi H., Maaref A., Jaffrezis-Renault N., Bouchikhi B., Electronic nose and tongue combination for improved classification of Moroccan virgin olive oil profiles // Food Research International. – 2013. – V. 54. № 2. – P. 1488-1498.

© Лифанова Е.Г., Лифанов А.Д., 2025

УДК: 543.543-4:543.42.543.421

ОРГАНИЧЕСКИЙ РЕАГЕНТ ЦИНКОН И ЕГО ИК-СПЕКТРЫ

Мадаминова К.Н., Аширов М.А.

Хорезмская академия имени Мамуна. г. Хива. Узбекистан

Цинкон (2-карбокси-2'-гидрокси-5'-сульфоформазилбензол) привлёк внимание как колориметрический реагент для определения цинка и меди. Молекулярная формула цинкона показана на рисунке 1.

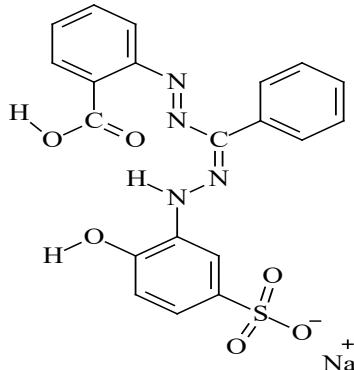


Рис. 1. Цинкон – натриевая соль 2 – гидрокси - 2'- карбокси - 5'-сульфоформазилбензола

Цинкон способен образовывать прочные комплексы с ионами металлов. Однако, с аналитической точки зрения, различные физико-химические свойства комплексов цинкона с ионами металлов полезны при разработке методов одновременного определения нескольких ионов в смесях [1]. Целью данной работы является изучение оптических и колориметрических характеристик натриевой соли цинкона – 2-гидрокси-2'-карбокси-5'-сульфоформазилбензола – в диапазоне pH 4–10, а также рассмотрение аналитических методов, необходимых для этого исследования. В структуре молекулы цинкона присутствуют функциональные группы $-\text{OH}$, $-\text{COOH}$, $-\text{SO}_3^{\text{Na}}$ и $-\text{N}=\text{N}-$, которые способны образовывать комплексы с ионами металлов (Zn^{2+} , Cu^{2+} , Fe^{3+} ,

Ni^{2+}). Для понимания механизма этого процесса необходимо изучить колебательные свойства молекулы реагента, и инфракрасная спектроскопия является одним из наиболее эффективных аналитических методов. Инфракрасная спектроскопия основана на измерении частот колебаний ковалентных связей в молекулах. Каждая связь в молекуле поглощает инфракрасное излучение определённой частоты, что позволяет получить информацию о наличии функциональных групп, их взаимодействиях и химическом окружении.

ИК-спектр раствора цинкона с концентрацией 1×10^{-4} М представлен на рисунке ниже.

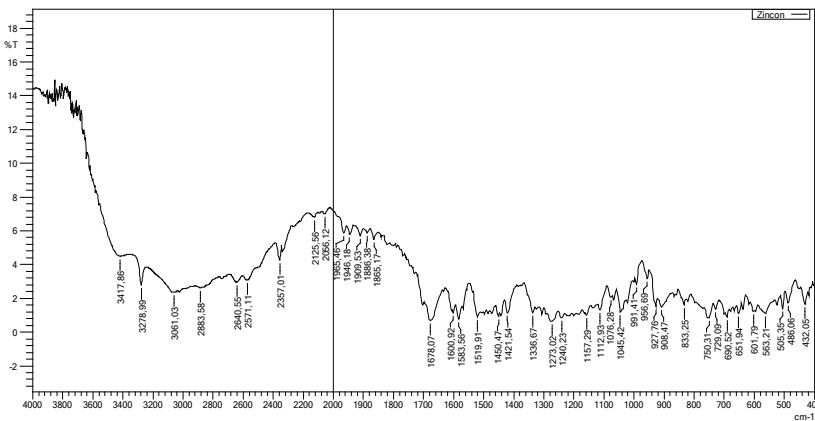


Рис. 2. ИК-спектр цинкона

Согласно результатам анализа, область поглощения $3200\text{--}3500\text{ см}^{-1}$ соответствует колебаниям $-\text{OH}$ -группы, связанной с ароматическим кольцом [2]. В спектре цинкона полоса поглощения при $3278,99\text{ см}^{-1}$ подтверждает наличие гидроксильной группы. Полосы в диапазоне $1450,47\text{--}1421,54\text{ см}^{-1}$ указывают на наличие азо-группы ($-\text{N}=\text{N}-$), связанной с ароматическим кольцом. Поглощение в области $1550\text{--}1510\text{ см}^{-1}$ соответствует асимметричным колебаниям карбоксилатной группы (COO^-), а в области около 1400 см^{-1} – симметричным колебаниям COO^- . Полосы в диапазоне $1421\text{--}1336,67\text{ см}^{-1}$ также свидетельствуют о присутствии симметричной COO^- -группы в структуре соли цинкона. Поглощения в области $1240,23\text{--}1157,29\text{ см}^{-1}$ относятся к группе $-\text{SO}_2\text{O}-\text{R}$ –, а полосы в диапазоне $651,94\text{--}601,79\text{ см}^{-1}$ – к колебаниям связи $-\text{O}-\text{Na}$.

Литература

- 1.Ruedas-Rama, M. J., Hall, E. *Analyst*. – 2009. – Vol. 134. – P. 159–169.
- 2.Тарасевич, Б.Н. ИК-спектры основных классов органических соединений: Справочные материалы. – Москва, 2012.

© Мадаминова К.Н., Аширов М.А., 2025

УДК 541.64

ВОЗМОЖНОСТЬ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МЕТИЛОВОГО ЭФИРА
ЭПОКСИДИРОВАННОГО СОЕВОГО МАСЛА В КАЧЕСТВЕ
ПЛАСТИФИКАТОРА ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА

Мазина Л.А., Нафикова Р.Ф., Закиева А.И., Ахметханов Р.М.
Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В настоящее время большая часть производимого поливинилхлорида перерабатывается в различные пластифицированные материалы с использованием широкого ассортимента пластификаторов [1].

Для получения малотоксичных пластифицированных ПВХ материалов в технологии производства материалов взаменены эпоксидированного соевого масла (ЭСМ) в последнее время находит применение метиловый эфир эпоксидированного соевого масла (МЭСМ).

В данной работе представлены закономерности термического и термоокислительного дегидрохлорирования ПВХ пластифицированного МЭСМ в сравнении с пластикатами содержащими ЭСМ.

Метиловый эфир в инертной и окислительной среде как и ЭСМ проявляют заметную стабилизирующую эффективность, очевидно, за счет дополнительного проявления эпоксидной группой термостабилизирующего эффекта при акцептировании НС1 по реакции [2].

Проведены исследования возможности использования образца пластификатора МЭСМ в составе ПВХ пластиката. Эффективность пластифицирующего действия образца оценивали в сравнении с серийно используемым в производстве пластификатором – диоктилфталатом. Установлено, что пластификатор МЭСМ способствует заметному повышению термостабильности ПВХ пластиката. Базовая композиция, содержащая МЭСМ, имеет более высокие значения показателя текучести расплава. Технологические показатели находятся на достаточно высоком уровне.

На основании полученных результатов можно рекомендовать использовать МЭСМ в качестве пластификатора для получения пластифицированных ПВХ материалов пищевого назначения.

Литература

1. Получения и свойства поливинилхлорида. Под. ред. Зильбермана Е.Н. - М.: Химия, 1968.- 432 с.
2. Minsker K.S., Kolesov S.V., Zaikov G.E. Degradation and Stabilization of Vinylchloride Based Polymers. - Pergamon Press Publ., London, 1988.- 508 p.

© Мазина Л.А., Нафикова Р.Ф., Закиева А.И., Ахметханов Р.М., 2025

УДК 544.421:542.978:547.775

2-ЦИАНО-Н'-ФЕНИЛАЦЕТОГИДРАЗИДА КАК ИНГИБИТОР
СВОБОДНОРАДИКАЛЬНОГО ОКИСЛЕНИЯ
КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ СУБСТРАТОВ

Мигранов А.Р., Якупова Л.Р., Грабовский С.А., Сафиуллин Р.Л.
Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Антиоксидантные свойства 2-циано-Н'-фенилацетогидразида были измерены в модельных системах радикально-цепного окисления кислородсодержащих углеводородов. Тетрагидрофуран и 1,4-диоксан служили как субстратами окисления, генерируя пероксильные радикалы, так и растворителями в модельной системе. Окисление субстратов осуществляли кислородом воздуха. Инициатором служил 2,2'-азо-бисизобутиронитрил. Дифференциальная манометрическая установка применялась для мониторинга кинетики реакции путем измерения потребления кислорода. Экспериментально установлено, что 2-циано-Н'-фенилацетогидразид замедляет процесс радикально-цепного окисления тетрагидрофурана и 1,4-диоксана. Из зависимости начальной скорости окисления субстрата от концентрации ингибитора найдены эффективная константа скорости реакции 2-циано-Н'-фенилацетогидразида с пероксильными радикалами тетрагидрофурана при температуре 303 К ($(2.4 \pm 0.2) \times 10^4 \text{ л}\cdot\text{моль}^{-1}\text{с}^{-1}$) и с радикалами 1,4-диоксана при температуре 333 К ($(16.3 \pm 1.1) \times 10^4 \text{ л}\cdot\text{моль}^{-1}\text{с}^{-1}$). По длительности индукционного периода рассчитан стехиометрический коэффициент ингибирования, который зависит от растворителя: (1.06 \pm 0.06) в среде тетрагидрофурана и (1.90 \pm 0.13) в среде 1,4-диоксана. Методом квантовой химии (SMD-M06-2X/MG3S) рассчитана структура наиболее стабильного таутомера 2-циано-Н'-фенилацетогидразида и прочности –N–H связей (76.2 и 77.8 ккал·моль $^{-1}$). Основываясь на результатах квантово-химических расчетов предположено, что механизм ингибирования таутомера 2-циано-Н'-фенилацетогидразидом включает перенос атома водорода от –N–H связи в α -положении относительно фенильного кольца ко вторичному пероксильному радикалу.

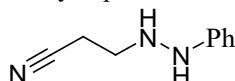


Рис. 1. Структурная формула 2-циано-Н'-фенилацетогидразида

Работа выполнена в соответствии с планом научно-исследовательских работ УфИХ УФИЦ РАН по теме «Кинетическое, спектрально-люминесцентное и теоретическое исследование ключевых интермедиатов в химических и биохимических процессах окисления» рег. № НИОКТР 125020601626-9.

© Мигранов А.Р., Якупова Л.Р., Грабовский С.А., Сафиуллин Р.Л., 2025

МГК-АНАЛИЗ ВРЕМЕННОЙ СЕПАРАЦИИ ЭКСТРАКЦИИ
САПОНИНОВ ИЗ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ

Мигранова В.Р., Сидельников А.В.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Сапонины представляют собой обширный класс поверхностно-активных гликозидов, широко распространенных в растительном мире и обладающих разнообразной биологической активностью. Традиционные методы анализа процессов экстракции, такие как ВЭЖХ и спектрофотометрия, не позволяют отслеживать кинетику процесса в реальном времени с высоким времененным разрешением.

В данной работе применен инновационный подход, сочетающий многоканальную электрохимическую детекцию с последующим многомерным анализом данных методом главных компонент (МГК). Это позволяет не только регистрировать динамику экстракции, но и выявлять скрытые закономерности в данных, соответствующие различным классам соединений.

Целью работы являлось исследование кинетики экстракции различных классов сапонинов из растительного сырья методом многоканальной амперометрии с последующим МГК-анализом для выявления временной сепарации процессов экстракции гликозидных, тритерпеновых и стероидных сапонинов.

Проведен МГК-анализ данных экстракции, зарегистрированных на мультиэлектродной системе (879 каналов, 407 временных точек). Анализ выявил три статистически значимые компоненты, описывающие 58.72% общей дисперсии данных: PC1 (33.43% дисперсии), PC2 (15.13% дисперсии) и PC3 (10.16% дисперсии).

Временные профили главных компонент МГК

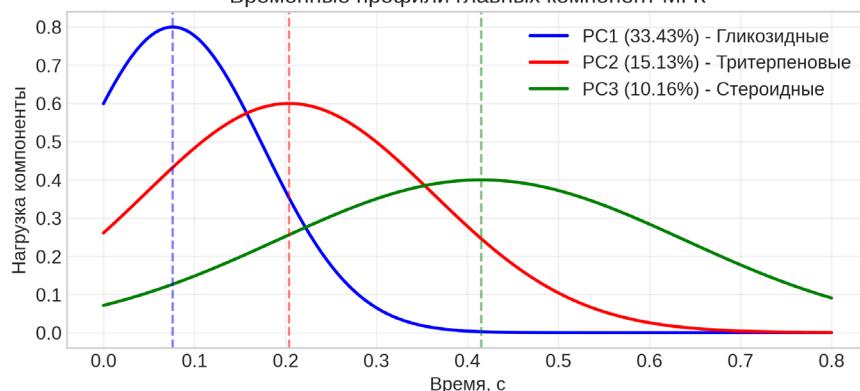


Рис. 1. Временные профили главных компонент МГК

Как показано на Рис. 1, наблюдается четкая временная сепарация процессов экстракции: максимум нагрузки PC1 соответствует времени 0.076 с и ассоциирован с экстракцией гликозидных сапонинов, PC2 (0.204 с) - тритерпеновых сапонинов, PC3 (0.415 с) - стероидных сапонинов. Такая последовательность объясняется различиями в полярности и молекулярной массе данных классов соединений.

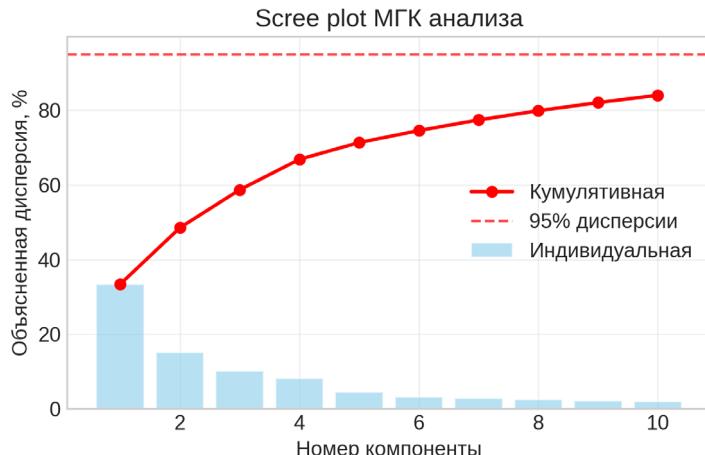


Рис. 2. Scree plot МГК анализа

Кластерный анализ подтвердил воспроизводимость процесса, выявив три стабильные группы каналов с различными кинетическими профилями. Установленные временные параметры позволяют оптимизировать процесс экстракции для селективного выделения целевых фракций сапонинов. Метод МГК демонстрирует высокую эффективность для анализа кинетики многокомпонентных систем экстракции.

Литература

- Wold S., Esbensen K., Geladi P. Principal component analysis // Chemometrics and intelligent laboratory systems. – 1987. – Vol. 2. – №. 1-3. – P. 37-52.
- Jolliffe I.T., Cadima J. Principal component analysis: a review and recent developments // Philosophical Transactions of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. – 2016. – Vol. 374. – №. 2065. – P. 20150202.
- Bro R., Smilde A.K. Principal component analysis // Analytical Methods. – 2014. – Vol. 6. – №. 9. – P. 2812-2831.

© Мигранова В.Р., Сидельников А.Б., 2025

СОРБЦИОННОЕ ИЗВЛЕЧЕНИЕ ИОНОВ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ
ГИДРОГЕЛЕМ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ И
ПОЛИАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ

Минко К.Д., Лакиза Н.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

Среди различных твердых адсорбентов гидрогели на основе природных и синтетических полимеров в последние годы привлекают большое внимание. Гидрогели, изготовленные из большинства синтетических полимеров, обладают хорошей механической прочностью, но эти полимеры дороги и не поддаются биоразрушению. Природные же полимеры нетоксичны, биоразлагаемы, возобновляемы и легко доступны в природе. Одними из таких полимеров являются полисахариды, которые способны поглощать значительное количество воды, не растворяясь и не нарушая структурной целостности. Широкое применения для создания сетчатых гидрогелей находит альгинат натрия – анионный биоразлагаемый природный полимер, который можно извлечь из бурых морских водорослей. Он состоит из блоков 1-4 связанных α -L-гуруроновой и β -D-маннуроновой кислот, которые включают в себя карбоксильные и гидроксильные функциональные группы, что позволяет использовать данный полимер в качестве перспективного сорбционного материала для очистки водных объектов окружающей среды от ионов тяжелых металлов.

Объектом исследования в данной работе является гидрогелевый сорбент со структурой двойной сетки на основе координационно спитого кальцием альгината и химически спитой N,N-метиленбисакриламидом поликарболовой кислоты, полученный методом радикальной полимеризации.

Изучение сорбционной способности гидрогеля проводилось по отношению к ионам Ni^{2+} , Cu^{2+} , Cd^{2+} , Zn^{2+} , Co^{2+} и Pb^{2+} из водного раствора при их совместном присутствии. Степень извлечения ионов тяжелых металлов увеличивается с уменьшением кислотности сорбционного раствора (рис. 1), что связано с ионизацией карбоксильных групп и усилением взаимодействия с ионами тяжелых металлов. Максимум степени извлечения достигается при 3,5 единицах pH. Так, степень извлечения ионов Cu^{2+} составила 99 %, ионов Pb^{2+} – 86 %, ионов Co^{2+} , Ni^{2+} , Zn^{2+} и Cd^{2+} – от 60 до 80 %.

Кинетические характеристики полученного сорбента были изучены по отношению к перечисленным ионам тяжелых металлов методом ограниченного объема. Для достижения равновесия в системе «гель – раствор солей металлов» требуется ~21 час. По истечении этого времени

степени извлечения ионов Pb^{2+} , Cd^{2+} , Cu^{2+} и Zn^{2+} составили около 90 %. Степень извлечения ионов Ni^{2+} составила 70 %, ионов Co^{2+} – 50 %.

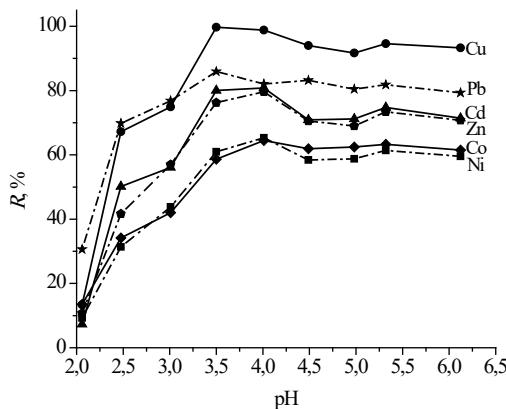


Рис. 1. Зависимость степени извлечения ионов тяжелых металлов от кислотности раствора, $C_{0\text{ Me(II)}} = 0,1 \text{ ммоль/дм}^3$, $m \sim 0,3 \text{ г}$, $V = 50,0 \text{ см}^3$

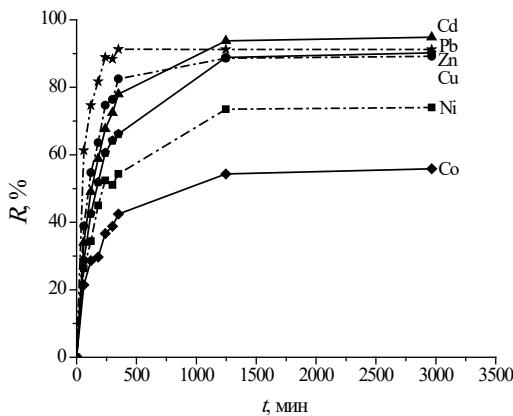


Рис. 2. Зависимость степени извлечения ионов тяжелых металлов из водного раствора при совместном присутствии от времени контакта фаз. $C_{0\text{ Me(II)}} = 0,1 \text{ ммоль/дм}^3$, $pH = 4,0$, $m \sim 0,3 \text{ г}$, $V = 50,0 \text{ см}^3$, скорость перемешивания 160 об/мин

Обработка интегральных кинетических кривых по уравнениям диффузионной и химической кинетики показала, что полученные зависимости наилучшим образом описываются моделью химической реакции псевдовторого порядка.

УДК 544.723.21:544.777

СОРБИОННОЕ ИЗВЛЕЧЕНИЕ ИОНОВ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ
ГИДРОГЕЛЕМ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ И
ПОЛИАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ

Минко К.Д., Лакиза Н.В.

Уральский федеральный университет имени первого Президента России
Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия

Среди различных твердых адсорбентов гидрогели на основе природных и синтетических полимеров в последние годы привлекают большое внимание. Гидрогели, изготовленные из большинства синтетических полимеров, обладают хорошей механической прочностью, но эти полимеры дороги и не поддаются биоразрушению. Природные же полимеры являются биоразлагаемыми, нетоксичными, возобновляемыми и легко доступными в природе. Примером таких полимеров являются полисахариды, которые не растворяются и не изменяют структурную целостность при поглощении значительного количества воды. Широкое применения для создания сетчатых гидрогелей находит альгинат натрия – анионный биоразлагаемый природный полимер, который можно извлечь из бурых морских водорослей. α -L-Гулуроновая и β -D-маннуроновая кислоты, входящие в состав альгината, содержат карбоксильные и гидроксильные функциональные группы. Это позволяет использовать данный полимерный материал для сорбционной очистки водных объектов окружающей среды от ионов тяжелых металлов.

Объектом исследования в данной работе является гидрогелевый сорбент со структурой двойной сетки на основе координационно спитого кальцием альгината и химически спитой N,N-метиленбисакриламидом полиакриловой кислоты, полученный методом радикальной полимеризации.

Изучение сорбционной способности синтезированного геля проводилось по отношению к ионам никеля, меди (II), кадмия, цинка, кобальта (II) и свинца (II) из водного раствора при их совместном присутствии. Уменьшение фактора извлечения указанных выше ионов металлов при увеличении кислотности раствора (рис. 1) связано с протонированием карбоксильных групп и ослаблением взаимодействия с ионами тяжелых металлов. Максимум степени извлечения достигается при 3,5 единицах pH. Так, фактор извлечения ионов меди (II) составляет 99 %, ионов свинца – 86 %, остальных ионов – от 60 до 80 %.

Кинетические характеристики полученного сорбента были изучены по отношению к перечисленным ионам тяжелых металлов методом ограниченного объема. Равновесие в исследуемой сорбционной системе устанавливается в течение 21 ч. После достижения указанного времени факторы извлечения ионов свинца (II), кадмия, меди (II) и цинка

составляют около 90 %, ионов никеля и кобальта (II) – 70 и 50 % соответственно.

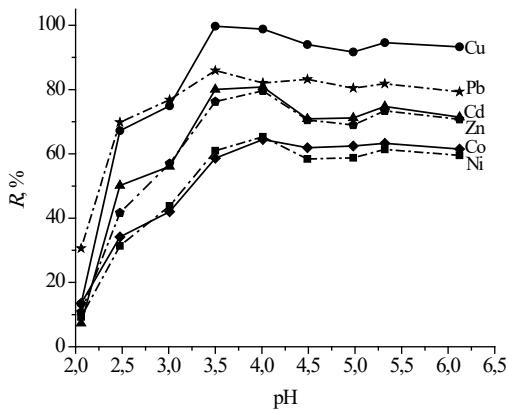


Рис. 1. Зависимость степени извлечения ионов тяжелых металлов от кислотности раствора, $C_0 M_{\text{e(II)}} = 0,1 \text{ ммоль/дм}^3$, $m \sim 0,3 \text{ г}$, $V = 50,0 \text{ см}^3$

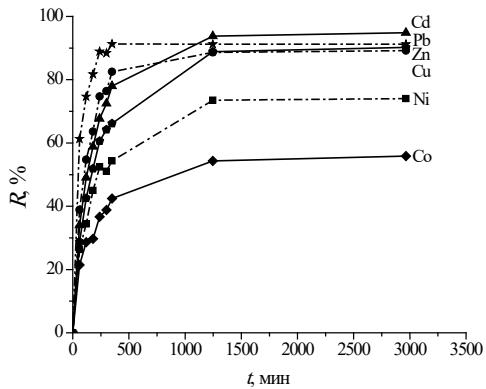


Рис. 2. Зависимость степени извлечения ионов тяжелых металлов из водного раствора при совместном присутствии от времени контакта фаз. $C_0 M_{\text{e(II)}} = 0,1 \text{ ммоль/дм}^3$, $\text{pH} = 4,0$, $m \sim 0,3 \text{ г}$, $V = 50,0 \text{ см}^3$, скорость перемешивания 160 об/мин

Обработка интегральных кинетических кривых по уравнениям диффузионной и химической кинетики показала, что полученные зависимости наилучшим образом описываются моделью химической реакции псевдовторого порядка.

© Минко К.Д., Лакиза Н.В., 2025

УДК 66.095.213:543.429.23

ИНТЕРПРЕТАЦИЯ НЕТРИВИАЛЬНОГО ПРОДУКТА
ПЕРЕГРУППИРОВКИ БЕКМАНА МЕТОДОМ ЯМР-
СПЕКТРОСКОПИИ

Мосалёв П.О.¹, Охиров Ш.М.¹, Латыпова Э.Р.¹, Лобов А.Н.²,
Талипов Р.Ф.¹

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

В классической перегруппировке Бекмана интермедиатом является нитрилиевый катион, который в присутствии воды или других нуклеофильных агентов подвергается гидролизу с образованием амидов или лактамов, а в противном случае продуктом является нитрил. В свою очередь, при определенных условиях возможна конкурирующая реакция, а именно фрагментация Бекмана, ведущая за собой разрыв C-C связи рядом с оксимной группой с дальнейшим образованием нитрила и алкена или карбокатиона, который далее стабилизируется [1].

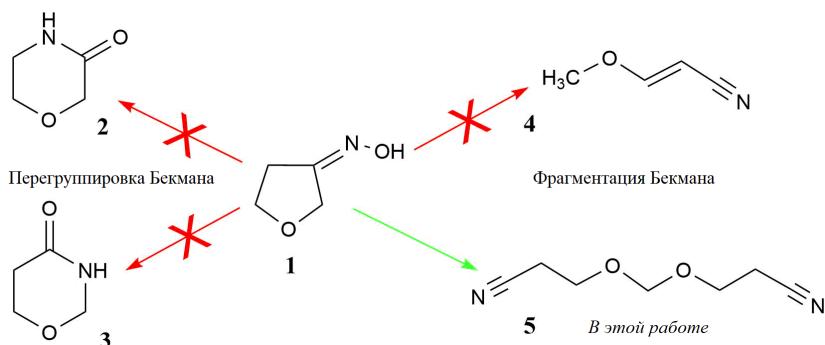


Рис. 1. Возможные продукты реакции Бекмана

Вовлечение оксима дигидрофуран-3-она **1** в Бекмановскую перегруппировку предполагало получение 3-окси-морфолинона **2** или его изомера **3** либо же нитрила **4** через фрагментацию. Однако было продемонстрировано получение нетипичного продукта перегруппировки Бекмана – динитрила **5** с образованием метилендиокси-группы.

Строение синтезированного продукта установлено и подтверждено с использованием методов ЯМР ^1H и ^{13}C .

Литература

1. *Chem. Sci.*, 2019, 10, 7812.

© Мосалёв П.О., Охиров Ш.М.,
Латыпова Э.Р., Лобов А.Н., Талипов Р.Ф., 2025

УДК 541.64+541.68+54-148

СИНТЕЗ И РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ИОННЫХ
ГИДРОГЕЛЕЙ ХИТОЗАНА С 5-НОРБОРНЕН-2,3-ДИКАРБОНОВОЙ
КИСЛОТОЙ

Муфтахов В.В.¹, Мулюкова С.М.², Королев И.Н.², Мингалеев В.З.²

¹ Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

² Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия.

В работе впервые продемонстрирован простой метод получения ионных гидрогелей хитозана с использованием 5-норборнен-2,3-дикарбоновой кислоты (Рис. 1). С помощью ИК-Фурье спектроскопии доказано формирование ионных сшивок между хитозаном и дикарбоновой кислотой. Для полученных ионных гидрогелей выполнены методы реологических исследований в зависимости от количества сшивателя.

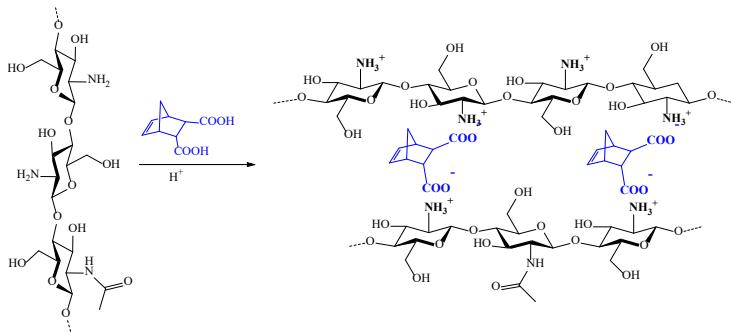


Рис. 1. Схема формирования ионных сшивок в гидрогелях, полученных взаимодействием хитозана с 5-норборнен-2,3-дикарбоновой кислотой.

Частотные зависимости модулей накопления (G') и потерь (G'') показали, что $G' > G''$ для всех образцов, что подтверждает гелеобразное состояние. Модули упругости росли с увеличением концентрации кислоты. Снижение концентрации кислоты приводит к снижению модуля сдвига, что коррелирует со снижением уровня модуля накопления (Рис. 2).

На основе реологических данных с использованием обобщенной вязкоупругой модели Максвелла рассчитаны параметры структуры сети. (Табл. 1). Полученные гидрогели имеют не слишком высокие значения модуля сдвига (G), который можно регулировать с помощью концентрации кросс-линкера в пределах от 134 до 966 Па. Следовательно, эти гидрогели не являются излишне жесткими, что положительно сказывается на их применении в качестве средств доставки лекарств, что в изученном диапазоне концентраций кросс-линкера

концентрация ионных сшивок (v) меняется от 0.054 до 0.389 моль/м³, а средний размер ячеек (ξ) от 20.1 до 38.8 нм. При этом, молекулярная масса цепей хитозана между сшивками варьируется в пределах от 43 000 до 308 000 г/моль. Из этих данных видно, что при снижении концентрации кислоты с 10 до 2 масс. % средний размер ячеек гидрогелей увеличивается практически в два раза.

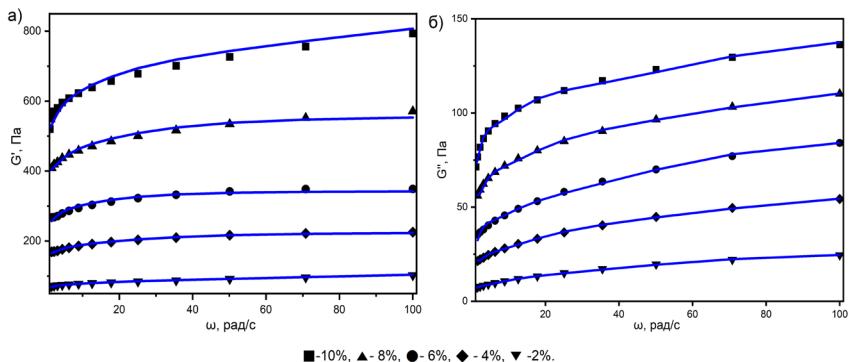


Рис. 2. Зависимость модуля накопления (а) и модуля потерь (б) от угловой частоты. По всем осям используется линейный масштаб. Точки – экспериментальные значения, линии – расчет с использованием обобщенной вязкоупругой модели Максвелла.

Таблица 1
Модуль сдвига и параметры молекулярного строения полимерных сетей гидрогелей

| Шифр гидрогеля | Кросс-линкер, % | G , Па | v , моль/м ³ | ξ , нм | $M_c \times 10^{-3}$ г/моль |
|----------------|-----------------|----------|---------------------------|------------|-----------------------------|
| 10-ChN | 10 | 966±5 | 0.389±0.002 | 20.1±0.1 | 43±1 |
| 8-ChN | 8 | 757±2 | 0.307±0.003 | 21.8±0.2 | 55±2 |
| 6-ChN | 6 | 500.0±7 | 0.201±0.004 | 25.1±0.3 | 83±2 |
| 4-ChN | 4 | 388±2 | 0.158±0.005 | 27.2±0.4 | 105±5 |
| 2-ChN | 2 | 134±1 | 0.054±0.004 | 38.8±0.4 | 308±7 |

Полученные гидрогели с регулируемой мягкостью и размером ячеек (20-39 нм) являются перспективными для применения в биомедицине, в частности, в качестве систем контролируемой доставки лекарственных средств.

© Муфтахов В.В., Мулюкова С.М., Королев И.Н., Мингалеев В.З., 2025

УДК 543.552.054.1

ИДЕНТИФИКАЦИЯ МИНЕРАЛЬНЫХ ВОД МУЛЬТИСЕНСОРНОЙ СИСТЕМОЙ ТИПА «ЭЛЕКТРОННЫЙ ЯЗЫК»

Мухаметдинов Ч.Р.^{1,2}, Зильберг Р.А.¹, Ишмакаева Г.И.¹

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Ионпро, Уфа, Россия

Проблема контроля качества минеральных вод связана со сложным и дорогостоящим процессом анализа. Для проведения анализа классическими методами требуются высококвалифицированные кадры, а также многостадийная пробоподготовка. Мультисенсорная вольтамперометрическая система типа «электронный язык» предлагает интегральную оценку минеральных вод, без необходимости в сложной пробоподготовки и высококвалифицированных специалистах. Разработанная система предлагает экспрессный, доступный, простой анализ с возможностью идентификации минеральных вод по производителю.

Для анализа были отобраны минеральные воды различного минерального состава и степени минерализации, представленные в розничной торговле. Мультисенсорная система включает в себя три стеклоуглеродных электрода (СУЭ), модифицированных наночастицами rGO, SWCNT и AuNPs для придания системе перекрестной чувствительности. Хемометрическая обработка данных [1-4] была использована для извлечения полезной информации из зарегистрированных мультисенсорной системой массива циклических вольтамперограмм. Метод главных компонент показал четкое разделение анализируемых образцов на отдельные непересекающиеся кластеры со строгой закономерностью расположения на графике счетов (рис. 1).

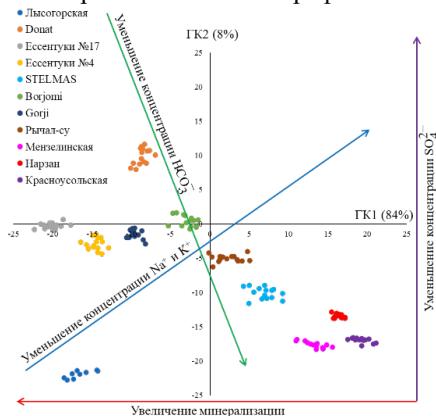


Рис. 1. МГК-моделирование циклических вольтамперограмм 11 образцов минеральных вод на мультисенсорной системе

Таблица 1

Результаты SIMCA-классификации 11 образцов минеральных вод на мультисенсорной системе.

| RS | .Лысогорская | Donat | Ессентуки №17 | Ессентуки №4 | Стэлмас | Боржоми | Gorji | Рычал-су | Мензелинская | Нарзан | Красноусольская |
|-----------------|--------------|-------|---------------|--------------|---------|---------|-------|----------|--------------|--------|-----------------|
| TS | | | | | | | | | | | |
| Лысогорская | 100 | | | | 13.3 | | | 13.3 | | | |
| Donat | | 86.7 | | | | | | | | | |
| Ессентуки №17 | | | 100 | 13.3 | | | | | | | |
| Ессентуки №4 | | | | 100 | | | | | | | |
| Стэлмас | 13.3 | | | | 100 | | 13.3 | | | | |
| Боржоми | | | | | | 100 | | | | | |
| Gorji | | | | | | | 100 | 13.3 | | | |
| Рычал-су | | | | | | | 13.3 | 100 | | | |
| Мензелинская | | | | | | | | | 86.7 | | 13.3 |
| Нарзан | | | | | | | | | | 100 | |
| Красноусольская | | | | | | | | | | | 13.3 |
| | | | | | | | | | | | 86.7 |

С помощью SIMCA-классификации была получена количественная оценка эффективности разработанной системы. Так, ошибки I и II рода не превышают 13.3%. Система успешно идентифицирует образцы минеральных вод по их природе и производителю, что открывает возможность для контроля качества минеральных вод.

Работа выполнена при финансовой поддержке ФСИ договор № 3780ГCCCC15-L/99367 от 29.10.2024

Литература

- Яркаева Ю.А., Дубровский Д.И., Зильберг Р.А., Майстренко В.Н. Вольтамперометрические сенсоры и сенсорная система на основе модифицированных полиариленфталидами золотых электродов для распознавания цистеина // Электрохимия. – 2020. – Т. 56, № 7. – С. 591–603.
- Zilberg R., Bulysheva E., Teres Y., Volkova A., Ishmakaeva G., Mukhametdinov G., Vakulin I. Voltammetric electronic tongue for identification of naproxen pharmaceuticals by manufacturer // Chimica Techno Acta. – 2025. – Vol. 12, № 2. – Art. 12204.
- Zilberg R.A., Teres J.B., Bulysheva E.O. [et al.] Chiral octahedral cobalt (III) complex immobilized on Carboblack C as a novel robust and readily

available enantioselective voltammetric sensor for the recognition of tryptophan enantiomers in real // *Electrochimica Acta.* – 2024. – Vol. 492. – P. 144334.

4. Сидельников А.В., Зильберг Р.А., Кудашева Ф.Х., Майстренко В.Н., Юнусов Г.Ф., Сапельникова С.В. Вольтамперометрическая идентификация многокомпонентных растворов с использованием метода главных компонент // *Журнал аналитической химии.* – 2008. – Т. 63, № 10. – С. 1072–1078.

© Мухаметдинов Ч.Р., Ишмакаева Г.И., Зильберг Р.А., 2025

УДК 544.165

ДИЗАЙН И МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НОВЫХ ИНГИБИТО-РОВ КОРОНАВИРУСА SARS-COV-2

Никитина К.Ю.¹, Лифанова Е.Г.², Лифанов А.Д.¹

¹*Казанский национальный исследовательский технологический
университет, Казань, Россия*

²*Казанский (Приволжский) Федеральный университет, Казань, Россия*

В конце 2019 года произошла вспышка тяжелого острого респираторного синдрома (Severe Acute Respiratory Syndrome, SARS), что привело к глобальной эпидемии (пандемии) [1]. Острый респираторный синдром и другие проявления болезни были вызваны коронавирусом SARS-CoV-2 [2]. В настоящее время, несмотря на улучшение эпидемиологической ситуации выявляются новые варианты (штаммы) SARS-CoV-2 [3]. В связи с этим, поиск селективных ингибиторов коронавируса SARS-CoV-2 является актуальной задачей.

На первом этапе нами осуществлен сбор данных из базы данных ChEMBL [4]. Мы собрали данные об аффинности связывания органических соединений, для которых известна ингибирующая активность по отношению к SARS-CoV-2 [5-7]. Информация была извлечена из базы данных ChEMBL [4] в виде строк SMILES (The Simplified Molecular-Input Line-Entry System) [8] с соответствующими значениями констант ингибирования K_i [μM]. Набор данных включал информацию о 4116 значениях K_i для органических соединений различных классов.

Для решения задач бинарной классификации (разделения классов) были выделены активный и неактивный класс органических соединений.

Для поиска оптимального решения для обучения классификационных моделей были выбраны следующие методы: логистическая регрессия [5], метод ближайших соседей (kNN) [6, 7], метод опорных векторов (SVM) [8] и искусственные нейронные сети (ANN) [9].

Наилучшие характеристики получены с использованием модели на основе метода ближайших соседей. Статистические характеристики kNN-модели имеют следующие значения: ACC=0.96, SPC=0.99, SEN=0.06, BA=0.73, MCC=0.24.

С целью поиска новых ингибиторов в дальнейшем будет проведен их структурный анализ с целью выявления «сильных» и «слабых» функциональных групп. Далее возможно применение виртуального скрининга и прогнозирования афинности или способности малой молекулы связываться с белковой мишенью, чтобы оценить потенциальную ингибирующую активность новых молекул. RMSD всех атомов основной цепи белка был рассчитан относительно их позиций в нативной рентгеноструктуре с помощью инструмента rms с пакета GROMACS.

Литература

1. Shaokun Shu, Charles Y. Lin, Housheng Hansen He, Robert M. Witwicki, Doris P. Tabassum, Justin M. Roberts, Michalina Janiszewska, Sung Jin Huh, Yi Liang, Jeremy Ryan, Ernest Doherty, Hisham Mohammed, Hao Guo, Daniel G. Stover, Muhammad B. Ekram, Guillermo, J. E. B. & K. P. Response and Resistance to BET Bromodomain Inhibitors in Triple Negative Breast Cancer. *Nature* 2016, 529 (1), 413–417.
2. O’Boyle, N.M. Comparing structural fingerprints using a literature-based similarity benchmark / N.M. O’Boyle & R.A. Sayle. – DOI: 10.1186/s13321-016-0148-0. – Text: electronic // *Journal of Cheminformatics*. 2016. V. 8(1). P. 1–14.
3. Polischuk P.G., Muratov E.N., Artemenko A.G., Kolumbin O.G., Muratov N.N., Kuz'min V.E. Application of Random Forest method to QSAR prediction of aquatic toxicity. *J. Chem. Inf. Mod.* 2009.V. 49. P. 2481-2488.
4. ChEMBL.<https://www.ebi.ac.uk/chembl/>.
5. Sousa I.J., Ferreira M.-J. U., Molnár J., Fernandes M.X. QSAR studies of macrocyclic diterpenes with P-glycoprotein inhibitory activity. *European Journal of Pharmaceutical Sciences*. 2013. 48(3). P. 542–553.
6. Varnek A., Baskin I. (2012). Machine Learning Methods for Property Prediction in Chemoinformatics: Quo Vadis? *Journal of Chemical Information and Modeling*, 52(6), 1413–1437.
7. Heppekausen J.; Klapötke T.M.; Sproll S.M. Synthesis of Functionalized Tetrazenes as Energetic Compounds. *J. Org. Chem.* 2009, 74 (6), 2460–2466.
8. Johannes Zuber, Junwei Shi, Eric Wang, Amy R. Rappaport, Harald Herrmann, Edward A. Sison, Daniel Magooon, Jun Qi, Katharina Blatt, Mark Wunderlich, Meredith J. Taylor, Christopher Johns, Agustin Chicas, James C. Mulloy, Scott C. Kogan, Patrick Brown, Pete, S. W. L. & C. R. V. RNAi Screen Identifies Brd4 as a Therapeutic Target in Acute Myeloid Leukaemia. *Nature* 2011, 478 (1), 524–282.

; 0 Crgzcpf gt "L^RO^E Etcxcw" D(H) Vj g" Rwc\kxg" Gpf qecppcdkpqkf "Vtcpur qtv
Dmqengt "N[43: 5462" K" c" Rqvgpv" k^j kdkqt "qh" HCCJ "cpf "Ugxgtcn" Qj gt "Dtckp
Ugt/kpg" J { ftqrugu0L0Co 0Ej go 0Uqe04228."34: "*52+", 8; ; 6; 9260
I " " " 0 0"4247"

"7660945043<7660999"

до 40 часов. Для материалов, высушенных на воздухе, время установления сорбционного равновесия заметно больше и составляет от 40 до 60 часов, что объясняется формированием в процессе синтеза монолитной структуры ксерогеля и блокированию активных центров сорбента.

Необходимо также отметить, что способ высушивания влияет и на количественные параметры сорбируемости ионов свинца: наибольшие значения сорбируемости соответствуют однократно лиофилизованным материалам, а наименьшие – воздушно-высушеным. Это также подтверждает предположение о том, что в процессе высушивания на воздухе происходит образование агломератов альгинатных карбоксильных групп и, как следствие, уменьшается количество доступных активных центров.

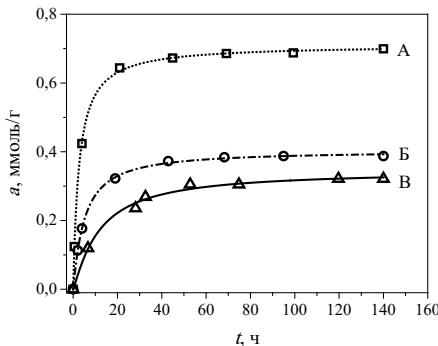


Рис. 1. Кинетические кривые для сорбентов: А – однократно лиофилизованный сорбент; Б – двукратно лиофилизованный сорбент; В – высушенный на воздухе сорбент

В результате обработки полученных данных по кинетическим моделям псевдо-первого и псевдо-второго порядка, а также модели внутренней диффузии, наиболее высокие коэффициенты детерминации ($R^2 > 0,99$) были получены для модели псевдо-второго порядка. Таким образом, можно сделать вывод о том, что лимитирующей стадией во всех случаях является химическая реакция, а преобладающим механизмом – хемосорбция.

Для модели внутренней диффузии также характерны достаточно высокие коэффициенты детерминации ($R^2 > 0,90$). Наибольшими значениями констант диффузии характеризуется сорбция ионов Pb^{2+} материалами, синтезированными с применением однократного лиофильного высушивания, в то время как наименьшие значения констант наблюдаются для образцов, высушенных на воздухе. Данные наблюдения показывают, что уплотнение структуры сорбента, вызванное изменением условий дегидратации, приводит к уменьшению скорости диффузии ионов свинца к карбоксильным группам альгината кальция,

что оказывается на общей скорости сорбции, увеличивая время выхода системы на равновесие.

Литература

1. Терзиян Т.В., Никитина М.М., Лакиза Н.В., Сафонов А.П. // Журнал прикладной химии.– 2024. – Т. 97. – №2. – С. 138–147.

© Никитина М.М., Лакиза Н.В., Аптер Е.Д., Гонулленко А.О., 2025
УДК 544.543

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХИРАЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ ЦЕОЛИТОПОДОБНОГО МАТЕРИАЛА $(\text{NH}_4)_4[\text{H}_2\text{B}_2\text{P}_4\text{O}_{16}]$ Нуретдинова А.Ш., Мансурова Э.Р., Утеева Ж.Д. Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Разработка микропористых материалов с хиральными свойствами, способных селективно адсорбировать оптические изомеры, важна для разделения энантиомеров, что имеет ключевое значение в фармацевтике, производстве ароматизаторов и органическом синтезе. В данной работе была изучена адсорбционная способность борофосфата аммония $(\text{NH}_4)_4[\text{H}_2\text{B}_2\text{P}_4\text{O}_{16}]$ [1] по отношению к энантиомерам α -пинена.

При температуре 120°C для энантиомеров α -пинена был зафиксирован коэффициент энантиоселективности по значениям адсорбции равный 1.06, по значениям удерживаемых объемов – 1.04. Как видно из рис. 1, изотермы адсорбции энантиомеров различаются, предпочтительно адсорбировался $(-)\alpha$ -пинен. Изотермы адсорбции относятся к I типу по классификации БЭТ.

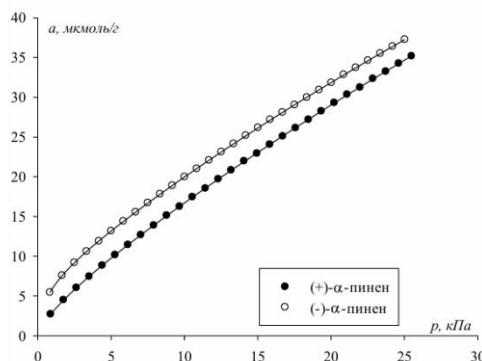


Рис. 1. Изотерма адсорбции энантиомеров α -пинена при 120°C

Таким образом, нами была создана хиральная неподвижная фаза на основе цеолитоподобного вещества, способная к хиральному распознаванию.

Литература

1. Xing, H.L., Y.; Su, T.; Xu, J.; Yang, W.; Zhu, E.; Yu, J.; Xu, R., Spontaneous crystallization of a new chiral open-framework borophosphate in the ionothermal system. *Dalton Trans.*, 2010. 39: p. 3.

© Нуретдинова А.Ш., Мансурова Э.Р., Утеева Ж.Д., 2025

УДК 620.197.3

ИНГИБИТОРЫ КИСЛОТНОЙ КОРРОЗИИ НА ОСНОВЕ ГЕТЕРОСОЕДИНЕНИЙ

Нухова В.Х., Смольникова О.Г.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Цель работы - поиск новых специфических добавок, позволяющих сохранять материал основы конструкционных элементов, подвергающихся химической или электрохимической обработке. Ингибиторная защита применяется не только при эксплуатации оборудования в условиях воздействия агрессивных сред, но и в случае удаления отработавших свой ресурс защитных покрытий, для снятия с поверхности металла загрязнений, ржавчины и окалины, а также с целью выравнивания поверхности металлов и сплавов при химическом или электрохимическом полировании. В кислых средах чаще используются органические поверхностно-активные вещества (ПАВ), которые, адсорбируясь на поверхности металла, образуют полимолекулярные слои. Прочные защитные пленки образуются в том случае, если между ингибитором и поверхностью металла реализуется химическая связь, например, за счет образования полимерных комплексов с катионами d-металлов [1]. В таблице 1 на основе литературных данных приведены характеристики некоторых органических ингибиторов: степень защиты (Z) и эффективная концентрация ингибитора (C_{in}).

Азолы (аминотриазолы). Представители этого класса соединений (табл. 1) применяются для защиты меди и ее сплавов в хлоридсодержащих средах. Высокая подвижность атомов водорода, непосредственно связанных с атомом азота в азольном цикле, способствует адсорбции ингибитора поверхностью металла с образованием защитных пленок. В кислой среде ингибирующая активность зависит от наличия OH-группы и длины углеводородного радикала [2]. Производные тиазола и тиадиазола относят к ингибиторам смешанного типа, защитные действия возрастают с увеличением концентрации вводимых добавок: в малых концентрациях они адсорбируются физически, а при высоких концентрациях имеет место хемосорбция соединений [3]. Характер адсорбции определяется положением атома серы в тиенильном заместителе. Соединения этого класса эффективные ингибиторы коррозии углеродистой стали, но некоторые представители при малых концентрациях могут, напротив,

стимулировать процесс. Для достижения лучшего ингибирующего эффекта используют в композициях с KSCN, KI, KBr. Поликарбоксильные аминокислоты и их производные. Динатриевая соль этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТА) - используется как добавка при электролитно-плазменном травлении дефектных покрытий, так как способствует уменьшению глубины растр авливания сплавов [4]. Авторы отмечают увеличение скорости удаления покрытий при достижении равномерности обработки никелевых сплавов. Ускорение процесса объясняют образованием устойчивых комплексных соединений ЭДТА с элементами покрытия (Ni, Al, Cr). Механизм ингибирующего действия на никелевых сплавах в кислой среде не изучался. Производные пиразолона применялись авторами работы [5] в качестве ингибиторов травления титана с целью выравнивания его поверхности. Способ обеспечивает высококачественную подготовку поверхности, устойчивую к воздействию климатических факторов и биологически активных сред.

Таблица 1

Ингибирующая активность некоторых гетеросоединений

| Соединение | Защитная способность | Источник |
|--|--|----------|
| 17-(5-Амино-1Н-1,2,4-триазол-3-ил)гепта-декан-7-ол | В 1 % р-ре HCl Z = 97,2% при C _{in} = 10,0 ммол/л | 2 |
| 2-амино-5-меркапто-1,3,4-тиадиазола | В 0,5 M HCl Z = 99% при C _{in} = 10 ⁻² M | 3 |
| Этилендиаминтетраацетат динатрия дигидрат | В 2,5% р-ре NH ₄ F; KF; KOH Z ~30–50 % при C _{in} = 0,15–0,2% | 4 |
| Метамизол натрия | В смеси HNO ₃ H ₂ SO ₄ HF (150-650 г/л) Z ~30-80% при C _{in} = 3-8 г/л | 5 |

Литература

1. Авдеев, Я. Г. Органические ингибиторы коррозии металлов в растворах кислот. I. Особенности механизма защитного действия / Я. Г. Авдеев, Ю. И. Кузнецов // Журнал физической химии. – 2023. – Т. 97, № 3. – С. 305-321.
2. Ляпун, Д. В. Сравнение ингибирующей активности 3-алкили 3-гидроксиалкил-5-амино-1Н-1,2,4-триазолов в отношении коррозии меди в хлоридсодержащих средах / Д. В. Ляпун, А. А. Кружилин, Д. С. Шевцов [и др.] // Конденсированные среды и межфазные границы. – 2023. – № 2. – С. 198-206.
3. Шеин, А. Б. Защитные свойства ряда производных тиадиазола в растворах серной кислоты / А. Б. Шеин, М. Д. Плотникова, А. Е. Рубцов // Известия высших учебных заведений. Серия: Химия и химическая технология. – 2019. – Т. 62, № 7. – С. 123-129.

4. Попова, С. В. Удаление жаростойких конденсационно-диффузионных покрытий с поверхности лопаток ГТД до и после наработки / С. В. Попова, Д. А. Добрынин, С. А. Мубояджян, С. А. Будиновский // Труды ВИАМ. – 2017. – № 1(49). – С. 4.

5. Способ химической обработки изделий из титана и его сплавов: пат. 2196848 РФ; заявл. 30.04.1999; опубл. 20.01.2003.

© Нухова В.Х., Смольникова О.Г., 2025

УДК 66.096.4, 577.181.6

СОСТАВ, КОНСТАНТЫ УСТОЙЧИВОСТИ И
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ПРОЦЕССА
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ α -, β - И γ -ЦИКЛОДЕКСТРИНОВ С
АЦЕТАМИНОФЕНОМ

Огнева А.С., Чернобровкина В.И.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Ацетаминофен в качестве объекта исследования настоящей работы выбран благодаря важному фактору: широкое применение в медицинской практике наряду с его токсичным действием из-за риска передозировки. Исследования, проводимые ранее на кафедре физической химии и химической экологии по изучению комплексообразования циклодекстринов с празиквантелем [1] и другими объектами, позволили рекомендовать спектрофотометрический метод изучения выбранных объектов. На основании изложенного, взаимодействие α -, β -, γ -циклодекстринов с ацетаминофеном изучали на спектрофотометре UV-2401 PC при низких концентрациях исходных реагентов (10^{-5} – 10^{-4} моль/л) в диапазоне температур от 294 до 321 К в кварцевых кюветах (толщина 1 см). Измерения проводили при длинах волн, равных 190-360 нм.

При добавлении циклодекстринов к водным растворам ацетаминофена наблюдались небольшие сдвиги максимумов поглощения и изменения интенсивностей пиков полос поглощения, что указывает на образование комплексных соединений. Состав и константы устойчивости комплексных соединений находили по методу молярных отношений, как и в [2]. Было установлено, что в разбавленных водных растворах образуются комплексы состава 1 : 1, при этом рост температуры не влиял на состав и он оставался неизменным. Константы устойчивости комплексов (K), образованных ацетаминофеном и α -, β -, γ -циклодекстринами при комнатной температуре оказались равны, соответственно: $2.6 \cdot 10^4$, $1.8 \cdot 10^4$ и $1.6 \cdot 10^4$ л/моль. На основании исследований температурных зависимостей K (294 \div 321 К) рассчитаны термодинамические параметры комплексообразования. Установлено, что комплексообразование ацетаминофена с α -, β -, и γ -циклодекстринами протекает самопроизвольно с образованием упорядоченной структуры и выделением тепла.

Литература

1. Ibrakova, N.F., Kutlugildina, G.G., Zimin, Y.S. Complexation of praziquantel with α -, β - and γ -cyclodextrins in aqueous-alcoholic solutions // Periodico che quimica. 2020. Vol. 17. No. 36. Pp. 302-314.
2. 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.

© Огнева А.С., Чернобровкина В.И., 2025

УДК 577.1:547.94

АЛКАЛОИДЫ РАСТЕНИЯ *RINDERA CYCLODONTA*

Олимова Х.Н.¹, Курбанов У.Х.¹, Нигматуллаев А.¹, Тургунов К.К.¹,
Мукаррамов Н.И.²

¹Институт химии растительных веществ им. акад. С.Ю. Юнусова АН
РУз, Ташкент, Узбекистан

²Научно-исследовательский институт карантина и защиты растений,
Ташкентская область, Узбекистан

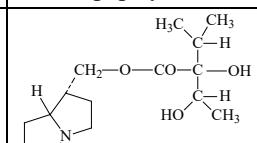
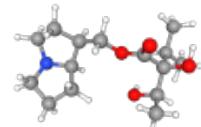
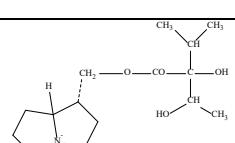
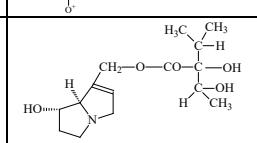
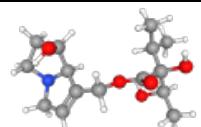
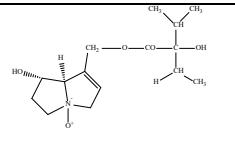
Относясь к семейству *Boraginaceae*, растения рода *Rindera* преимущественно распространены в Европе и Азии. В литературных источниках указано, что эти растения являются богатым источником вторичных метаболитов, таких как пирролизидиновые алкалоиды (ПА), производные кофейной кислоты и флавоноиды. *Rindera cyclodonta* является одним из представителей данного рода, произрастающих на территории Узбекистана, и его химический состав был изучен. При исследовании структуры алкалоидов, выделенных из растения *R. cyclodonta*, было установлено, что они принадлежат к классу пирролизидиновых алкалоидов (ПА) [1].

Растение *R. cyclodonta* также является химически богатым на вторичные метаболиты. Эти соединения определяют специфические химические свойства растения и могут влиять на уровень его биологической активности, включая токсичность – повышая или понижая её. Поэтому изучение выделения алкалоидов из растения, их структурного анализа и биологической активности представляет значительный научный интерес с химической, фармакологической и токсикологической точек зрения [2].

Экстракция растения и выделение суммы алкалоидов. Широко распространённое в флоре Узбекистана растение *R. cyclodonta* было собрано в период цветения в Фаришском районе Джизакской области. Надземная часть растения была высушена и измельчена с помощью мельницы. Измельчённого растительного материала взвешено 1 кг, после чего он подвергался восьмикратной экстракции 80%-ным этиловым спиртом. Из полученного экстракта были выделены хлороформная и

этилацетатная суммы алкалоидов. Выделенные суммы алкалоидов были разделены на индивидуальные соединения методом колоночной хроматографии на силикагеле (0,063–0,100 нм). В качестве элюента использовались смеси хлороформ – метанол в различных соотношениях (от 200:1 до 1:1).

Таблица 1
Алкалоиды, выделенные из хлороформной и этилацетатной суммы алкалоидов

| № | Название вещества | Молекулярная формула | Структурная формула | PCA |
|---|---------------------|---|--|---|
| 1 | Линделофин | C ₁₅ H ₂₇ NO ₄ |  |  |
| 2 | N-Окись линделофина | C ₁₅ H ₂₇ NO ₅ |  | |
| 3 | Эхинатин | C ₁₅ H ₂₅ NO ₅ |  |  |
| 4 | N-Окись эхинатина | C ₁₅ H ₂₅ NO ₆ |  | |

Вышеуказанный алкалоид N-Окись эхинатина был впервые выделен из растения *R. cyclodonta*. Структура выделенных алкалоидов была установлена с помощью эталонных веществ и физико-химических методов исследования.

Литература

1. Mateusz K., Irena B., Mirosława K., Polyurethane Foam Rafts Supported *in vitro* Cultures of *Rindera graeca* Roots for Enhanced Production of Rinderol, Potent Proapoptotic Naphthoquinone Compound. S.: MDPI, 2021. 1-17 р.
2. Олимова Х.Н., Курбанов У.Х., Окманов Р.Я., Ташходжаев Б., Мукаррамов Н.И., Тураева С.М., Пирролизидиновые алкалоиды *Heliotropium lasiocarpum* и инсектицидная активность их экстрактов. Т.: *Chem. of Nat. Comp.*, 2025. 748-754.

© Олимова Х.Н., Курбанов У.Х., Нигматуллаев А., Тургунов К.К., Мукаррамов Н.И., 2025

УДК 544.34

ИЗУЧЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИКИ РЕАКЦИИ ПОЛУЧЕНИЯ ЦИКЛИЧЕСКИХ АЦТАЛЕЙ

Пономарева А.С., Карасева И.Н., Попова Ю.В., Востриков С.В.

Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

Развитие методов переработки возобновляемого сырья, в частности биодизельного глицерина, является важной задачей современной «зеленой» химии. Одним из перспективных направлений является синтез ацталей глицерина – ценных промежуточных продуктов для фармацевтики и парфюмерии [1-3].

В данной работе представлены результаты комплексного исследования реакции ацетализации глицерина с рядом кетонов. Синтез проводили в широком диапазоне температур (от 333,15 К до 413,15 К) и при различных мольных соотношениях глицерин-кетон (1:1, 1:2, 1:3, 1:5). В качестве катализаторов использовали гомогенные (HCl, *n*-толуолсульфокислота) и гетерогенные (сульфокатионит «Amberlist 36 Dry») кислоты. Ход реакции контролировали методом газовой хроматографии.

На основании экспериментальных данных определены константы равновесия и рассчитаны термодинамические характеристики процессов. Установлены количественные зависимости равновесного состава реакционной смеси, степени конверсии и селективности от температуры, соотношения реагентов и времени контакта.

Показана высокая эффективность и перспективность применения современных сульфокатионитов в качестве гетерогенных катализаторов для данного процесса. Полученные данные позволяют оптимизировать синтез ацталей глицерина – ценных структурных блоков для создания новых биологически активных соединений.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (тема № FSSE-2025-0006) в рамках государственного задания Самарского государственного технического университета (создание новых молодежных лабораторий).

Литература

1. Sandid A., Spallina V., Esteban J. Glycerol to value added chemical: state of the art and advances in reaction engineering and kinetic modelling // Fuel Process. Technol. 2024. – V. 253. – P. 108088.
2. Armylisas A.H.N., Yeong S.K., Maznee T.I.T.N., Hoong S.S. Effect of bio-based aldehyde structure on the conversion and selectivity towards glycerol acetal over Amberlist-46 by using a solvent-free approach // ChemistrySelect. 2021. –V. 6. – P. 256-263.

3. Максимов А.Л., Нехаев А.И., Рамазанов Д.Н. Простые эфиры и ацетали – перспективные продукты нефтехимии из возобновляемого сырья // Нефтехимия. 2015. – Т.55. – № 1. – С. 3-24.

© Пономарева А.С., Карасева И.Н., Попова Ю.В., Востриков С.В., 2025

УДК 543.552.054.669.669.213

ЗЕЛЁНЫЙ СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДА КОБАЛЬТА
(II, III)

Ражабова Ш.Р, Кутлимуратова Н.Х.

Национальный университет Узбекистана, Ташкент, Узбекистан

В настоящее время одним из актуальных направлений в электрохимических методах анализа является применение наночастиц для увеличения поверхности электродов, повышения их селективности и снижения предела обнаружения. При их синтезе используются гидротермальный, термический, золь-гель и зелёный методы. Метод биосинтеза на основе растительных экстрактов является быстрым, чистым и экологически безопасным. В последние годы наблюдается повышенный интерес к синтезу наночастиц Co_3O_4 на основе зелёной химии с использованием растительных экстрактов. Оксид кобальта (Co_3O_4) является полупроводником р-типа и благодаря смешанным степеням окисления ($\text{Co}^{2+}/\text{Co}^{3+}$) обладает высокой редокс-активностью [1]. Физические параметры наночастиц, такие как их морфология и размер, оказывают существенное влияние на их редокс-свойства; например, несмотря на высокий редокс-потенциал наночастиц Co_3O_4 , синтезированных термическим методом, в ходе этого процесса наблюдается выделение токсичных химических веществ [2]. Кроме того, установлено, что на основе экстракта растения *Juniperus procera* эффективно синтезируются AgNPs с высоким редокс-потенциалом при температуре 90 ± 5 °C в течение 120 минут [3]. Кроме того, с использованием экстракта листьев *Juniperus communis* L. были успешно синтезированы биогенные золотые наночастицы (AuNPs), проявляющие плазмонный резонанс в диапазоне 530–700 нм [4]. На основании приведённых результатов можно сделать вывод, что синтез наночастиц с использованием растительных экстрактов отличается низкой токсичностью и высоким редокс-потенциалом. Поэтому целью данного исследования является синтез наночастиц оксида кобальта Co_3O_4 с высоким редокс-потенциалом на основе экстракта хвои можжевельника.

Метод синтеза наночастиц: Свежесобранные листья можжевельника тщательно промывали в бидистиллированной воде, измельчали и сушили при 25 °C. Из высушенных листьев отмеряли 15,00 г, помещали их в коническую колбу и заливали 100 мл бидистиллированной воды, после чего смесь кипятили в течение 30 минут. Охлаждённый и профильтрованный экстракт хранили в холодильнике при 4 °C до

последующего использования. К 50 мл 2 мМ раствора хлорида кобальта(II) гексагидрата ($\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$) добавили 10 мл поверхностноактивного вещества (ПВП). Для доведения pH полученной смеси до значения $\text{pH} = 8$ раствор 0,1 М NaOH добавляли по каплям. Затем в раствор постепенно, по каплям, добавляли растительный экстракт; появление тёмно-коричневого окрашивания указывало на успешное образование наночастиц Co_3O_4 . Осадок, отделённый с помощью центрифугирования, трижды промывали дистиллированной водой и вновь центрифугировали (20°C , 8000 об/мин) для обеспечения полного очищения. Очищенный осадок подвергали кальцинации при $400\text{--}450^\circ\text{C}$ в течение 3 часов. Для наночастиц Ar-Co₃O₄NPs, успешно синтезированных методом зелёного синтеза, был получен УФ-видимый спектр поглощения в диапазоне от 200 до 800 нм. Максимум поглощения наблюдался примерно при 390 нм, что явно свидетельствует о формировании наночастиц оксида кобальта (II, III). Анализ наночастиц Co_3O_4 методом СЭМ был проведён, и соответствующие микрофотографии представлены на рисунке ниже.

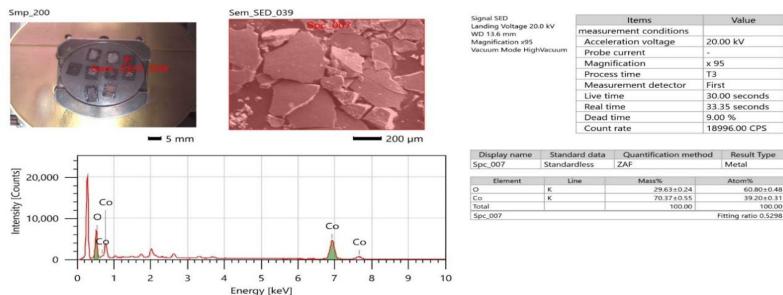


Рис. СЭМ-изображения Co_3O_4 NPs.

Как видно на рисунке, СЭМ-изображения Co_3O_4 NPs, представленные при двух разных увеличениях, демонстрируют равномерно распределённые и хорошо диспергированные наночастицы с минимальной агломерацией, что свидетельствует об их эффективной стабилизации экстрактом можжевельника в процессе синтеза.

Литература

1. Imtiyaz, A., & Singh, A. (2025). Pharmacological and Photocatalytic Study of Green Synthesized Cobalt Oxide (Co_3O_4) Nanoparticles Using Iris kashmiriana Plant Extract. Next Research., 100329.
2. Chauhan, A., Kumar, R., Devi, S., Sonu, N., Raizada, P., Singh, P., Ponnusamy, V. K., Sudhaik, A., Mishra, A. K., & Selvasembian, R. (2024). Recent advances on Co_3O_4 -based nanostructure photocatalysis: Structure, Synthesis, Modification strategies, and Applications. Surfaces and Interfaces, 54, 105152.

3. Khan, M., Karuppiah, P., Alkhathlan, H. Z., Kuniyil, M., Khan, M., Adil, S. F., & Shaik, M. R. (2022). Green Synthesis of Silver Nanoparticles Using Juniperus procera Extract: Their Characterization, and Biological Activity. *Crystals*, 12(3), 420.
4. Mariychuk, R., Fejer, J., Porubska, J., Grishchenko, L. M., & Lisnyak, V. V. (2019). Green synthesis and characterization of gold triangular nanoprisms using extract of Juniperus communis L. *Applied Nanoscience*, 10(8), 2835–2841.

© Ражабова Ш.Р., Кутлимуротова Н.Х., 2025

УДК: 543.42:544.478:546.3–14

ИЗУЧЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ СОЗДАНИЯ ОПТИЧЕСКИ
ЧУВСТВИТЕЛЬНОГО СЛОЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИОНОВ
МЕТАЛЛОВ ПУТЕМ ИММОБИЛИЗАЦИИ РЕАГЕНТА ТИРОНА НА
ФИЛЬТРОВАЛЬНОЙ БУМАГЕ

Сабиров Н.Ш.¹, Аширов М.А.¹, Палванов Н.С.²

¹Хорезмская академия имени Мамуна, Хива, Узбекистан

²Ургенчский филиал Ташкентской медицинской академии,
Ургенч, Узбекистан

Современные исследования в области химических сенсоров демонстрируют растущий интерес к разработке колориметрических методов для определения ионов тяжелых металлов, что обусловлено их высокой чувствительностью, доступностью и экологичностью [1–3]. В контексте этих тенденций настоящее исследование направлено на разработку оптического сенсора на основе тирона, иммобилизованного на фильтровальной бумаге, для последующего количественного определения ионов серебра (I), железа (III), меди (II) и кобальта (II) в водных растворах. Исследованы параметры, влияющие на сорбцию реагента: концентрация тирона ($1 \cdot 10^{-3}$ – $1 \cdot 10^{-2}$ М), pH среды (3–10), время иммобилизации и тип предварительной обработки фильтровальной бумаги (кислотная, щелочная, физико-химическая активация). Оптимальные условия закрепления реагента определялись по максимальной интенсивности окраски и устойчивости сенсорного слоя к вымыванию водой.

Определено, что наилучшие результаты достигаются при pH = 6,5–7,0 и концентрации тирона $5 \cdot 10^{-3}$ М. Полученные оптически активные пленки обладают стабильным жёлто-коричневым окрашиванием и сохраняют чувствительность в течение не менее 30 суток.

Таблица 1

Влияние условий иммобилизации тирона на оптическую плотность чувствительного слоя

| № | Состав образца | Частота λ (нм) | pH | Концентрация моль/л | Время сорбции (ч) |
|---|---------------------------------------|------------------------|---------|---------------------|-------------------|
| 1 | Фильтровальная бумага | - | - | - | - |
| 2 | фильтровальная бумага + Тирон | $\lambda = 500$ нм | 3,5–4,5 | $1 \cdot 10^{-3}$ | 3-4 |
| 3 | фильтровальная бумага + Тирон + Ag(I) | $\lambda = 450$ нм | 6,5–7,0 | $1 \cdot 10^{-5}$ | 24 |

На обработанной тироном бумаге наблюдается максимум поглощения при 500 нм, что доказывает успешную иммобилизацию. При взаимодействии с Ag(I) максимум смещается до 450 нм, подтверждая образование комплекса. Наилучшие результаты достигаются при pH 6,5–7,0 и времени сорбции 24 часа.

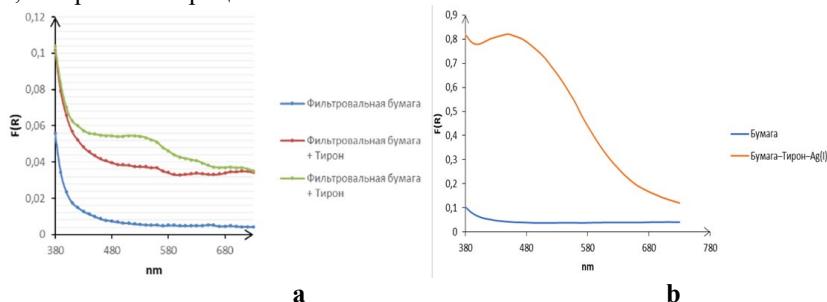


Рис. 1. Зависимость оптической плотности иммобилизованного слоя от концентрации тирона (а), приведён спектр отражения света комплекса, образованного ионом Ag(I) с тироном, иммобилизованным на фильтровальной бумаге (б).

В спектральном исследовании (рис. а) поглощение в области 380–420 нм ($F(R) \approx 0,1$) снижается до 450–600 нм и стабилизируется выше 600 нм. Более высокие значения $F(R)$ у образца 2 указывают на эффективную иммобилизацию тирона. Поглощение связано с переходами в ароматическом кольце и группах $-\text{OH}/-\text{SO}_3\text{H}$.

На рис. (б) после добавления ионов Ag(I) появляется максимум поглощения при 450 нм, свидетельствующий о формировании комплекса Ag(I)-тирон за счёт переходов $\pi \rightarrow \pi/\text{n} \rightarrow \pi$. Это подтверждает координацию ионов серебра с функциональными группами тирона. Полученные данные свидетельствуют о возможности использования

созданного слоя в качестве оптического сенсора для определения ионов переходных металлов в водных растворах.

Литература

1. Alberti, G., Zanoni, C., Magnaghi, L. R., & Biesuz, R. (2020). Low-cost, disposable colourimetric sensors for metal ions detection. *Journal of Analytical Science and Technology*, 11(1), 30.
2. Schäfer, M., Bräuler, V., & Ulber, R. (2018). Bio-sensing of metal ions by a novel 3D-printable smartphone spectrometer. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 255, 1902-1910.
3. Apyari, V. V., Dmitrienko, S. G., & Zolotov, Y. A. (2013). Unusual application of common digital devices: Potentialities of Eye-One Pro mini-spectrophotometer—A monitor calibrator for registration of surface plasmon resonance bands of silver and gold nanoparticles in solid matrices. *Sensors and Actuators B: Chemical*, 188, 1109-1115.

© Сабиров Н.Ш., Аширов М.А., Палванов Н.С., 2025

УДК 691.175.2

СТАБИЛИЗАЦИЯ КОМПОЗИТНЫХ СОСТАВОВ, СОДЕРЖАЩИХ ОГНЕСТОЙСКИЕ ДОБАВКИ С НИЗКОЙ СТЕПЕНЬЮ ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТИ, ВЛИЯЮЩИХ НА ВРЕМЯ ЖЕЛАТИНИЗАЦИИ СОСТАВОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭФИРНЫХ СМОЛ

Сагадеева Р.Р., Тимофеев В.П., Ковшов А.Ю.
ООО «Автопласт», Нефтекамск, Россия

Хлорпарафины с содержанием хлора порядка 70 % применяются в качестве антипаренов в составе полиэфирных связующих, используемых для производства стеклопластиковых изделий (СПИ). Однако их использование сопровождается рядом технологических затруднений, обусловленных стабильностью данных соединений. С течением времени хлорпарафины склонны к термической деструкции, сопровождающейся процессами дегидрогалогенирования, что приводит к снижению жизнеспособности композиции и ухудшению технологических свойств связующего.

Для повышения стабильности галогенсодержащих полимеров применяются различные стабилизирующие добавки. В данной работе использовался в качестве стабилизатора стеарат цинка, препятствующий термодеструкции и улучшающий химстойкость полимерных систем.

В данных исследованиях стеарат цинка вводился в состав связующего в количестве 0,25% от общей массы композиции. Наблюдения за изменением времени желатинизации проводились в течение 10 суток, с целью оценки стабилизирующего действия добавки.

Предварительно в композицию вводился ускоритель (катализатор) – 6% р-р октоата кобальта (в стироле) в количестве 0,17% от массы. В качестве инициатора отверждения использовался перекись метилэтилкетона марки Akperox A-50 (с содержанием активного кислорода 8,8–9,3 %) в дозировках 1 % и 2 % от массы композиции.

Таблица 1

Оценка времени желатинизации состава композиции без введения стабилизатора

| Количество введенного отвердителя марки Akperox A-50, % | Время проверки, час. | | | | |
|---|----------------------|----|----|-----|-----|
| | 0 | 24 | 48 | 168 | 240 |
| | Результат, мин. | | | | |
| 1 | 35 | 29 | 21 | 19 | 17 |
| 2 | 20 | 19 | 14 | 12 | 11 |

Таблица 2

Оценка времени желатинизации состава композиции с введением стабилизатора

| Количество введенного отвердителя марки Akperox A-50, % | Время проверки, час. | | | | |
|---|----------------------|------------------|----|-----|------------------|
| | 0 | 24 | 48 | 168 | 240 |
| | Результат, мин. | | | | |
| 1 | 55 | 54 | 57 | 55 | 52 |
| 2 | 15 | 15 ³⁰ | 15 | 14 | 14 ³⁰ |

Доказана возможность стабилизации времени желатинизации композитных составов, содержащих хлорированный парафин, за счет введения в рецептуру цинк - органической соли стеариновой кислоты.

Литература

1. Коляго Г.Г., Струк В.А. Материалы на основе ненасыщенных полизифиров. – Минск: Наука и техника, 1990.

© Сагадеева Р.Р., Фараизов И.И., Тимофеев В.П., Ковшов А.Ю., 2025

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ
ПРОГНОЗИРОВАНИЯ РАСТВОРИМОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ
МАТЕРИАЛОВ

Сафина А.А.¹, Лифанова Е.Г.¹, Лифанов А.Д.²,

¹*Казанский (Приволжский) Федеральный университет, Казань, Россия*

²*Казанский национальный исследовательский технологический
университет, Казань, Россия*

Информация о растворении полимеров имеет важное значение для разделения смесей полимеров, выбора метода их переработки, а также при их использовании для доставки биологически активных веществ. В работе [1] показано, что по растворимости полимеров в растворителях можно судить о термодинамической совместимости компонентов растворов. Для получения нанокомпозитов, полимерный материал сначала растворяют в селективном растворителе, а потом диспергируют наночастицы в полученном растворе [2].

В настоящее время для прогнозирования растворимости полимеров в различных растворителях пользуются расчетными методами. Данные методы основаны на теории растворов Флори-Хаггинса [2]. Кроме того, для определения растворимости полимеров используют хроматографические, спектрометрические и вискозиметрические методы. Данные методы являются продолжительными во времени и требуют наличия дорогостоящего оборудования.

Для оценки растворимости полимеров целесообразно использовать методы машинного обучения.

В работе использовался набор данных, содержащий информацию о 2089 полимерах с известными значениями коэффициентов растворимости (268 сополимеров и 1821 гомополимеров) в различных растворителях. Данные характеристики представлены двумя классами: растворимый (класс «1») и не растворимый (класс «0»). Поэтому растворимость полимера можно оценивать только по отношению к растворителю, для прогнозирования этого параметра в методе машинного обучения необходимо учитывать химическую природу как полимера, так и растворителя. Мы считаем целесообразным использовать компьютерное представление молекул растворителя (CCO – этанол, ClC(Cl)Cl – хлороформ, C1COCCO1 - диоксан, Clc1ccccc1 – хлороформ и рассчитывать на основе этих представлений молекулярные дескрипторы.

В качестве компьютерных представлений полимеров мы использовали классическую систему SMILES [3]. Данный вид компьютерных представлений является линейным. В этом случае информация о молекулярной структуре полимера кодируется на основе дескрипторов, которые рассчитываются на основе SMILES [3]. Для

каждой пары химических объектов (полимера и растворителя) результирующий дескриптор получен в результате конкатенации структурных дескрипторов полимеров и растворителей [4-6].

Для поиска оптимального решения для обучения регрессионных моделей были выбран алгоритм случайного леса (RF) [8, 9]. Данный метод выбран вследствие своей высокой обобщающей способности.

Наилучшие характеристики получены с использованием модели на основе алгоритма случайного леса. Статистические характеристики RF-модели имеют следующие значения: AUC-ROC=0.95, Точность=0.94, Сба-лансируванная точность ВА=0.94, F1-мера=0.94. Таким образом, построенная модель является надежным инструментом прогнозирования растворимости полимеров и может применяться для подбора селективных растворителей [9, 10].

Литература

1. Лифанов А.Д., Получение ударопрочного полистирола, стойкого к расщесиванию в циклопентане / А.Д. Лифанов, В.П. Архиреев // Вопросы ма-териаловедения. 2010. № 2 (62). С. 58-63.
2. Jin Z.; Zhang Z.; Demir K.; Gu G.X. Machine learning for advanced additive manufacturing. Matter 2020, 3, 1541–1556.
3. Weininger D. SMILES, a Chemical Language and Information System. 1. In-troduction to Methodology and Encoding Rules. Journal of Chemical Infor-mation and Computer Sciences 1988, 28, 1, 31-36.
4. <https://rdkit.org/>
5. <https://scikit-learn.org/>
6. Rakimbekova A.; Lopukhov A.; Klyachko N.; Kabanov A.; Madzhidov T.I.; Tropsha A. Efficient design of peptide-binding polymers using active learn-ing approaches. Journal of Controlled Release 2023, 353, 903-914.
7. Dong J.; Cao D.S.; Miao H.Y. et al. ChemDes: an integrated web-based plat-form for molecular descriptor and fingerprint computation J Cheminform 2015, 7, 60.
8. Xia L.-Y.; Wang Q.-Y.; Cao Z.; Liang Y. Descriptor Selection Improvements for Quantitative Structure-Activity Relationships International Journal of Neural Systems 2019, 29 (9), 230–242.
9. Лифанов А.Д., Полиуретан-стирольные композиты, модифицированные слоистыми силикатами / А.Д. Лифанов // Каучук и резина. 2012. № 3. С. 41-42.
10. Лифанов А.Д., Термодинамический анализ совместимости систем кау-чук-полимеризационноспособное соединение / А.Д. Лифанов // Вестник технологического университета. 2019. Т.22. № 5. С. 67-69.

© Сафина А.А., 2025

УДК 661.669

СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ ДИСПЕРГИРОВАННЫХ СИСТЕМ НА
ОСНОВЕ НАНОУГЛЕРОДНОГО МАТЕРИАЛА

Севостьянов Д.В., Сундекалиев Д.Б., Рамазанова А.В., Фатхиев Т.И.,
Мустафин И.А., Ханов А.Р.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа,
Россия*

С момента открытия углеродные нанотрубки (УНТ) подвергаются тщательному изучению и вызывают огромный интерес благодаря своему уникальному сочетанию механических, электрических и термических свойств. Для практического применения данного материала необходим эффективный метод синтеза. Среди множества подходов химическое осаждение из газовой фазы является наиболее перспективной технологией. Данный выбор объясняется такими преимуществами метода, как качество получаемого материала, производительность и возможность масштабирования процесса [1].

В качестве сырья в данном процессе выступают органические вещества. В ходе проведения синтеза углеродных нанотрубок углеводородное сырье подвергается термическому воздействию на подложке катализатора [2].

Синтез осуществляют с помощью никелевого катализатора, выдерживая определённый температурный диапазон от 500 до 900 °C. Также данный метод характеризуется использованием наиболее доступного и относительно дешёвого сырья, например, метана.

В ходе выполнения эксперимента был получен углеродный материал, который представляет из себя агломерат многостенных углеродных нанотрубок (рис. 1).



Рис. 1. СЭМ-изображение полученного углеродного материала

Препятствием на пути практического применения УНТ является их агрегирование с образованием достаточно прочных сростков (пучки, связки, жгуты) [3]. Эти пучки обусловлены влиянием Ван-дер-Ваальсовых сил, которые являются ключевым фактором в структуре и свойствах углеродных нанотрубок.

На практике применяют различные методы диспергирования УНТ в растворах наряду с поверхностно-активными веществами (ПАВ) и добавками. В качестве основного метода диспергирования применяют

ультразвуковые диспергаторы. Также допускается предварительное механическое измельчение, которое ускоряет процесс «разрушения» крупных агломераций наноуглеродного материала.

В данной работе было подготовлено шесть образцов (рис. 2) методом ультразвукового диспергирования, в которых содержалось по 1 % по массе описанного выше углеродного наноматериала.

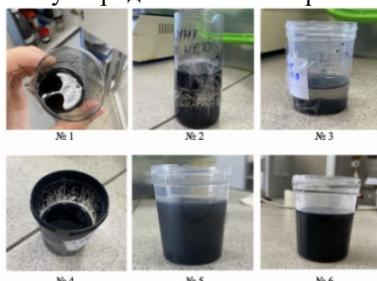


Рис. 2. Полученные суспензии методом ультразвукового диспергирования: № 1 – 1 % УНТ, 10 % карбоксиметилцеллюлоза (КМЦ) и глицерин; № 2 – 1 % УНТ, 10 % неанола, глицерин; № 3 – 1 % УНТ, 10 % лапрола, глицерин; № 4 – 1 % УНТ и глицерин; № 5 – 1 % УНТ, 10 % КМЦ и дистиллированную воду; № 6 – 1 % УНТ, N-метилпиролидон

Использование в качестве растворителя лапрола, неонола в глицерине не привело к получению устойчивой суспензии. При применении КМЦ в водном растворе и N-метилпиролидона были получены устойчивые дисперсионные системы.

Литература

1. Sulfur-decorated polyaniline-nanotube composites as cathode materials for lithium metal batteries / L.R. Latypova , I. A. Mustafin, Y.I. Baluda, G.S. Usmanova, I.S. Zhidkov, N. N. Dremova, P.A. Troshin, O.A. Kraevaya, S. M. Aldoshin, Akhat G. Mustafin // Synthetic Metals. – 2025. Р. 1–8.
2. Nanofibrous carbon (multi-wall carbon nanotubes): synthesis and electrochemical studies by using field-effect transistor setup / Ildar A. Mustafin, Arslan F. Akhmetov, Renat B. Salikhov, Ilnur A. Mullagaliev, Timur R. Salikhov, Rail N. Galiakhmetov, Olga V. Shabunina, Dmitry S. Kopchuk, Igor S. Kovalev, Akhat G. Mustafin // Chimica Techno Acta, Ural Federal University. – 2024. Р. 1–7.
3. Щегольков Ал. В., Щегольков А. В., Комаров Ф. Ф., Парафимович И. Д., Мильчанин О. О., Кобелев А. В. Применение углеродных нанотрубок для создания материалов поглощающих электромагнитное излучение и электродов суперконденсаторов // Вестник ВГУИТ. 2020. №1 (83).

© Севостьянов Д.В., Сундекалиев Д.Б.,
Рамазанова А.В., Фатхиев Т.И., Мустафин И.А., Ханов А.Р., 2025

УДК 541.69:697:544.165

СЕДИМЕНТАЦИОННАЯ УСТОЙЧИВОТЬ ПОЛИМЕР-КОЛЛОИДНЫХ
ДИСПЕРСИЙ НА ОСНОВЕ N-СУКЦИНИЛХИТОЗАНА И ЧАСТИЦ
ЙОДИДА СЕРЕБРА

Соснина Д.А., Базунова М.В.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Натриевая соль N-сукцинилхитозана (СХТЗ) представляет собой модифицированный хитозан, который получают путём реакции первичных аминогрупп хитозана ($-NH_2$) с ангидридом янтарной кислоты или её производными. В результате на цепях полимера появляются амидные и карбоксильные группы: ($-CONH-$), ($-COOH$). Это придаёт материалу улучшенные растворимость, биосовместимость и функциональность, расширяя области его применения в биомедицине, фармацевтике и охране окружающей среды. Создание устойчивых полимер-коллоидных дисперсий на основе водорастворимых производных хитозана, в том числе СХТЗ, и неорганических коллоидных частиц, обладающих антисептическими свойствами, является одним из способов создания гибридных гелеобразных и пленочных материалов биомедицинского назначения.

Модификация хитозана с помощью сукцинильных групп изменяет его молекулярную массу и степень разветвленности. Более разветвлённые структуры имеют меньшую плотность и могут лучше удерживаться в растворе, что способствует их седиментационной устойчивости. В связи с этим, целью данной работы было изучение закономерностей стабилизации коллоидных частиц золя йодида серебра полимерным стабилизатором —натриевой солью N-сукцинилхитозана (СХТЗ) методом седиментации.

Отрицательно заряженные частицы золя AgI получали по известной методике [1] смешением равно концентрированных (0,01 моль/л) растворов нитрата серебра с йодидом калия в объемном соотношении 7:10. Для получения полимер-коллоидных дисперсий СХТЗ с мицеллами золя AgI проводили набухание СХТЗ в предварительно приготовленном золе.

Стабилизация полимерами, по сути, обусловлена либо увеличением вязкости дисперсионной среды (диффузионный фактор), либо специфической адсорбией макромолекул на поверхности коллоидных частиц, создающей на их поверхности структурно-механический барьер, препятствующий слипанию частиц.

Как следует из данных, представленных на рисунке, с повышением концентрации СХТЗ мутность верхнего слоя полимер-коллоидных дисперсий максимальна для системы с максимальной концентрацией СХТЗ (4%). Следовательно, можно предположить, что больший вклад в

стабилизацию коллоидных частиц йодида серебра вносит диффузионный фактор. Также следует отметить, что все изученные системы характеризуются высокой седиментационной устойчивостью, что важно при получении из дисперсий различных видов материалов: пленок, пористых пластин и пр.

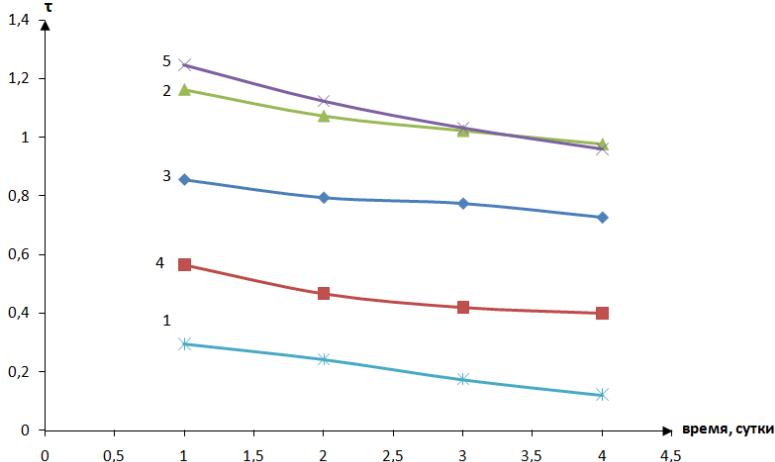


Рис. 1. Зависимость мутности верхнего слоя полимер-коллоидных дисперсий от времени: Золь AgI 0,01Н (1), СХТЗ 1% + Золь AgI 0,01Н (2), СХТЗ 1,5% + Золь AgI 0,01Н (3), СХТЗ 5% + Золь AgI 0,01Н (4), СХТЗ 7% + Золь AgI 0,01Н (5)

Материалы на основе изученных систем проявляют высокую antimикробную активность по отношению к четырем наиболее частым возбудителям раневой инфекции: *Staphylococcus aureus* - наиболее агрессивному грамположительному микроорганизму и трем грамотрицательным микроорганизмам *Escherichia coli*, *Pseudomonas aeruginosa* и *Proteus mirabilis*. Исследования показали, что пленки на основе дисперсий СХТЗ-АgI обладают выраженным бактерицидным действием, в то время как при выбранных концентрациях индивидуальный золь и индивидуальный СХТЗ характеризовались только бактериостатическим эффектом (т.е. задержка роста наблюдалась только непосредственно под испытуемым образцом).

Литература

- Лабораторные работы и задачи по коллоидной химии / Под ред. Ю.Г. Фролова и А.С. Гродского. М.: Химия, 1986.
- Bazunova M.V., LazdinR.Yu., Elinson M.R. et al. // Chimica Techno Acta. 2022. Т. 9. № 1. С. 20229108.

© Соснина Д.А., Базунова М.В., 2025

УДК 541.6

ВЛИЯНИЕ ФТАЛАЗОЛА И ХИТОЗАНА НА ПОКАЗАТЕЛЬ
ТЕКУЧЕСТИ РАСПЛАВА КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ
ПОЛИЛАКТИДА И ПОЛИКАПРОЛАКТОНА

Сунаргулов А.Б., Бакирова Э.Р., Кулиш Е.И.

Уфимский университет науки и технологии, Уфа, Россия

Создание раневых покрытий для лечения долго незаживающих ран, таких как глубокие ожоги или пролежни, является актуальной задачей в современной медицинской и полимерной химии. В качестве основы такого покрытия могут быть использованы синтетические полизифиры: полилактид (ПЛ) и поликапролактон (ПКЛ) [1]; а также полисахариды, например, хитозан (ХТЗ). Для придания материалу антибактериальных свойств в смесь на основе биоразлагаемых и биосовместимых полимеров необходимо добавлять лекарства, например, фталазол (ФТЛ). Для создания качественного раневого покрытия, пригодного для лечения тяжелых ран, необходимо исследовать весь спектр свойств полученного материала. Целью данной работы является исследование зависимости показателя текучести расплава от содержания ХТЗ и ФТЛ в смесях на основе ПКЛ и ПЛ.

В работе использовали ПЛ марки bio-101 (Biopoly, Китай), ПКЛ марки Экопластик (Ecoplastic, Китай), ХТЗ («Биопрогресс», Россия), препарат сульфаниламидной группы фталилсульфатиазол (фталазол, ФТЛ) (ВитаХим Пермь, Россия). Получение пленок проводили на лабораторном пластографе с последующим прессованием [2]. Показатель текучести расплава (ПТР) определяли на экструзионном пластометре mi2.2 (Göttfert, Германия).

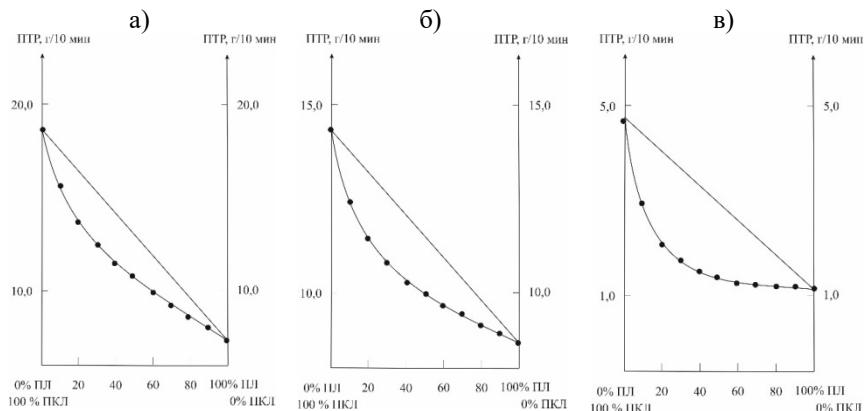


Рис. 1. Зависимость ПТР композиций ПКЛ–ПЛ (а), ПКЛ–ПЛ–ХТЗ 20 масс.ч. (б), ПКЛ–ПЛ–ХТЗ 70 масс.ч. (в) от соотношения полимеров в смеси. Содержание ФТЛ в композициях 5.0%.

В ходе проделанной работы установлено, что в отсутствие ФТЛ и ХТЗ в системе ПКЛ–ПЛ значения ПТР отклоняются в сторону больших значений по сравнению с аддитивными величинами. Из рисунка 1, видно, что введение ФТЛ и ХТЗ в композицию ПКЛ–ПЛ изменяет характер отклонения ПТР смеси полимеров от аддитивной линии. В присутствии ФТЛ и ХТЗ имеет место отклонение ПТР смеси от аддитивных величин в сторону меньших значений. Чем больше ХТЗ находится в композиции, тем больше наблюдаемое отклонение.

Литература

3. Bakirova E.R., Sunargulov A.B., Lazdin R.Y. et al. Study of Properties of Polymer Film Materials Based on Polycaprolactone–Chitosan–Ceftriaxone Blends. *Polym. Sci. Ser. A*. – 2024. – V. 66. – P. 650–654.
4. Бакирова Э.Р., Лаздин Р.Ю., Котяшов М.С. [и др.]. Влияние условий переработки на физико-механические показатели поликапролактона, полилактида и их смесей. *Бутлеровские сообщения*. – 2023. – Т. 76, № 12. – С. 10–16.

© Сунаргулов А.Б., Бакирова Э.Р., Кулиш Е.И., 2025

МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ НАНОУГЛЕРОДА
НА НИКЕЛЬСОДЕРЖАЩЕМ КАТАЛИЗАТОРЕ

Сундеткалиев Д.Б., Рамазанова А.В., Фатхиев Т.И., Мустафин И.А.,
Ханов А.Р.

Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Уфа, Россия

Получение новых функциональных материалов - основная задача науки и промышленности. Использование аддитивов на основе наноуглерода является наиболее перспективным направлением модификации новых материалов [1].

Предложена методика получения многостенных нанотрубок (рис.2) методом CVD (chemical vapor deposition). В качестве сырья выступают органические жидкости и гомологи метана. В ходе данного процесса углеводородное сырье подвергается термическому воздействию на подложке катализатора [2].

Особенностью предложенного метода является использование оригинального катализатора на основе Ni, относительно низкие температуры 500-900 °C, а также доступное и недорогое сырье. Схема лабораторной установки и материальный баланс процесса представлены на рисунке 1 и в таблице 1 соответственно.

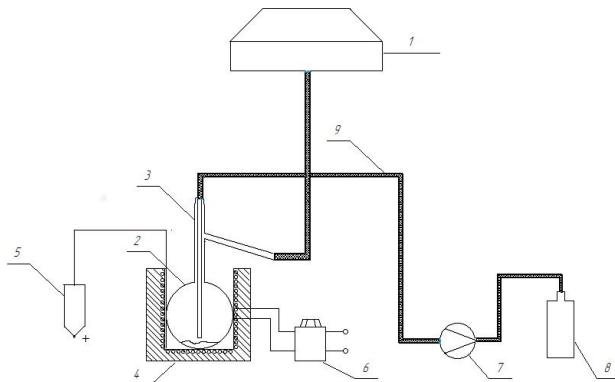


Рис. 1. Схема лабораторной установки

1 – вытяжной шкаф, 2 – стеклянный реактор, 3 – колбоотвод, 4 – печь, 5 – амперметр, 6 – ЛАТР, 7 – компрессор, 8 – сырье, 9 – шланг.

Таблица 1

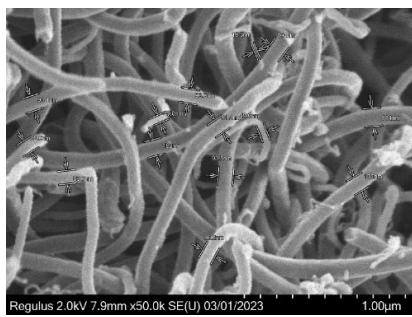
Материальный баланс процесса в зависимости от скорости подачи сырья

| Температура, °C | Масса катализатора, г. | Продолжительность процесса, час | Использовано сырья | | Получено | |
|-----------------|------------------------|---------------------------------|--------------------|-------|---------------------|-------|
| | | | г | % | Углеродный материал | |
| | | | | | г | % |
| 500 | 0,1 | 2 | 8,1 | 100,0 | 2,0 | 24,69 |
| | | | 8,3 | 100,0 | 2,2 | 26,51 |
| | | | 17,9 | 100,0 | 4,1 | 22,91 |

Снимки сделаны на сканирующем электронном микроскопе Regulus.



а)



б)

Рис. 2. Снимки СЭМ углеродного материала а)при приближении 500 нм, б) при приближении 1 мкм

Литература

1. Sulfur-decorated polyaniline-nanotube composites as cathode materials for lithium metal batteries / Lyaysan R. Latypova , Ildar A. Mustafin, Yuriy I. Baluda, Gulsum S. Usmanova, Ivan S. Zhidkov, Nadezhda N. Dremova, Pavel A. Troshin, Olga A. Kraevaya, Sergey M. Aldoshin, Akhat G. Mustafin // Synthetic Metals. – 2025. стр. 1–8.
2. Nanofibrous carbon (multi-wall carbon nanotubes): synthesis and electrochemical studies by using field-effect transistor setup / Ildar A. Mustafin, Arslan F. Akhmetov, Renat B. Salikhov, Ilnur A. Mullagaliev, Timur R. Salikhov, Rail N. Galiakhmetov, Olga V. Shabunina, Dmitry S. Kopchuk, Igor S. Kovalev, Akhat G. Mustafin // Chimica Techno Acta, Ural Federal University. – 2024. С. 1–7.

© Сундеткалиев Д.Б., Рамазанова А.В.,
Фатхиев Т.И., Мустафин И.А., Ханов А.Р., 2025

УДК 543.552.054.1

ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНЫЕ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ
СЕНСОРЫ, МОДИФИЦИРОВАННЫЕ КОМПЛЕКСАМИ
ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С ХИРАЛЬНЫМИ ЛИГАНДАМИ
ПРИРОДНОГО И СИНТЕТИЧЕСКОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ

Терес Ю.Б., Волкова А.А., Зильберг Р.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Современные тенденции в аналитической химии, особенно в контексте хирального анализа, направлены на исследование биологически активных добавок и фармацевтических форм лекарственных препаратов, содержащих оптически активные вещества. Несмотря на значительные достижения в разработке и применении вольтамперометрических сенсоров для энантиоселективного анализа биологически активных соединений, продолжаются интенсивные исследования в области новых хиральных селекторов, которые удовлетворяли бы комплексу строгих требований, включая надежное энантиомерное распознавание, высокую чувствительность и воспроизводимость, а также низкую себестоимость и простоту изготовления. Одним из наиболее перспективных направлений в данной области является разработка энантиоселективных вольтамперометрических сенсоров (ЭВС), основанных на хиральных комплексах переходных металлов [1-7].

Исследованы комплексы переходных металлов с хиральными лигандами природного и синтетического происхождения в качестве хиральных селекторов. Композиты на основе хиральных селекторов с природными лигандами и полиэлектролитного комплекса хитозана и N-сукцинил-хитозана были иммобилизованы на поверхность стеклоуглеродного электрода [3-4]. Комплексные соединения с синтетическими лигандами, обладающие выраженной гидрофобностью, были успешно применены в составе пастовых электродов из графитированной термической сажи CarboblackC [5-7]. В результате оптимизации условий регистрации вольтамперограмм и состава хиральной фазы сенсора была достигнута максимальная энантиоселективность. Изучено влияние конфигурации хиральных селекторов, заместителей в структуре комплексов, а также эффект противоиона на энантиоселективность сенсоров, разработанных на основе исследуемых комплексных соединений переходных металлов. Эффективность разработанных сенсоров была подтверждена при анализе энантиомеров биологически активных соединений, входящих в состав лекарственных препаратов (Пропранолол, Атенолол, Напроксен) и биологически активных добавок (Триптофан). Регистрация вольтамперограмм последовательно разбавленных растворов

энантиомеров исследуемых анализаторов позволила установить ключевые аналитические характеристики сенсоров: линейный диапазон определяемых концентраций, пределы обнаружения и нижние границы определяемых концентраций. Полученные экспериментальные данные подтверждают высокую чувствительность, селективность и стабильность разработанных сенсоров. Проведена апробация сенсоров на основе комплексов переходных металлов в сложных матрицах различной природы, включая биологические жидкости (плазма крови, моча), таблетированные и капсулированные лекарственные формы, рацемические смеси, а также образцы с нестехиометрическим соотношением энантиомеров. На основе данных, полученных при изучении стабильности разработанных ЭВС, сделан вывод, что сенсоры на основе комплексов переходных металлов с органическими хиральными лигандами синтетического происхождения способны сохранять свои характеристики дольше, чем сенсоры на основе комплексов с природными лигандами: стабильность таких сенсоров достигает 20 дней, что значительно превосходит показатели стабильности большинства существующих аналогов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, грант № 23-23-00340.

Литература

1. Khromova O.V. Chiral Cobalt(III) Complexes Based on (1R,2R)-Cyclohexanediamine and 4-Bromo-5-methylsalicylaldehyde: Synthesis, Modification, and Application in Catalysis and Enantioselective Sensors / O. V. Khromova, A. F. Smol'yakov, R. A. Zil'berg [et al.] // Russian Journal of Coordination Chemistry. – 2025. – Vol. 51, No. 3. – P. 200-210.
2. Gizatov R. R. Synthesis and Application of Chelate Complexes $[\text{Zn}(\text{L-arg})_2(\text{H}_2\text{O})]$ and $[[\text{Zn}(\text{L-arg})_2(\text{H}_2\text{O})](\text{SO}_4)]^{2-}$ as Chiral Selectors / R. R. Gizatov, Yu. B. Teres, M. N. Galimov [et al.] // Russian Journal of Coordination Chemistry. – 2025. – Vol. 51, No. 2. – P. 119-128.
3. Zilberg R.A. 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.
4. Зильберг Р.А. Энантиоселективные вольтамперометрические сенсоры на основе аминокислотных комплексов Cu(II), Co(III), Zn(II) / Р. А. Зильберг, Л. Р. Загитова, И. В. Вакулин [и др.] // Журнал аналитической химии. – 2021. – Т. 76, № 12. – С. 1111-1122.
5. Zilberg R.A. Voltammetric sensor for naproxen enantiomers based on a pasteelectrode modified with a Chiral nickel(II) complex / R. A. Zilberg, Y. B. Teres, I. V. Vakulin [et al.] // Chirality. – 2025. – Vol. 37, No. 2. – P. e70025.

6. Zilberg R.A. Chiral octahedral cobalt(III) complex immobilized on Carboblack C as a novel robust and readily available enantioselective voltammetric sensor for the recognition of tryptophan enantiomers in real samples / R. A. Zilberg, Ju. B. Teres, E. O. Bulysheva [et al.] // Electrochimica Acta. – 2024. – Vol. 492. – P. 144334.
7. Zilberg R.A. A chiral Ni(II) complex immobilized on Carboblack C as a readily available and effective enantioselective voltammetric sensor for recognition of atenolol enantiomers in real samples / R. A. Zilberg, Y. B. Teres, E. O. Bulysheva [et al.] // Electrochimica Acta. – 2025. – Vol. 529. – P. 146309.

© Терес Ю.Б., Волкова А.А., Зильберг Р.А., 2025

УДК: 542.61:546,72:542

**ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЛИЧЕСТВЕННОГО СОДЕРЖАНИЯ КОФЕИНА В
ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ НАПИТКАХ МЕТОДОМ УФ-
СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ**

Гайнуллина Ю.Ю., Фаздалова И.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Дilemma о пользе и вреде энергетиков существует в каждой стране. Для того чтобы принять решение лично для себя, необходимо разобраться: что относится к тонизирующим напиткам и из чего они состоят?

Кофеин – обязательный компонент всех энергетиков, благодаря его присутствию энергетические напитки наравне с кофе обладают мощным бодрящим эффектом. Суточная норма кофеина для практически здорового взрослого человека составляет 300–400 мг, при ее превышении учащается сердцебиение, расширяются сосуды, возрастает выброс адреналина, что влияет на метаболизм, появляется чувство тревожности и т. д.

С помощью спектрофотометрического метода анализа нами были изучены 10 образцов энергетических напитков с разным указанным содержанием кофеина. Согласно ГОСТ 52844-2007 (Напитки безалкогольные тонизирующие. Общие технические условия) максимальное содержание кофеина не должно превышать 40 мг на 100 мл. Образцы 3, 5, 6, 9, 10 превышают содержание кофеина по требованиям ГОСТ.

Таблица 1

Содержание кофеина в энергетических напитках

| Образец, № | Кофеин, мг/ 100г |
|------------|------------------|
| 1 | 30 |
| 2 | 32 |
| 3 | 44 |

Окончание табл. 1

| | |
|----|----|
| 4 | 34 |
| 5 | 46 |
| 6 | 46 |
| 7 | 34 |
| 8 | 33 |
| 9 | 42 |
| 10 | 45 |

© Гайнуллина Ю.Ю., Фаздалова И.Р., 2025

УДК 542.61:546,72:542

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЛИЧЕСТВЕННОГО СОДЕРЖАНИЯ ТАУРИНА

В ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ НАПИТКАХ МЕТОДОМ

УФ-СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ

Гайнуллина Ю.Ю., Фаздалова И.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Энергетик – это безалкогольный напиток, содержащий кофеин, таурин и другие тонизирующие организм компоненты.

Таурин – аминокислоту животного происхождения. Она имеет свойство ускорять энергетические процессы в организме и активизировать работу сердечно-сосудистой системы. Хотя таурин не считается токсичным в больших дозах, он накапливается в желчи и может повредить поджелудочную железу. Норма таурина в энергетических напитках варьируется, но может превышать рекомендуемую дневную дозу для здорового человека, которая составляет 1-1,5 грамма, при этом некоторые банки содержат до 4 грамм и более.

Нами были исследованы 10 образцов с помощью УФ-спектрофотометрии на содержание таурина в энергетических напитках. В исследуемых образцах содержание таурина варьировалось от 0,2 до 0,4 грамм и более на 100 мл энергетического напитка (500 мл напитка содержит от 1 до 2 и более грамм таурина). Полученные данные представлены в таблице 1. Образцы 4, 5, 8, 9, 10 превышают допустимую норму потребления таурина в сутки и могут вызвать серьезные последствия.

Таблица 1

Содержание кофеина и таурина в энергетических напитках

| Образец, № | Таурин, мг/100мл |
|------------|------------------|
| 1 | 200 |
| 2 | 250 |
| 3 | 270 |

| | |
|----|-----|
| 4 | 420 |
| 5 | 450 |
| 6 | 330 |
| 7 | 400 |
| 8 | 410 |
| 9 | 440 |
| 10 | 410 |

© Гайнуллина Ю.Ю., Фаздалова И.Р., 2025

УДК 541.49:547.462.3

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЙ КОМПЛЕКС
5-ГИДРОКСИ-1,3,6-ТРИМЕТИЛУРАЦИЛА С ЯНТАРНОЙ КИСЛОТОЙ
И ЕГО БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ**

Фазлыева Л.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Известно, что янтарная кислота (ЯК) обладает антитоксическими свойствами, например, снижает наркотический и токсический эффект этианола и токсический эффект ацетальдегида. 5-Гидрокси-6-метилурацил характеризуется широким спектром биологической активности, включая антидотное действие. Согласно литературным данным, многие замещенные 5-гидрокси-6-метилурацила проявляют улучшенные физико-химические и физиологические свойства. В этой связи объектом настоящего исследования был выбран 5-гидрокси-1,3,6-триметилурацил (ГТМУ). Ожидается, что его взаимодействие с янтарной кислотой может привести к образованию нового комплекса, обладающего усиленными антидотными свойствами.

Спектрофотометрическим методом установлено, что в интервале температур 296 – 357 К ГТМУ и ЯК образуют супрамолекулярный комплекс с константами устойчивости $K \sim 10^3 \div 10^4$ л/моль и составом 1 : 1. На основании температурной зависимости K определены термодинамические параметры комплексообразования: $\Delta H^\circ = -(59 \pm 10)$ кДж/моль, $\Delta S^\circ = -(121 \pm 22)$ Дж/моль · К и ΔG° (296 К) = $-(23 \pm 4)$ кДж/моль. Полученные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными более ранних работ [1, 2]. Биологическими испытаниями показано, что комплекс проявляет антидотную активность в случаях отравления нитритом натрия и относится к нетоксичным, малоопасным веществам [3].

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

Литература

1. Борисова Н.С., Ишмуратова Г.И., Валиева О.И., Борисов И.М., Зимин Ю.С., Мустафин А.Г. Исследование взаимодействия янтарной и фумаровой кислот с урацилом и его производными // Вестник Башкирского университета. 2012. Т. 17. № 4. С. 1687-1690.
2. Терентьев А.О., Борисова Н.С., Хамитов Э.М., Зимин Ю.С., Мустафин А.Г. Экспериментальное и квантово-химическое исследования взаимодействий 6-метилурацила с янтарной и фумаровой кислотами // Журнал физической химии. 2014. Т. 88. № 12. С. 1908-1913.
3. Комплексное соединение 5-гидрокси-1,3,6- trimетилурацила с янтарной кислотой, проявляющее антидотную активность, и способ его получения: пат. 2634731 Рос. Федерации. № 2016137606; заявл. 20.09.2016; опубл. 03.11.2017, Бюл. № 31, 8 с.

© Фазлыева Л.А., 2025

УДК 544.18

ВЛИЯНИЕ ДИАМЕТРА ПОР СИНТЕТИЧЕСКИХ ЦЕОЛИТОВ НА ЭНЕРГИЮ СТАБИЛИЗАЦИИ ФОРМИРОВАНИЯ ПЕРЕХОДНОГО СОСТОЯНИЯ В РЕАКЦИИ ПЕРЕГРУППИРОВКИ АЗА-КЛЯЙЗЕНА

Фахретдинов Д.Ш., Валитова Р.С., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В рамках изучения влияния топологии полостей пористых материалов на ход периклических реакций, были проведены расчеты энергии стабилизации переходного состояния реакции перегруппировки N-(1-метилбут-2-ен-1-ил)анилина (рис. 1) в присутствии ряда синтетических цеолитов с различным диаметром пор цеолитов. Для расчетов использовался модуль Adsorption Locator в программном пакете MaterialsStudio 2023. Энергия стабилизации была принята как обратное значение энергии адсорбции переходного состояния в порах цеолитах. В качестве объектов исследования были выбраны синтетические цеолиты, широко используемые в промышленности в качестве адсорбентов и молекулярных сит: KA (3 Å), NaA (4 Å), CaA (5 Å), CaX (8 Å) и NaX (9 Å). Исследование данных материалов позволяет экстраполировать полученные результаты на реальные технологические процессы.

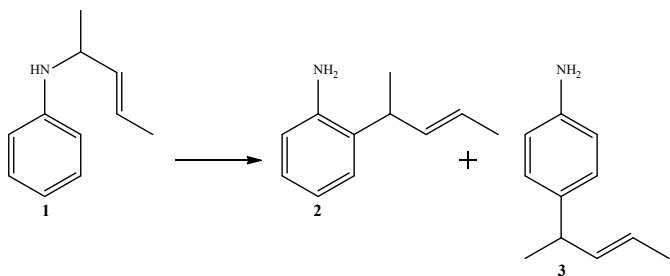


Рис. 1. Перегруппировка N-(1-метилбут-2-ен-1-ил)анилина

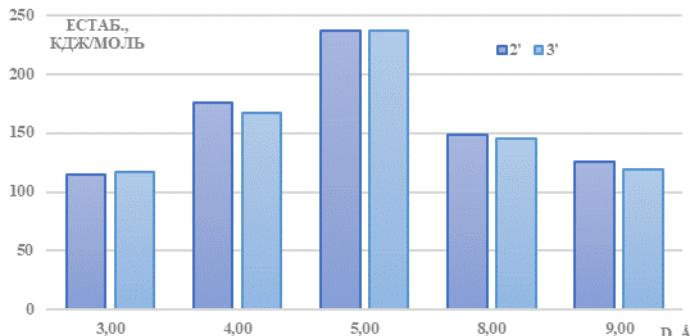


Рис. 2. Зависимость энергии стабилизации ($E_{\text{стаб}}$) орто- и пара-замещенных переходных состояний от диаметра пор синтетических цеолитов

На первом этапе реакция аза-Кляйзена приводит к образованию орто-замещенного продукта **2**, который затем подвергается перегруппировке Коупа с образованием пара-замещенного продукта **3**. То есть существует два возможных переходных состояния **2'** и **3'** соответственно, для каждого из которых были рассчитаны энергии стабилизации в порах цеолитов (рис. 2.).

Наблюдаемая на диаграмме экстремальная зависимость стабильности переходных состояний от диаметра пор с максимумом при 5 Å демонстрирует оптимальность цеолитов данного размера для достижения максимальной скорости и селективности процесса.

© Фахретдинов Д.Ш., Валирова Р.С., Латыпова Э.Р.,
Талипов Р.Ф., 2025

КАТАЛИЗ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ (НАНОРАЗМЕРНЫХ)
МЕТАЛЛОДЕРЖАЩИХ СУСПЕНЗИЙ ПРИ ПЕРЕРАБОТКЕ НЕФТИ
Храмцова Л.А.¹, Судакова О.М.², Корнилова А.А.²,
Мустафин А.Г.^{1,2}, Галиахметов Р.Н.²

¹Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия
²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Присутствие гетероатомных соединений (в основном серы и азота) является одной из основных проблем при переработке нефти. Эти соединения, во-первых, являются ядами катализаторов таких процессов, как каталитический крекинг, риформинг и др., и во-вторых, представляют опасность для окружающей среды, поскольку при применении в качестве топлива продуктов переработки нефти, образуют токсичные соединения. В связи с чем существуют процессы гидроочистки. Несмотря на изученность процессов переработки нефти, переработка тяжелых нефтей и нефтяных остатков достаточно проблемна. Они отличаются большим содержанием серы.

В ходе наших исследований, посвященных процессам переработки тяжелых нефтей, нефтяных остатков, а также полимерных отходов установлено каталитическое действие металлорганических соединений. Было доказано образование наночастиц металлов и их окислов, сульфидов, а также серы при термическом распаде металлорганических соединений в середе углеводородов нефти и нефтяных остатков в виде ультрадисперсных супензий [1-2]. Последующие исследования показали, что при деструкции углеводородов, в присутствии 2-никеля, кроме наночастиц никеля образуются углеродные нанотрубки [3]. Образование углеродных нанотрубок происходит именно на поверхности наночастиц металлов.

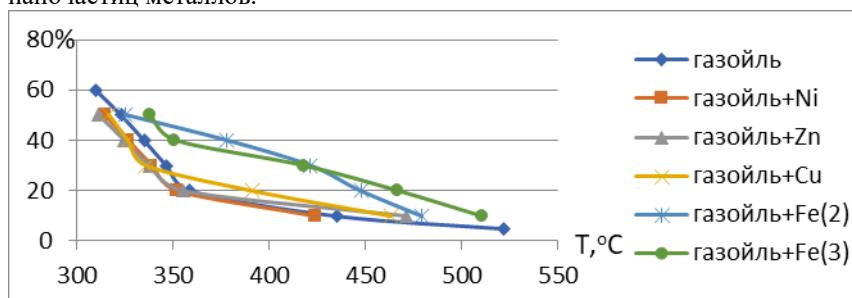


Рис. 1. Изменение массы образца газойля и образцов газойля с добавкой 0,3% масс 2-этгексаноатов никеля, цинка, меди, железа (2+) и железа (3+) с увеличением температуры в интервале 300-550°C при термографических исследованиях

Для изучения формальной кинетики процессов, протекающих в среде углеводородов нефти в присутствии прекурсоров таких каталитических систем, наиболее удобным способом исследований является методы ТГА/ДТА (рис. 1).

Результаты таких исследований могут быть использованы при кинетическом моделировании термохимических процессов [4].

Необходимо иметь в виду то, что при изучении кинетики и механизма реакций разложения углеводородов нефти на таких катализаторах, а эти реакции достаточно заметно протекают выше 350°C , возможны не только с участием карбоний-ионов и ион-радикалов, но и реакции цепных радикальных реакций деструкции. А это затрудняет изучение механизма и кинетики реакций, протекающих при этих условиях.

Литература

1. Патент РФ №2472842. Применение органической соли для увеличения глубины переработки углеводородсодержащего сырья и способ увеличения глубины переработки углеводородсодержащего сырья / Галиахметов Р.Н., Мустафин А.Г. // Б.И.- 2013.- №2.
2. Деструктивное превращение газойля в присутствии наноразмерного катализатора на основе никеля / И. А. Мустафин, М. Ф. Абдуллин, О. М. Судакова [и др.] // Нефтехимия. – 2018. – Т. 58. – № 3. – С. 275-281.
3. Nanofibrous carbon (multi-wall carbon nanotubes): synthesis and electrochemical studies by using field-effect transistor setup. Mustafin I.A., Akhmetov A.F., Salikhov R.B., Mullagaliev I.A., Salikhov T.R., Galiakhmetov R.N., Shabunina O.V., Kopchuk D.S., Kovalev I.S., Mustafin A.G. CHIMICA TECHNO ACTA. Том: 11, № 4 , 2024, стр. 202411421
4. Моделирование процесса деструкции твердоплавкого парафина Корнилова А.А., Мустафина С.И., Гиззатова Э.Р., Мустафин А.Г., Галиахметов Р.Н. В книге: Проблемы и достижения химии кислород- и азотсодержащих биологически активных соединений. Сборник тезисов VIII Всероссийской молодежной конференции. Уфа, 2024. С. 179.

© Храмцова Л.А., Судакова О.М., Корнилова А.А., Мустафин А.Г., Галиахметов Р.Н., 2025

УДК 544.473

КАТАЛИТИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ВАКУУМНОГО ГАЗОЙЛЯ В
ПРИСУТСТВИИ МЕТАЛЛОГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Храмцова Л.А.¹, Судакова О.М.², Мустафин А.Г.^{1,2}, Галиахметов Р.Н.²

¹Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Вакуумный газойль сернистых и высокосернистых нефтей перед его каталитическими превращениями, при вторичной переработке нефти, обязательно подвергают гидроочистке во избежание отравления катализаторов процессов. Использование наноразмерных металлсодержащих катализаторов позволяет проводить эти процессы без обязательной гидроочистки [1]. К тому же, такие катализаторы позволяют снизить температуру процессов на 100 и более градусов, и давления - до атмосферного. А это может значительно снизить металлоемкость оборудования и затраты на производство. Поэтому немаловажно изучение условий и процессов образования нанокатализаторов из прекурсоров. Удачное формирование ультрадисперсных катализаторов в среде углеводородов из прекурсоров окончательно определяет эффективность каталитических систем при переработке сырья.

Температура разложения используемых солей металлов(прекурсоров) лежит примерно в диапазоне 240-270⁰С. Предыдущие исследования образования металлсодержащих наночастиц в среде углеводородов нефти показали, что уже при температурах порядка 300⁰С вполне возможно их образование. Обычно, процессы вторичной переработки нефти, а это каталитический крекинг, висбрекинг, риформинг, гидрокрекинг, изомеризация, осуществляются при температурах выше температуры образования нанокатализаторов. Поэтому применение металлоганических соединений в виде прекурсоров таких катализаторов значительно облегчает задачу. Поведение металлсодержащих наночастиц в углеводородной среде значительной степени определяет природа металла и в каком виде этот металл образует эти наночастицы. Чаще всего более активные каталитические свойства проявляют наночастицы металлов, сульфидов, окислов этих металлов. Если, например, наночастицы Ni⁰, то они способны не только участвовать в реакциях крекинга, но и формировать нанотрубки из углеводородов. Окислы и сульфиды никеля способны восстанавливаться в углеводородной среде при высоких температурах, и далее участвовать в реакциях как Ni⁰. А вот такие металлы как цинк, проявляет каталитические свойства чаще в виде наночастиц сульфида. Такой металл как железо, может катализировать как в виде металла, так и в виде двух-, трехвалентных и др. сульфидов и окислов. В ходе исследований установлено участие железа, никеля и

кобальта не только как катализирующие реакции деструкции, но и синтеза углеводородов, подобно реакциям синтеза Фишера-Тропша. Характер влияния того или иного металла на качество продуктов переработки углеводородов нефти наглядно можно продемонстрировать, например, разгонкой вакуумного газойля в присутствии солей различных металлов по Энглеру. Видно, как сильно отличаются температура кипения отгона от добавки металлорганической соли. Если кривая изменения температуры кипения дистиллята в присутствии металлорганической соли никеля и без добавки не сильно отличаются, то для цинка, а еще сильнее для железа, очевидно значительное снижение температуры кипения. И еще, в присутствии цинковой соли, получается больше дистиллятной фракции, чем в присутствии солей никеля и железа. А это еще раз подтверждает результаты наших рассуждений выше, про различие в механизмах влияния таких добавок на термокаталитические процессы.

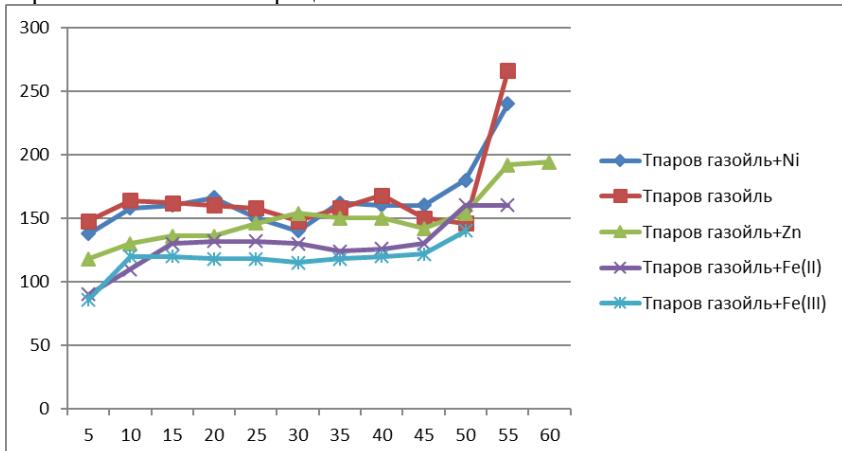


Рис. 1. Кривые разгонки по Энглеру вакуумного газойля, полученного из западносибирской нефти в присутствии 0,3 % масс. 2-этилгексаноатов никеля, цинка, железа 2+ и железа 3+ и без добавок.

Литература

- Деструктивное превращение газойля в присутствии наноразмерного катализатора на основе никеля / И. А. Мустафин, М. Ф. Абдуллин, О. М. Судакова [и др.] // Нефтехимия. – 2018. – Т. 58. – № 3. – С. 275-281.

© Храмцова Л.А., Судакова О.М., Мустафин А.Г., Галиахметов Р.Н., 2025

УДК 665.61:544.6

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАСТВОРОВ

АСФАЛЬТЕНОВ МЕТОДАМИ ИК- И ИМПЕДАНСНОЙ

СПЕКТРОСКОПИИ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ ХЕМОМЕТРИКИ

К.А. Храмцова¹, А.Х. Бикмеева¹, Д.И. Дубровский², Д.М. Бикмееев^{1,2}

¹Уфимский государственный нефтяной технический университет,

Уфа, Россия

²ООО «РН-БашНИПИнефть» (ОГПАО «НК «Роснефть»), Уфа, Россия

Асфальтены – высокомолекулярные компоненты нефти, содержащие кислород- и азотсодержащие функциональные группы, определяющие их склонность к ассоциации и агрегированию. Их физико-химические свойства, включая диэлектрическое поведение, подробно рассмотрены в литературе [1]. Ранее авторами показано, что параметры эквивалентных схем импедансных спектров растворов асфальтенов в толуоле отражают начало процессов агрегации [2].

В настоящей работе представлены результаты исследования растворов асфальтенов в толуоле (0-10 % масс.) методами инфракрасной (ИК) и импедансной спектроскопии (ИС). ИК-спектры отражают колебательные характеристики функциональных групп (C=O, O-H, N-H, C=C), тогда как ИС – процессы межфазной поляризации и релаксации, связанные с изменением структуры и полярности системы.

Совместная обработка массивов ИК- и импедансных данных методами главных компонент (PCA) и проекции на латентные структуры (PLS) позволила описать согласованные изменения спектров при росте концентрации асфальтенов. При 10 % масс. наблюдается отклонение от линейной зависимости, что указывает на начало ассоциации частиц. Регрессионные модели на основе конкатенированных матриц продемонстрировали высокую точность прогнозирования концентрации ($RMSECV \leq 0,23\% \text{ масс.}, R^2 \geq 0,996$).

Интеграция ИК- и импедансной спектроскопии с применением методов хемометрики показала перспективность данного подхода для физико-химического изучения асфальтеновых систем и дальнейшего определения критической концентрации их агрегации.

Литература

1. Lesaint C., Simon S., Glomm W.R., Berg G., Lundgaard L.E., Sjöblom J. Dielectric Properties of Asphaltene Solutions: Solvency Effect on Conductivity // Energy & Fuels. – 2013. – V. 27, № 1. – pp. 75-81.
2. Бикмееев Д.М., и др. Физико-химическое моделирование импедансного отклика растворов асфальтенов // Башкирский химический журнал, 2025, № 3, с. 48-52.

© Храмцова К.А., Бикмееева А.Х., Дубровский Д.И., Бикмееев Д.М., 2025

УДК 66.096.4, 577.181.6

ФОРМИРОВАНИЕ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ

ГИДРАЗИДА ИЗОНИКОТИНОВОЙ КИСЛОТЫ

С α -, β - И γ -ЦИКЛОДЕКСТРИНАМИ

Чернобровкина В.И., Огнева А.С.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Комплексообразование биологически активных средств на полимерных или олигомерных носителях [1, 2] и биологическая активность получаемых соединений [3] весьма плодотворно изучаются на кафедре ФХ и ХЭ ИХЗЧС УУНиТ. Большое количество публикаций указывает на то, что данное направление является востребованным и актуальным. В связи с изложенным, изучение взаимодействия гидразида изоникотиновой кислоты (изониазид), обладающего мощным противотуберкулезным действием, с α -, β - и γ -цикло декстринами не явилось исключением.

Комплексообразование изучали методом ультрафиолетовой спектроскопии при длинах волн $\lambda = 190\text{--}360$ нм и низких концентрациях всех компонентов ($10^{-4}\text{--}10^{-5}$ М). Было установлено, что при добавлении цикло декстринов к водным растворам гидразида изоникотиновой кислоты наблюдались небольшие сдвиги максимумов поглощения и изменения интенсивностей пиков полос поглощения, что указывает на образование комплексных соединений. Методом молярных отношений были определены составы изучаемых комплексов (1:1) и константы устойчивости

при

$T = 291\text{--}316$ К. Показано, что рост температуры не влияет на состав образующихся комплексов, а значения констант устойчивости снижаются. Рассчитанные термодинамические параметры комплексообразования указывают на то, что процессы идут самопроизвольно с выделением тепла и с уменьшением колебательных и вращательных движений молекул при образовании комплексов включения.

Литература

1. Зимин Ю.С., Кутлугильдина Г.Г., Рамазанова З.Ф., Мустафин А.Г. Взаимодействие окисленной фракции поливинилового спирта с производными 332 урацила в водных растворах // Журнал физической химии. 2022. Т. 96. № 8. С. 1159–1164.
2. Кутлугильдина Г.Г., Зимин Ю.С., Давлетшина Д.Т., Ахметханов Р.М. Взаимодействие окисленной фракции арабиногалактана сибирской лиственницы с ацетилсалациловой кислотой // Вестник Башкирского университета. 2024. Т. 29. № 24. С. 218–223.
3. Кутлугильдина Г.Г., Зимин Ю.С., Гимадиева А.Р., Репина Э.Ф., Кудояров Э.Р. Токсичность и антигипоксическая активность препарата,

содержащего комплексное соединение 5-гидрокси-6-метилурацила с N-ацетилцистеином // Химико-фармацевтический журнал. 2024. Т. 58. № 2. С. 3-7.

© Чернобровкина В.И., Огнева А.С., 2025

УДК 544.4

АНТИОКИСЛИТЕЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ 10Н-ФЕНОТИАЗИНА
В РЕАКЦИИ ИНИЦИИРОВАННОГО ОКИСЛЕНИЯ
ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА

Шараева К.С.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Фенотиазин и его производные известны как биологически активные соединения с широким потенциалом действия. Существует множество препаратов на основе фенотиазина, обладающие антипсихической, антибактериальной, противоопухолевой активностями [1]. В последнее время в фармакологии большое значение придаётся наличию антиоксидантных свойств у лекарственных препаратов, что позволяет замедлить процесс перекисного окисления липидов клеточных мембран. В связи с вышеизложенным в настоящей работе были изучены кинетические закономерности ингибирующего действия 10Н-фенотиазина на примере модельной реакции радикально-цепного окисления изопропилового спирта.

Кинетический эксперимент проводили при $T=348$ К в присутствии инициатора азодизизобутиронитрила (АИБН), скорость инициирования $V_i = 2.4 \cdot 10^7$ М/с. Антиокислительную активность оценивали по скорости поглощения кислорода и появлению периода индукции на кинетических кривых. Увеличение концентраций вводимых добавок фенотиазина проводит к снижению скорости поглощения кислорода (рис.1). Полученные результаты исследования свидетельствуют об ингибирующих свойствах изученного соединения.

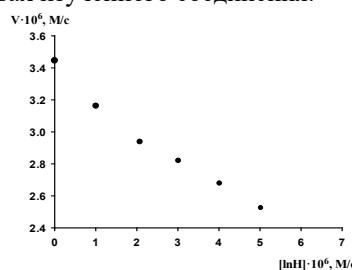


Рис. 1. Зависимости скорости окисления изопропилового спирта от концентрации исследуемого соединения. $T = 348$ К, $V_i = 2.4 \cdot 10^7$ М/с

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

Литература

1. Dasgupta A. et al. Antibacterial activity of artificial phenothiazines and isoflavones from plants //Bioactive heterocycles VI: Flavonoids and anthocyanins in plants, and latest bioactive heterocycles I. – 2008. – Р. 67-132.

© Шараева К.С., 2025

УДК 544.4

АНТИОКСИДАНТНАЯ АКТИВНОСТЬ 10Н-ФЕНОТИАЗИН-2-КАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ НА ПРИМЕРЕ МОДЕЛЬНОЙ РЕАКЦИИ РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОГО ОКИСЛЕНИЯ ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА

Шараева К.С.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Антиоксиданты представляют собой широкий класс соединений, основная функция которых заключается в нейтрализации активных форм кислорода (АФК) и замедлении радикально-цепной реакции окислительных процессов [1]. Изучение эффективности и механизмов действия потенциальных антиоксидантов составляет основу для поиска лекарственных препаратов, способных предотвратить нарушение целостности мембран и последующее повреждение других макромолекул [2]. В качестве соединения ингибитора окислительных процессов в настоящей работе был изучен один из представителей фенотиазинового ряда (10Н-фенотиазин-2-карбоновая кислота) как биологически значимое соединение с широким спектром действия.

Изучение антиоксидантной активности 10Н-фенотиазин-2-карбоновой кислоты проводили на примере модельной реакции радикально-цепного окисления изопропилового спирта при $T=348$ К, скорости инициирования $V_i = 2.4 \cdot 10^{-7}$ М/с (инициатор – азодизобутиронитрил). Эффективность ингибирующего действия оценивали по измерению скорости поглощения кислорода воздуха в отсутствие и присутствии исследуемого соединения. Из кинетических кривых (рис.1) следует, что с увеличением концентрации вводимых добавок изученного соединения скорость поглощения кислорода уменьшается и на кинетических кривых наблюдается период индукции. Полученные результаты свидетельствуют о выраженных антиоксидантных свойствах изученного фенотиазина.

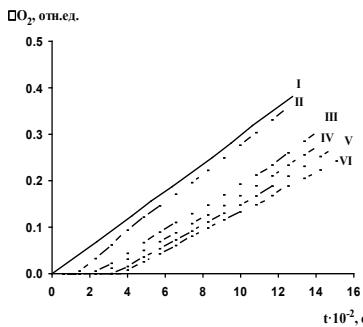


Рис. 1. Кинетические кривые поглощения кислорода при окислении изопропилового спирта в отсутствии [I] и присутствии добавок соединения $[InH] \cdot 10^{-6} M = 0$ (I), 2.01 (II), 7.05 (III), 8.06 (IV), 9.06 (V), 10.01 (VI), $T = 348K$, $V_i = 2.4 \cdot 10^{-7} M/c$

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>

Литература

1. Ozougwu J. C. The role of reactive oxygen species and antioxidants in oxidative stress //International Journal of Research. – 2016. – V. 1. – No. 8. – P. 1-8.
2. Gerchikov A. Y., Safarova I. V., Shaymordanova G. M., Sharaeva K. S., Nedopekina D. A., Spivak A. Y. 10H-phenothiazin-2-yl-methanamine as an Inhibitor of Radical Chain Oxidation of Organic Compounds. Kinetics and Mechanism of Action //Physical Chemistry Research. – 2025. – V. 13. – No 1. – P. 1-9.

© Шараева К.С., 2025

УДК 544.4

АЗОТСОДЕРЖАЩИЕ ПРОДУКТЫ ТРАНСФОРМАЦИИ ЦИКЛОГЕКСАНОНА КАК ИНГИБИТОРЫ РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОГО ОКИСЛЕНИЯ ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА

Шараева К.С., Охиров Ш.М., Латыпова Э.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Известно, что перекисное окисление липидов (ПОЛ) является механизмом повреждения клеток активными формами кислорода в виде радикалов. Избыточное содержание свободных радикалов в организме человека является причиной старения и ряда различных заболеваний. В связи с изложенным в фармакологии активно ведутся исследования свойств соединений на антирадикальную активность с целью замедлить процесс перекисного окисления липидов [1]. Одними из возможных ингибиторов окислительных процессов выступают продукты трансформации циклогексанона, биологическая активность которых

имеет широкий потенциал для изучения их свойств [2]. В настоящей работе были изучены кинетические закономерности радикально-цепного окисления изопропилового спирта в присутствии 2,4-диокса-7-азоспиро[5,6]додекан-8-она (InH).

Ингибирующую эффективность InH оценивали по скорости поглощения кислорода окисления изопропилового спирта в присутствии добавок исследуемого соединения. Кинетический эксперимент проводили при $T=348$ К, скорости инициирования $V_i = 2.4 \cdot 10^{-7}$ М/с, инициатор – азодиизобутиронитрил (АИБН). Установлено, что введение добавок 2,4-диокса-7-азоспиро[5,6]додекан-8-она приводят к снижению скорости поглощения кислорода и появлению периода индукции на кинетических кривых (рис.1), что свидетельствует об ингибирующих свойствах изученного соединения.

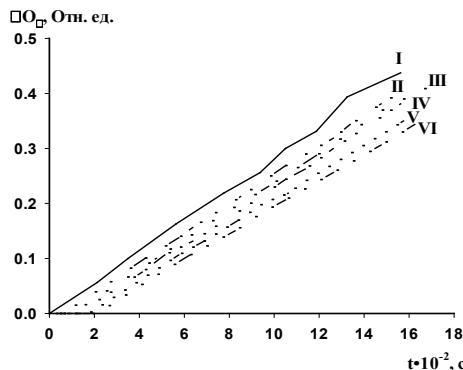


Рис. 1. Кинетические кривые поглощения кислорода при окислении изопропилового спирта в отсутствии [I] и присутствии добавок соединения $[InH] \cdot 10^{-4}$ М = 0 (I), 0.50 (II), 1.25 (III), 2.00 (IV), 2.51 (V), $T = 348$ К, $V_i = 2.4 \cdot 10^{-7}$ М/с.

Литература

1. Gerchikov A.Y., Safarova I.V., Shaymordanova G.M., Sharaeva K.S., Nedopekina D.A., Spivak A.Y. 10H-phenothiazin-2-yl-methanamine as an Inhibitor of Radical Chain Oxidation of Organic Compounds. Kinetics and Mechanism of Action //Physical Chemistry Research. – 2025. – V. 13. – No. 1. – P. 1-9.
2. Shin S.Y., Park J., Jung Y., Lee Y.H., Koh D., Yoon Y., Lim Y. Anticancer activities of cyclohexenone derivatives //Applied Biological Chemistry. – 2020. – V. 63. – P. 1-9.

© Шараева К.С., Охиров Ш.М., Латыпова Э.Р., 2025

УДК 544.4

КИНЕТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ N-(10Н-ФЕНОТИАЗИН-2-ИЛ-МЕТИЛ)ОКТАНАМИДА В РЕАКЦИИ РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОГО ОКИСЛЕНИЯ ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА

Шараева К.С.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Известно, что окислительный стресс выступает одним из возможных факторов появления и развития онкологических заболеваний [1]. С целью увеличения эффективности действия лекарственного препарата наряду с противоопухолевой активностью целесообразно проявление антиоксидантной активности. В ходе исследований [2] было доказано, что производные фенотиазина является весьма эффективными препаратами противоопухолевого действия. С целью дальнейшего исследования свойств фенотиазинов в настоящей работе были изучены кинетические закономерности антиоксидантного действия одного из производных фенотиазина (InH).

Антиоксидантную активность изучали на примере модельной реакции инициированного окисления изопропилового спирта с использованием высокочувствительной манометрической дифференциальной установки при $T=348$ К и скорости инициирования $V_i = 2.4 \cdot 10^{-7}$ М/с (инициатор – азодизобутиронитрил). Эффективность ингибирующего действия оценивали по скорости поглощения кислорода в присутствии добавок исследуемого соединения. Установлено, что с увеличением концентрации добавок InH скорость поглощения кислорода уменьшается (табл. 1). Полученные данные свидетельствуют о том, что изученное соединение проявляет антиокислительные свойства.

Таблица 1

Количественные кинетические параметры реакции инициированного окисления изопропилового спирта в присутствии InH

| $[InH] \cdot 10^6$, моль/л | $V \cdot 10^6$, моль/л·с | $f k_f \cdot 10^{-5}$, л/моль·с | f |
|--------------------------------|------------------------------|-------------------------------------|--------------|
| 0.00 | 3.45 ± 0.4 | 7.9 ± 0.9 | 16.8 ± 2 |
| 5.15 | 3.17 ± 0.4 | | |
| 6.18 | 3.1 ± 0.4 | | |
| 7.21 | 2.95 ± 0.4 | | |
| 8.24 | 2.82 ± 0.3 | | |

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

Литература

1. Hayes J. D., Dinkova-Kostova A. T., Tew K. D. Oxidative stress in cancer // Cancer cell. – 2020. – Т. 38. – №. 2. – С. 167-197.

2. Motohashi N. et al. Antitumor potential and possible targets of phenothiazine-related compounds // Current drug targets. – 2000. – Т. 1. – №. 3. – С. 237-246.

© Шараева К.С., 2025

УДК 544.4

РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ПРОИЗВОДНЫХ ФЕНОТИАЗИНА
В КАЧЕСТВЕ ИНГИБИТОРОВ ОКИСЛЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ
СОЕДИНЕНИЙ

Шараева К.С.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Производные фенотиазина является перспективным классом соединений, которые находят широкое применение в фармакологии и биомедицине. В результате имеющихся исследований установлено, что N-замещенные фенотиазина обладают выраженным антиоксидантными свойствами [1]. В связи с этим изучение производных фенотиазина с различными заместителями в качестве ингибитора окислительного процесса приобретает большое значение.

Ингибирующую способность 10Н-фенотиазин-2-ил-метанамина (InH) оценивали по скорости поглощения кислорода при окислении изопропилового спирта и 1,4-диоксана. Кинетический эксперимент проводили с помощью универсальной дифференциальной установки при $T = 348$ К в присутствии инициатора 2,2'-азобисизобутиронитрила (скорость инициирования $V_i = 2,4 \cdot 10^7$ М/с). Установлено, что изученное соединение обладает антиоксидантными свойствами при окислении обоих субстратов. Более выраженная ингибирующая способность характерна в случае окисления изопропилового спирта, о чем свидетельствуют количественные характеристики антиоксидантного действия (табл. 1).

Таблица 1

Количественные кинетические параметры реакции инициированного окисления в присутствии InH

| Субстрат окисления | $f k_7 \cdot 10^{-5}$, л/моль·с | f |
|---------------------|-------------------------------------|----------------|
| Изопропиловый спирт | 23.6 ± 3.5 | 19.2 ± 2.0 |
| 1,4-Диоксан | 0.2 ± 0.03 | 1.4 ± 0.2 |

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

Литература

1. Ohlow M. J., Moosmann B. Phenothiazine: the seven lives of pharmacology's first lead structure //Drug discovery today. – 2011. – Т. 16. – №. 3-4. – С. 119-131.

© Шараева К.С., 2025

Секция III. Теоретические аспекты гетероатомных соединений и их превращений

УДК 577.322.4:615.015.2:544.18

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРОИЗВОДНЫХ 3,4-ДИГИДРОПИРИМИДИН-2-ОНА С АКТИВНЫМ ЦЕНТРОМ ИЗОФОРМ ЦИКЛООКСИГЕНАЗ (ЦОГ-1 И ЦОГ-2)

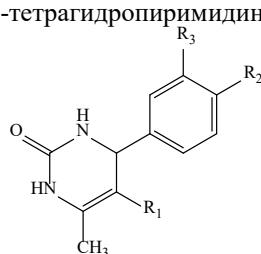
Андреев Д.А., Максимов Л.С., Хайруллина В.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

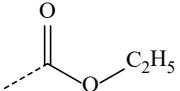
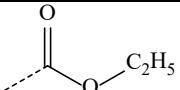
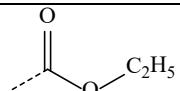
Исследование создания селективных ингибиторов циклооксигеназ 1 и 2 остается актуальным в связи с их ключевой ролью в воспалительных и болевых процессах, а также потенциалом для разработки более безопасных и эффективных лекарственных средств с минимальными побочными эффектами. Современные подходы к синтезу и оптимизации таких ингибиторов способствуют улучшению лечебных стратегий и расширению возможностей персонализированной медицины.

В этом контексте мы исследовали пространственное соответствие десяти производных 6-метил-4-арил-2-оксо-1,2,3,4-тетрагидропириимида активным центрам ферментов циклооксигеназа-1 (ЦОГ-1) и циклооксигеназа-2 (ЦОГ-2). Молекулярные структуры лигандов были помещены в активные центры указанных изоформ ЦОГ с учётом особенностей их стереохимического строения (см. таблицу 1).

Таблица 1
Структурные формулы моделируемых соединений, производных 1,2,4,4-тетрагидропириимида



| № | Код соединения | R ₁ | R ₂ | R ₃ |
|---|----------------|----------------|----------------|----------------|
| 1 | o1 | | -H | -H |
| 2 | o2 | | -OCH3 | -OH |

| | | | | |
|---|----|---|----|-------------------|
| 3 | o3 |  | -H | -OCH ₃ |
| 4 | o4 |  | -H | -OH |
| 5 | o5 |  | -H | -NO ₂ |

В качестве моделей белковых молекул ЦОГ-1 и ЦОГ-2 использовали структурные данные из PDB: макромолекулы с кодами 3N8X (цепь В) и 1PXX (цепь А), соответственно. Активные центры этих макромолекул учтены в трехмерных областях размером 20 Å, центр которых определяли по нативным лигандам – нимесулиду для ЦОГ-1 и диклофенаку для ЦОГ-2.

Значения Ebind, полученные с помощью скоринг-функций AutoDock Vina и Glide для нативных лигандов демонстрируют хорошее согласование: расхождения в координатах потенциально биоактивных конформаций по RMSD составляют 0.218 для 3N8X и 0.228 для 1PXX, что подтверждает надежность расчетов и хорошее соответствие результатов моделирования.

Анализ расчетов методов докинга показывает, что все исследуемые соединения способны связываться с активными сайтами обеих изоформ ЦОГ. Значения Ebind для соединений o1–o5 находятся в пределах, сопоставимых с архидоновой кислотой (-5.80 и -6.30 ккал/моль). Некоторые лиганда (o2R, o3R и др.) при связывании с ЦОГ-1 показывают аффинность, сравнимую с известными нестероидными препаратами – нимесулидом, диклофенаком и флуорбипрофеном, с значениями E_{bind} в диапазоне -9.10 до -7.00 ккал/моль. При исследовании взаимодействия с ЦОГ-2 получены аналогичные результаты, с диапазоном E_{bind} от -8.80 до -7.00 ккал/моль, что также сопоставимо с активными компонентами известных противовоспалительных средств.

Сравнительный анализ расчетных значений для одной и той же связки показывает, что изучаемые соединения потенциально могут проявлять выраженный ингибиторный эффект против обеих изоформ ЦОГ *in vivo*, что указывает на их возможную неселективность. Для подтверждения этих предположений необходимы дальнейшие биологические исследования.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда №19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

© Андреев Д.А., Максимов Л.С., Хайруллина В.Р., 2025

**ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ НОМО-LUMO АНТРАЦЕНА И
АДДУКТОВ НА ЕГО ОСНОВЕ**

Гарифуллин М.Ф., Саттарова А.Ф., Корнилов Д.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Концепция зеленого органического синтеза – ключевой компонент современной химии, направленный на устойчивое развитие. Экологичная химия предполагает отказ от растворителей и катализаторов или минимизацию загрязнения. Растворители, хотя и улучшают распределение реагентов, токсичны, летучи и воспламенямы, что усложняет производство. Органические твердофазные реакции перспективны для промышленности, но механохимические методы пока не применяются широко из-за недостаточного понимания кинетики.

Реакции Дильса-Альдера – эффективный метод с высоким выходом и простотой условий. В Уфимском Университете Науки и Технологий было проведено следующее превращение:

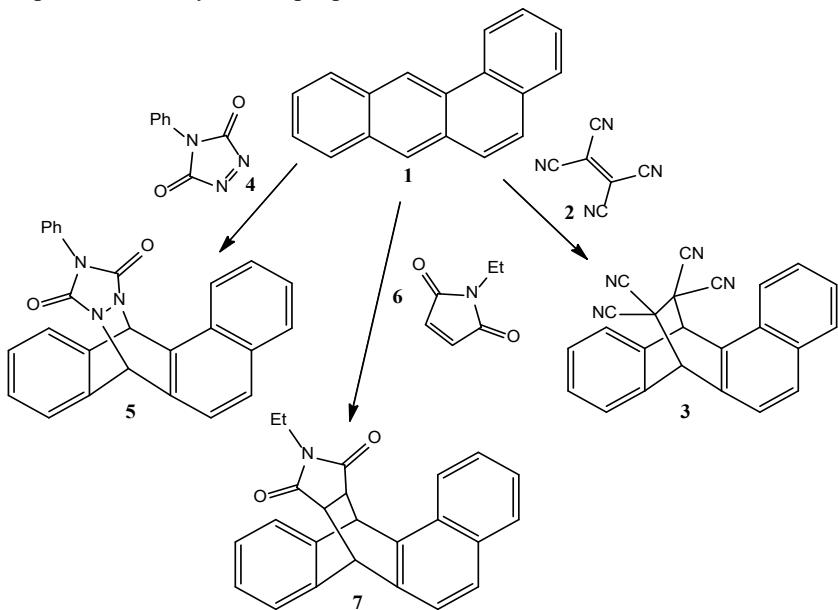


Схема 1. Реакции Дильса-Альдера бенз(а)антрацена **1** с тетрацианоэтиленом **2**, 4-фенил-1,2,4-триазолин-3,5-дионом **4** и N-этилмалеинимидом **6**

HOMO-LUMO важный параметр, который играет большую роль в химических реакциях, так как электроны из HOMO могут переходить на другие орбитали, участвуя в образовании химической связи. При взаимодействии, HOMO-орбиталь одной молекулы может перекрываться с LUMO-орбиталью другой молекулы – это взаимодействие может привести к образованию новой связи между молекулами или к разрыву существующей связи.

Методом DFT в программе Gaussian были проведены квантово-химические расчеты и определена разница энергий между высшей занятой молекулярной орбитальной (HOMO) и низшей вакантной молекулярной орбитальной (LUMO) для бенз(а)антрацена (1) и продуктов реакции Дильса-Альдера с его участием: аддукт тетрацианоэтилена-бенз(а)антрацена (4), аддукт 4-фенил-1,2,4-триазолин-3,5-диона-бенз(а)антрацена (3), аддукт N-этилмалеинимида- бенз(а)антрацена (2) (рис.1).

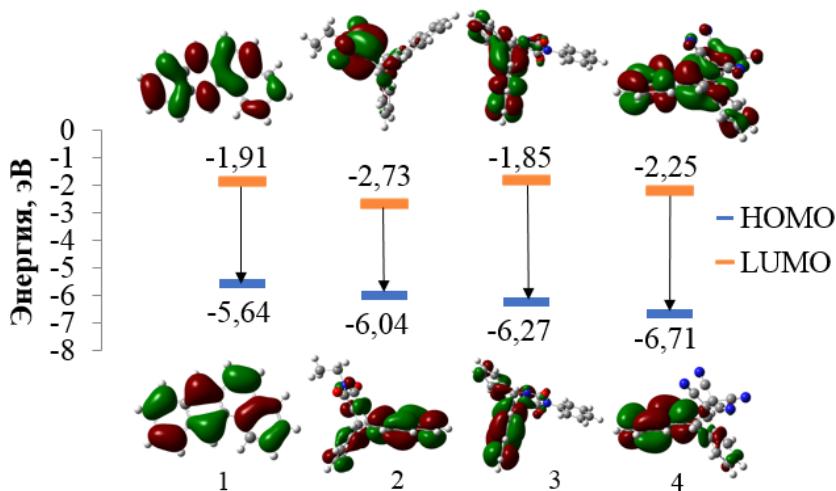


Рис. 1. Диаграмма энергетических уровней HOMO-LUMO

Литература

1. Lixu L., Yiming Z. Solvent-free or less-solvent solid state reactions // Progress in Chemistry. – 2020. – Т. 32. – №. 8. – С. 1158-1171.

© Гарифуллин М.Ф., Саттарова А.Ф., Корнилов Д.А., 2025

УДК 547-327

ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ИНГИБИТОРЫ ОНКОГЕНЕЗА НА ОСНОВЕ
АМИДОВ С ГАЛОГЕНФЕНИЛЗАМЕЩЕННЫМИ ФРАГМЕНТАМИ
Гладких Б.П.^{1,2}, Бутов Г.М.^{1,2}

¹Волжский политехнический институт (филиал) Волгоградского
государственного технического университета, Волжский, Россия

²Волгоградский государственный технический университет, Волгоград,
Россия

Раковые клетки без мутаций *BRCA1/2* успешно используют механизм гомологичной рекомбинации (HR) для репарации двухцепочечных разрывов ДНК (ДЦР), что способствует выживанию и адаптации раковых клеток в условиях стресса. HR способствует эффективному восстановлению повреждений ДНК, позволяя раковым клеткам продолжать деление даже при воздействии химиотерапии и лучевой терапии. В связи с этим эффективность ингибиторов PARP при лечении опухолей без мутаций *BRCA1/2* снижается, что позволяет раковым клеткам развивать резистентность к известным методам лечения.

Ингибиторы домена BRCA1 tBRCT могут стать новым терапевтическим решением для таких резистентных опухолей, а также для раковых клеток, использующих механизм HR для репарации повреждений ДНК.

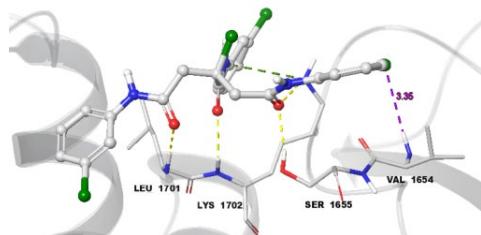


Рис. 1. Индуцированная стыковка потенциального ингибитора домена tBRCT

Проведено компьютерное моделирование потенциальных комплексов ингибиторов онкогенеза, действующих посредством связывания с С-концевым доменом tBRCT белка BRCA1. Методами *in silico* (IFD, MMGBSA, BMPD, MD-симуляция) найден низкомолекулярный ингибитор, способный имитировать фосфопептидный мотив в области tBRCT.

Исследование выполнено за счет средств программы развития ВолгГТУ «Приоритет 2030», в рамках научного проекта № 45/645-24

© Гладких Б.П., 2025

УДК 544.18:577.152.3

КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ ВЗАИМОСВЯЗИ СТРУКТУРЫ
И АКТИВНОСТИ ИНГИБИТОРОВ 15-ЛИПОКСИГЕНАЗЫ

Максимов Л.С., Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Липоксигеназы выступают важными катализаторами реакций окисления ненасыщенных жирных кислот и синтеза сигнальных молекул, которые оказывают значительное влияние на патогенез многих болезней человека и животных, таких как атеросклероз, гипертония, сахарный диабет, ожирение и заболевания нервной системы дегенеративного характера.

Целью работы было изучение количественной взаимосвязи между структурами и активностью 100 ингибиторов 15-липоксигеназы (15-LOX). Эта серия включала 100 гомо- и гетероциклических соединений. Симуляции выполнялись с использованием программного комплекса GUSAR 2019 [1]. Исходный набор данных (S1) был разделен на обучающие (TrS1, TrS2) и тестовые (TS1, TS2) выборки. Для формирования дескрипторов и построения моделей использовался весь функционал, заложенный в выбранной программе, включая методы SCR, RBF-SCR и Both. В качестве моделируемых соединений использовались производные фенола, резорцина, анакардовая кислота, диметоксибензол, алкиловые эфиры пропионовой кислоты, дифенильные ацетоны, пролин, пиррол, кетопрофен, нафталены, оксиды хиноксалина, изофлавоны, бензофураны и кумарин.

В итоге было разработано 18 консенсусных QSAR-моделей (M1-M18) для предсказания значения pIC_{50} в отношении 15-ЛОГ. Модели построены на основе комбинации специфических дескрипторов, учитывающих физико-химические свойства атомов и форму молекул. Дополнительно учитывалась липофильность моделируемых соединений.

Устойчивость моделей оценивалась с помощью скользящего контроля. Все модели QSAR показали приемлемую устойчивость и продемонстрировали высокую описательную и умеренную предсказательную способность. Наилучшие показатели описательной способности показали модели, построенные с использованием метода RBF-SCR, а наименее точными в воспроизведении экспериментальных данных оказались модели, использующие метод SCR.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда №19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

Литература

1. Khairullina, V.R.; Martynova, Yu.Z. Quantitative Structure–Activity Relationship in the Series of 5-Ethyluridine, N2-Guanine, and 6-Oxopurine Derivatives with Pronounced Anti-Herpetic Activity. *J. Mol.* 2023, 28, 7715.

© Максимов Л.С., Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р., 2025

УДК 615.273.53

МАШИННЫЙ ПОИСК ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ
АНТИКОАГУЛЯНТОВ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ
3,4-ДИГИДРОПИРИМИДИН-2-ТИОНА

Максимов Л.С., Хайруллина В.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Тромбин, фактор свёртывания крови IIa, занимает центральное место в механизме коагуляции крови, играя ключевую роль в формировании кровяных сгустков. Его активность включает стимуляцию объединения тромбоцитов и превращение фибриногена в фибрин. Являясь важнейшим энзимом системы гемостаза у млекопитающих и человека, изучение веществ, способных подавлять активность тромбина, представляется перспективным направлением в поиске решений проблем, связанных с патологическим образованием тромбов.

Цель работы: Исследование особенностей взаимодействия производных 3,4-дигидропиримидин-2-тиона с активным участком фермента тромбина.

Задачи исследования: 1) Анализ пространственного соответствия структур исследуемых веществ и активного центра тромбина. 2) Выявление факторов, обеспечивающих стабильность изучаемых соединений с тромбином.

Для выявления наиболее перспективных биологически активных конфигураций молекул производных 3,4-дигидропиримидин-2-тиона внутри активного участка тромбина применяли метод молекулярного докинга. В расчетах использовалась макромолекула тромбина с кодом PDB ID 1TA6 [1]. Расчеты выполнялись программой AutoDock Vina [2]. Пространственное исследование проводилось в области каталитического сайта с размерами бокса 22 Å.

Установлено, что из 20 исследуемых производных, только 10 соединений теоретически могут быть потенциальными ингибиторами тромбина. Энергия связывания этих соединений находится в интервале -6—7 ккал/моль. Варьирование природы циклических и ациклических фрагментов в положении R1, R2 и R3 не приводит к существенному изменению аффинности лигандов с активным центром тромбина. Стабилизируют положение лигандов в активном центре тромбина преимущественно водородные связи с близлежащими молекулами воды. Из 20 исследованных производных 3,4-дигидропиримидин-2-тиона, только 10 лигандов могут выступать потенциальными антикоагулянтами. Однако для достоверных результатов требуются биологические испытания.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда №19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

Литература

1. <https://www.rcsb.org/>
2. <https://autodock.scripps.edu/>

© Максимов Л.С., Хайруллина В.Р., 2025

УДК 544.18:577.152.3

КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ ЗАВИСИМОСТЕЙ СТРУКТУРЫ И АКТИВНОСТИ ИНГИБИТОРОВ ЦИКЛООКСИГЕНАЗЫ-2 НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ДИАРИЛГЕТЕРОЦИКЛОВ

Максимов Л.С., Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Фермент циклооксигеназа (СОХ) играет ключевую роль в синтезе простагландинов из арахидоновой кислоты, которые участвуют в различных биохимических процессах организма. Наибольшее внимание исследователей привлекают процессы воспаления и боли, регулируемые продуктами окисления полиненасыщенных жирных кислот, катализируемых СОХ. Существуют две формы СОХ: конститутивная СОХ-1, поддерживающая нормальную работу ЖКТ, почек и тромбоцитов, и индуцибельная СОХ-2, активируемая воспалительными цитокинами, липополисахаридами и митогенами.

Настоящее исследование посвящено количественному анализу зависимости активности ингибиторов циклооксигеназы-2 (СОХ-2) от их структуры. Модельные соединения выбраны из класса диарилгетероциклических производных. Для расчетов применялась программа GUSAR 2019, позволяющая строить модели QSAR (количественное соотношение структура-активность) с использованием параметра pIC_{50} .

Предварительно были созданы обучающие и тестовые наборы структур, включающие разнообразные ингибиторы СОХ-2, полученные из баз данных ChEMBL и PubChem. Экспериментальные значения pIC_{50} варьировались от 1 нМ до 9549 мкМ.

В качестве входных параметров при расчете итоговых дескрипторов использовались два типа субструктурных дескрипторов атомных окрестностей (QNA и MNA), а также три целевых молекулярных дескриптора (топологическая длина, топологический объем и липофильность). Их расчет заложен в выбранной программе.

В итоге было построено девять статистически значимых консенсус-моделей (M1-M9), каждая из которых включает разные комбинации регрессий и типов дескрипторов.

Дополнительно оценивались коэффициенты детерминации, среднеквадратичные ошибки предсказания и другие статистические

критерии построенных моделей. Все модели продемонстрировали удовлетворительную точность как для обучающего набора соединений, так и для соединений независимого тестового набора.

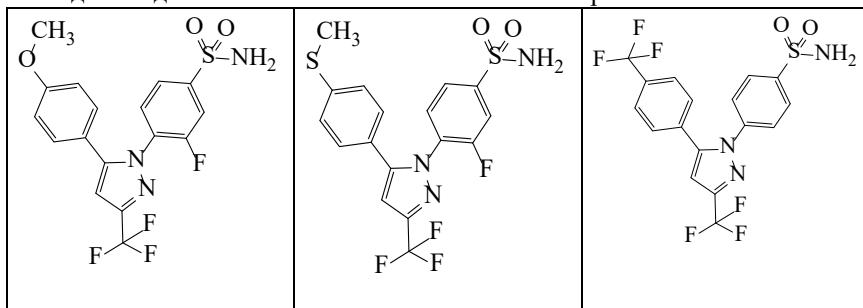


Рис. 1. Потенциально эффективные ингибиторы COX-2

Три выбранные модели (Рис. 1.) были использованы для виртуального скрининга трех независимых соединений из базы данных ChEMBL, ранее не включенных в исходный набор данных. Прогнозируемые значения pIC_{50} для этих соединений согласовывались с экспериментально измеренными значениями. Таким образом, разработанные модели демонстрируют потенциал для эффективного виртуального скрининга новых ингибиторов COX-2 среди большого числа органических соединений. Полученные результаты открывают перспективы для идентификации перспективных лекарственных кандидатов.

Исследование выполнено за счёт гранта Российского научного фонда №19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

Литература

- Khairullina, V.R.; Martynova, Yu.Z. Quantitative Structure–Activity Relationship in the Series of 5-Ethyluridine, N2-Guanine, and 6-Oxopurine Derivatives with Pronounced Anti-Herpetic Activity. *J. Mol.* 2023, 28, 7715.

© Максимов Л.С., Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р., 2025

УДК 547.835.3:577.124.3

ПОТЕНЦИАЛЬНО АКТИВНЫЕ ИНГИБИТОРЫ ЛАНОСТЕРОЛ 14А-ДЕМЕТИЛАЗЫ SACCHAROMYCES CEREVISIAE СРЕДИ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 3,4-ДИГИДРОПИРИМИДИН-2-ОНА И 3,4-ДИГИДРОПИРИМИДИН-2-ТИОНА

Максимов Л.С.¹, Мулаева С.А.¹, Хамитова Г.М.¹, Гимадиева А.Р.²

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Разработка новых эффективных противогрибковых средств представляет собой одну из наиболее актуальных задач современной медицинской химии в связи с ростом резистентности патогенных

штаммов дрожжей к существующим препаратам. Фермент ланотерол 14 α -деметилаза *Saccharomyces cerevisiae* (CYP51A1) является ключевой мишенью для действия азольных противогрибковых средств. Этот фермент катализирует критическую стадию биосинтеза эргостерола, который представляет собой основной компонент клеточных мембран грибов. Применение молекулярного докинга для поиска новых ингибиторов CYP51A1 особенно целесообразно в связи с наличием хорошо охарактеризованного активного центра фермента и возможностью точного моделирования взаимодействия лигандов с гемовым железом и гидрофобным карманом связывания. Это позволяет проводить направленный скрининг потенциальных ингибиторов, минимизируя затраты на синтез и биологическое тестирование неактивных соединений.

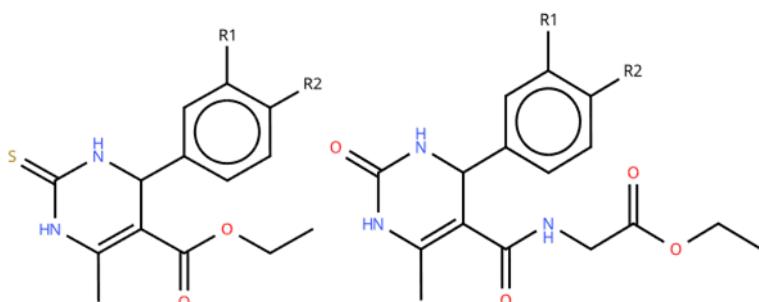


Рис. 1. Структурные формулы исследуемых соединений

Цель работы заключалась в компьютерном поиске новых перспективных ингибиторов CYP51A1 *Saccharomyces cerevisiae* среди производных 3,4-дигидропirimидин-2-она и 3,4-дигидропиримидин-2-тиона (рисунок 1). Базовая задача заключалась в оценке стерического соответствия 10 соединений данных классов с активным центром макромолекулы с PDB ID 4wmz методом молекулярного докинга. С учетом стереоизомерии в расчетах в общей сложности участвовало 20 лигандов. Все изученные соединения продемонстрировали умеренное средство с активным центром CYP51A1 и перспективны для испытаний в условиях *in vitro* и *in vivo*.

© Максимов Л.С., Мулаева С.А., Хамитова Г.М., Гимадиева А.Р., 2025

Секция IV. Химия глазами школьников

УДК 668.97

СОЗДАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ БЕЗОПАСНОГО СЛАЙМА В ДОМАШНИХ УСЛОВИЯХ

Абдрахиков А.Р., Шафигуллина Э.М.

МАОУ «Гимназия № 105 им. Н.И. Кузнецова, Уфа, Россия

Целью работы было изучение состава и свойств популярной игрушки – слайма и проверка возможности ее изготовления в домашних условиях. Гипотеза исследования предполагала, что создание функционального аналога слайма в домашних условиях возможно и безопасно. В работе использовались методы анализа информации и практического эксперимента. Теоретическая часть позволила установить, что слайм является неニュтоновской жидкостью, основу его состава составляют вода, загустители и красители. Выявлены потенциальные риски использования игрушки (аллергические реакции) и ее развивающие функции.

Практическая часть включала три эксперимента по созданию слайма:

1. С использованием крахмала и кондиционера – получен материал, похожий на мягкий пластилин.
2. На основе клея ПВА и тетрабората натрия – создан классический эластичный слайм.
3. С применением силикатного клея, зубной пасты и геля для бритья – получен слайм с пузырчатой структурой.

Все эксперименты подтвердили гипотезу исследования и установлено, что создание слаймов в домашних условиях возможно, причем свойства игрушки варьируются в зависимости от состава компонентов. Самодельные слаймы могут быть безопасной альтернативой промышленным образцам при соблюдении рецептуры и правил гигиены.

Перспективы дальнейшего исследования видятся в изучении возможности создания функциональных слаймов с новыми свойствами - например, изменяющих цвет при различной температуре или светящихся в темноте, что потребует более глубокого изучения физико-химических свойств материалов и может стать темой для следующей научной работы.

Работа демонстрирует, что научный эксперимент может быть органично совмещен с игровой деятельностью, что развивает у детей интерес к исследовательской деятельности и понимание связи между составом вещества и его свойствами.

Литература

1. Полозова Е. В. и др. Игрушка «слайм» как объект токсикологического исследования //Международный журнал гуманитарных и естественных наук. – 2022. – №. 7-2. – С. 45-49.

© Абдрахимов А.Р., Шафигуллина Э.М., 2025

УДК 547.781:615.31

ДИЗАЙН И РАЗРАБОТКА НОВЫХ АНАЛОГОВ-АКТИВАТОРОВ АМФ-ПРОТЕИНКИНАЗЫ ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ МЕТАБОЛИЧЕСКИХ ЗАБОЛЕВАНИЙ

Альмухаметов М.Р.¹, Парфенова Л.В.²

¹Татарская гимназия № 84, Уфа, Россия

²Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Метаболические заболевания, связанные с нарушением обмена веществ, широко распространены и включают ожирение, сахарный диабет 2-го типа, остеопороз и метаболический синдром. Статистические данные демонстрируют неблагоприятный тренд: количество пациентов, заболевших диабетом в России увеличилось с 150 тысяч (2000 г.) до 400 тысяч (2023 г.), что составляет почти трехкратный рост за два десятилетия. Это подчеркивает критическую необходимость создания новых лекарственных препаратов.

Аденозин монофосфат-активируемая протеинкиназа (АМФК) является ключевым регулятором клеточного метаболизма. Белок состоит из трех субъединиц (α , β , γ), где α -субъединица содержит киназный домен и активационную петлю, а γ -субъединица функционирует как сенсор соотношения АМФ/АТФ. Известны два механизма активации АМФК: фосфорилирование другими протеинкиназами (например, СaMKK) и аллостерическая активация малыми молекулами. Однако существующие активаторы (метформин, AICAR, фенформин) характеризуются низкой селективностью по отношению к изоформам АМФК, что приводит к нежелательным побочным эффектам, включая кардиотоксичность.

Целью исследования является рациональный дизайн новых селективных активаторов АМФК для лечения метаболических заболеваний. Для достижения цели поставлены следующие задачи: (1) проведение патентного поиска; (2) анализ отношения структура-активность; (3) разработка программных инструментов; (4) генерирование библиотеки соединений путем биоизостерной замены; (5) оценка аффинности к мишени; (6) расчет фармакокинетических параметров; (7) отбор перспективных структур.

В ходе патентного поиска найдено 29 источников с информацией о 250 соединениях и их биологической активности (EC_{50}). Выбран базовый

хемотип – бензамидазолы, для которого определены ключевые позиции замещения (R1 и R2).

Разработана программа для комбинаторной генерации структур на основе биоизостерной замены. В результате создана библиотека структур из ~50 тысяч уникальных соединений.

Создана система MassDock 3.0 для высокопроизводительного молекулярного докинга с помощью доступной программы AutoDock Vina в аллостерическом сайте АМФК. Система позволяет обрабатывать большие библиотеки лигандов, вычислять энергию связывания и сохранять результаты в формате PDBQT и SMILES.

Разработана программа PrimaryAdme для расчета критических параметров: молекулярной массы (MW), липофильности (LogP), топологической площади полярной поверхности (TPSA), количества доноров и акцепторов водородной связи. Эти параметры используются для предварительной оценки вероятности того, что соединение будет перорально активным препаратом согласно критериям Липинского.

В результате комплексного виртуального скрининга отобрано приблизительно 300 соединений-кандидатов, которые демонстрируют благоприятные фармакокинетические свойства и хорошую предсказываемую аффинность к АМФК.

Таким образом, нами отработана методология рационального дизайна новых активаторов АМФК, включая создание специализированных программных инструментов. Полученный набор структур-кандидатов перспективен к дальнейшему химическому синтезу, экспериментальной валидации *in vitro* и углубленной оптимизации с применением 3D-QSAR и молекулярной динамики.

Литература

1. Новикова Д.С., Гарабаджиу А.В., Мелино Дж., Барлев Н.А., Трибулович В.Г. БИОХИМИЯ, 2015, том 80, вып. 2, с. 163-183
2. Росстат: <https://rosstat.gov.ru/storage/mediabank/Zdr2-2.xls>

© Альмухаметов М.Р., Парфенова Л.В., 2025

УДК 577.164.2:543.8:641.1/6

ИЗУЧЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ВИТАМИНА С В РАЗЛИЧНЫХ ФРУКТАХ И ОВОЩАХ И ЕГО ВЛИЯНИЕ НА ОРГАНИЗМ ЧЕЛОВЕКА

Байдулина Э.В.¹, Султанова А.И.²

¹МБОУ ООШ с. Кисак-Каин

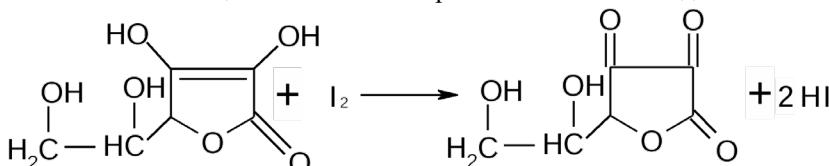
²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия.

Витамин С (аскорбиновая кислота) является одним из самых важных кислородсодержащих биологически активных соединений, необходимых для нормальной жизнедеятельности человека. В современном мире, где многие люди питаются фастфудом и полуфабрикатами, дефицит витамина С становится серьезной проблемой. Особенно это касается

школьников, которые активно растут и развиваются. Витамин С участвует в образовании коллагена, укрепляет иммунную систему, помогает при простудных заболеваниях и даже улучшает настроение. Интересно, что наш организм не может самостоятельно синтезировать этот витамин, поэтому мы должны получать его с пищей каждый день.

Для изучения содержания витамина С в различных продуктах я использовала несколько методов. Основным методом было титрование раствором йода. Этот метод основан на том, что аскорбиновая кислота восстанавливает йод до йодид-ионов. Когда весь витамин С прореагирует, избыточный йод окрашивает крахмал в синий цвет. Таким образом, по объему израсходованного йодного раствора можно рассчитать содержание витамина С в исследуемом образце.

Реакция окисления аскорбиновой кислоты йодом



Для исследования я выбрала наиболее доступные продукты: апельсины, лимоны, яблоки, капусту белокочанную, морковь и сладкий болгарский перец.

По результатам экспериментов было установлено, что наибольшее содержание витамина С наблюдается в сладком болгарском перце – 128 мг на 100 г продукта. На втором месте оказались цитрусовые: апельсины содержат около 60 мг на 100 г, лимоны – 53 мг на 100 г. Капуста белокочанная имеет в своем составе около 45 мг витамина С на 100 г в свежем виде. Яблоки содержат значительно меньше – всего 10 мг на 100 г, а морковь – и того меньше, всего 5 мг на 100 г.

Полученные в ходе исследования данные имеют важное практическое значение для повседневной жизни. Теперь я точно знаю, какие продукты являются лучшими источниками витамина С, и могу рекомендовать их своим друзьям и родственникам.

Проведенное исследование показало, что витамин С – это действительно удивительное соединение, которое играет огромную роль в поддержании здоровья человека. Содержание этого витамина в разных продуктах питания сильно различается, и правильный выбор продуктов может помочь избежать авитаминоза. Исследование подтвердило, что кислородсодержащие биологически активные соединения, такие как витамин С, являются незаменимыми компонентами нашего рациона.

Литература

1. Петров А.В., Смирнова Е.К. Химия витаминов: от теории к практике. – Москва: Академия, 2021. – 212 с.

2. Габриелян О.С. Химия. 9 класс: учебник для общеобразовательных организаций. – Москва: Дрофа, 2023. – 288 с.

© Байдулина Э.В., Султанова А.И., 2025

УДК 543.3

СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ОЦЕНКИ ЖЕСТКОСТИ ВОДЫ

Белоногова В.В.¹, Бакирова Э.Р.², Белоногов Э.В.²

¹ МАОУ СОШ № 9, Бакал, Россия

² Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Качество питьевой воды оказывает значительное влияние на здоровье населения и техническое состояние инженерных коммуникаций. Оценка жёсткости воды является важным этапом при проведении анализов качества воды [1]. Высокое содержание солей кальция и магния ухудшает вкус воды, снижает эффективность моющих средств, способствует образованию накипи в котельных установках и трубах отопления. Существует несколько широко используемых методов оценки жёсткости воды: титриметрический, фотометрический, электрохимический и инверсионно-вольтамперный [2].

Развитие технологий привело к появлению компактных, мобильных устройств для экспресс-анализа жёсткости воды - 1. Электронные портативные приборы: TDS-метры (солемеры); многопараметрические измерители (измеряют не только TDS, но и другие параметры, такие как pH, электропроводность и т.д.); портативные анализаторы/фотометры. 2. Химические экспресс-методы: тест-полоски (реактивные полоски), капельные тест-комплекты (титриметрические тесты). Большинство электронных приборов для экспресс-анализа измеряют электропроводность воды, поскольку растворенные соли, включая соли жесткости (кальций и магний), увеличивают ее способность проводить электрический ток. Химические методы основаны на цветовых реакциях с индикаторами. Эти устройства идеально подходят для быстрого тестирования воды в домашних условиях, аквариумах, бассейнах, а также для контроля работы систем водоподготовки и фильтров [3].

Выбор метода оценки жёсткости воды определяется конкретной ситуацией и имеющимися ресурсами. Наиболее универсальным и точным остается титриметрический метод, однако в ряде случаев предпочтительнее использование фотометрического или электрохимического анализа. Современные мобильные устройства значительно упрощают процедуру мониторинга, обеспечивая оперативность и удобство эксплуатации.

Литература

- Гриффин Дж.Р., Маунтин Д.Э. Методы анализа воды. М.: Мир, 2018. С. 512.
- Сергеев Г.М., Родионова О.В. Современные методы оценки качества воды. СПб.: Лань, 2019. 288 с.
- Шилов П.В., Быстров А.В. Экспресс-методы анализа воды. Саратов: Поволжье, 2022. 160 с.

© Белоногова В.В., Бакирова Э.Р., Белоногов Э.В., 2025

УДК 543.3

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ НИТРАТОВ И НИТРИТОВ В ОВОЩАХ РАСТЕНИЕВОДСТВА

Белоногова В.В.¹, Бакирова Э.Р.², Белоногов Э.В.²

¹ МАОУ СОШ № 9, Бакал, Россия

² Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В современных условиях повышение урожайности сельскохозяйственных культур сопровождается активным применением азотных удобрений, что часто приводит к накоплению нитратов и нитритов в растительной продукции. Эти соединения при поступлении в организм человека могут вызывать нарушения обмена веществ и хронические отравления, поэтому регулярный контроль их содержания в овощах важен для продовольственной безопасности. Целью исследования было определить содержание нитратов в свежих овощах, выращенных в частных хозяйствах города Бакала, и оценить их соответствие санитарным нормам.

Для анализа были выбраны наиболее распространенные овощи: картофель, морковь, помидор, огурец и кабачок. Каждый образец натирали на терке, полученную массу помещали в марлю и отжимали сок. На предметное стекло наносили по одной капле сока, после чего добавляли раствор дифениламина, являющийся качественным реагентом на нитраты. Оценку содержания нитратов проводили визуально по интенсивности окрашивания, сравнивая испытуемый образец с рядом стандартных растворов с концентрациями 150, 300, 750, 1500 и 3000 мг/г. Такой метод прост, нагляден и позволяет быстро определить категорию содержания нитратов без применения сложного оборудования.

Полученные данные показали, что концентрация нитратов в исследованных овощах не превышала предельно допустимых уровней. В частности, в картофеле содержание нитратов составило менее 750 мг/г, в моркови – менее 300 мг/г, в помидоре – менее 150 мг/г, в огурце – менее 750 мг/г, в кабачке – менее 150 мг/г. Такие результаты позволяют сделать вывод о соблюдении норм при выращивании данных культур. Измеренные значения коррелируют с типовыми показателями для овощей, выращенных без избыточного применения азотных удобрений, что указывает на экологическую чистоту продукции.

Таким образом, проведенные исследования подтвердили, что овощи, выращенные в частных хозяйствах города Бакала, содержат безопасное количество нитратов и могут быть рекомендованы к употреблению без риска для здоровья. Представленный метод анализа является доступным, простым в исполнении и может быть использован для экспресс-контроля качества овощей в лабораториях образовательных учреждений.

© Белоногова В.В., Бакирова Э.Р., Белоногов Э.В., 2025

УДК 54.061:547.9:66.081.63

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВОЗОБНОВЛЯЕМОГО СЫРЬЯ ДЛЯ
ПОЛУЧЕНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ,
СОДЕРЖАЩИХ КИСЛОРОД И АЗОТ

Беляева А.А.¹, Имангулова Д.М.²

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²МАОУ «Лицей 1», Уфа, Россия

В работе рассматриваются современные направления и перспективы использования возобновляемого растительного и биотехнологического сырья для синтеза биологически активных соединений, содержащих кислород и азот. Приведены основные подходы к извлечению, модификации и целенаправленному синтезу таких веществ, а также обозначены экологические и технологические преимущества их получения по сравнению с традиционными методами органического синтеза.

Современное развитие химии и биотехнологии ориентировано на поиск устойчивых, экологически безопасных источников сырья для получения соединений, обладающих высокой биологической активностью. Особое значение приобретает использование возобновляемого природного сырья-растительных экстрактов, микробных метаболитов и биополимеров, содержащих кислород- и азотсодержащие фрагменты, такие как гидроксильные, карбоксильные, аминные и амидные группы. Эти соединения служат ценными предшественниками для синтеза лекарственных веществ, ароматизаторов, биокатализаторов и функциональных материалов.

Одним из ключевых направлений является использование растительного сырья- эфирных масел, флавоноидов, алкалоидов и аминокислот природного происхождения. Такие соединения обладают широким спектром физиологической активности: противомикробной, антиоксидантной, противовоспалительной и адаптогенной. Применение мягких экстракционных технологий (сверхкритическая флюидная экстракция, ультразвуковая и микроволновая обработка) позволяет получать вещества высокой чистоты без разрушения активных центров молекул.

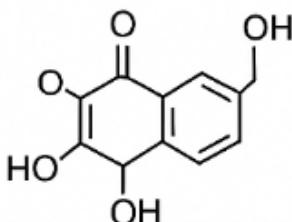


Рис.1. Флавоноиды.

Не менее перспективным направлением является биотехнологический синтез, основанный на использовании микроорганизмов и ферментов для модификации природных субстратов. Биокатализитические процессы обеспечивают высокую стереоселективность и мягкие условия проведения реакций, что снижает энергетические затраты и уменьшает количество токсичных отходов. В частности, микробиологическая трансформация аминокислот и сахаров позволяет получать новые производные с улучшенными фармакологическими свойствами.

Особое внимание уделяется разработке «зелёных» химических технологий, основанных на принципах устойчивого развития. К ним относятся использование водных и ионных растворителей, катализаторов на основе природных минералов, а также применение возобновляемых источников энергии. Такие подходы не только повышают экологическую безопасность, но и способствуют снижению себестоимости продукции.

Однако сохраняются проблемы, связанные с вариабельностью состава природного сырья, сложностью масштабирования биотехнологических процессов и необходимостью стандартизации получаемых соединений. Решение этих задач требует интеграции знаний органической химии, биотехнологии и аналитической химии.

Литература

1. Скурихин И. М., Тутельян В. А. Химический состав российских пищевых продуктов: справочник. – М.: ДeЛи Принт, 2020. – 432 с.
2. Егоров А. М., Зубов В. П. Биотехнология. Основы и приложения. – М.: Академкнига, 2018. – 512.

© Беляева А.А., Имангулова Д.М., 2025

УДК 542.06

ПУТЬ К СОЗДАНИЮ КРОВООСТАНАВЛИВАЮЩЕГО СРЕДСТВА
ИЗ МИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ

Валиуллина Э.А., Струков Д.А., Зайнуллина Л.Ф.

*Муниципальное автономное образовательное учреждение «Лицей №5»
городского округа город Уфа Республики Башкортостан*

Научный руководитель: Э.Т. Ямансарова

Одной из важных проблем в медицине является остановка кровотечений. В последнее время решением данной задачи стали местные гемостатические средства, так как они действуют направленно и могут быть использованы как при повреждении крупных сосудов, так и при диффузном кровотечении. За счет контакта с жидкостным компонентом крови твердое вещество губки превращается в коллоидную массу, КМЦ проникает в капилляры, и кровотечение останавливается. Имеются предположения о механизме гемостаза с участием КМЦ [1].

В данной работе рассмотрено получение модифицированного полисахарида (фосфорилированной смеси на основе целлюлозы) и изучение его сорбционной способности по отношению к водорастворимым белкам, исследовалась возможность его применения в качестве кровоостанавливающего средства.

В ходе данной работы была разработана и реализована методика получения фосфорилированной целлюлозы на основе микрокристаллической целлюлозы (МКЦ) с использованием фосфорилирующей смеси, включающей натрий фосфорнокислый и карбамид, в различных соотношениях (1:2:2, 1:2:4, 1:4:2). Полученные образцы сорбентов были протестированы на способность адсорбировать яичный альбумин методом биуретовой реакции с последующим фотоколориметрическим анализом при $\lambda = 540$ нм. Установлено, что наибольшую адсорбционную способность (до 49 мг/г) и эффективность (88,2 %) проявляет сорбент, полученный при соотношении компонентов 1:2:4 (МКЦ: NaH_2PO_4 : карбамид), что свидетельствует о перспективности его использования в качестве основы для создания кровоостанавливающих средств.

Результаты подтверждают гипотезу о возможности повышения гемостатической активности целлюлозных материалов за счёт фосфорилирования, что открывает путь к разработке биосовместимых, биоразлагаемых и высокоэффективных аппликационных гемостатиков.

Литература

1. Сопромадзе С.Ш., Липатов В.А. Перспективы разработки и применения гемостатических губок на основе рыбного коллагена // С.Ш. Сопромадзе, В.А. Липатов – научный электронный журнал INNOVA. – № 3(20)-2020 – С.42-47

© Валиуллина Э.А., Струков Д.А., Зайнуллина Л.Ф.,
Ямансарова Э.Т., 2025

УДК 543.3

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КАЧЕСТВА ПИТЬЕВОЙ ВОДЫ В ПОСЕЛКЕ УК
АШИНСКОГО РАЙОНА ЧЕЛЯБИНСКОЙ ОБЛАСТИ

Волкова А.А.¹, Волкова А.А.², Сорокина В.Р.²

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²МБОУ «ООШ» поселка Ук, Аша, Россия

Актуальность мониторинга качества воды в системе водоснабжения посёлка Ук обусловлена строгими требованиями СанПиН 1.2.3685-21 к составу питьевой воды. Отсутствие актуальных данных о концентрации HCO_3^- затрудняет оценку соответствия воды санитарно-гигиеническим нормативам и создаёт потенциальные риски для здоровья населения. Регулярный контроль данного показателя критически важен для профилактики заболеваний, связанных с нарушением минерального баланса, и обеспечения безопасности водопользования.

В процессе исследования мы оценивали качество питьевой воды посёлка Ук и провели количественное определение содержания гидрокарбонат-ионов. Пробы взяли из 3 источников на территории посёлка Ук. Количественное определение содержания гидрокарбонат-ионов проводилось с использованием метода кондуктометрического титрования, при этом точка эквивалентности фиксировалась по точке перелома.

Таблица 1

Результаты физико-химических показателей исследуемой воды

| Показатели | Скважина (ул.Ленина) | Колодец (ул.Ленина) | Родник Кировский |
|--------------------------------------|-------------------------|------------------------|---------------------|
| Прозрачность | + | + | + |
| Определение цвета воды | нет | нет | нет |
| Определение запаха воды | нет | нет | нет |
| Определение РН-фактора воды | 8 | 7 | 8 |
| Наличие в воде органических примесей | нет | нет | нет |
| Проверка воды на наличие масел | нет | нет | нет |
| Содержание гидрокарбонатов, мг/л | 737 | 670 | 1074 |

Физико-химические показатели воды из всех источников соответствуют норме, хотя в воде в колодце на ул. Ленина, были выявлены очень слабые следы органических примесей.

Вода во всех источниках прозрачная. Цветность воды во всех источниках отсутствует, что является хорошим показателем. Оценивание по шкале 1 балл.

Запах. Показатели запаха у воды соответствуют норме, т.е. запах отсутствует - 1 балл. Запах отсутствовал даже у воды, анализ которой мы провели дополнительно, хотя она простояла в пластиковых емкостях с июня прошлого года.

Содержание гидрокарбонатов в источниках считается выше рекомендуемой нормы (норма составляет 200-600 мг/л), что может негативно сказаться на качестве питьевой воды и привести к образованию накипи в системах водоснабжения. Это знак того, что необходимо провести дополнительные исследования и, возможно, принять меры по снижению данного показателя.

Литература

1. <http://standartgost.ru/> ГОСТ Р 54316-2011 Воды минеральные природные питьевые. Дата добавления в базу: 01.09.2013 г.
2. Санитарно-эпидемиологические правила и нормативы СанПиН 2.1.4.1116-02 (с изменениями от 25 февраля 2010 г., 28 июня 2010 г.)
3. Павлов Н.Н., Фролов В.И. Практикум по общей и неорганической химии. – Москва «Дрофа», 2002. – 265 с.

© Волкова А.А., Волкова А.А., Сорокина В.Р., 2025

УДК: 542.61:546,72:542

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ КОФЕИНА И ТАУРИНА В ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ НАПИТКАХ МЕТОДОМ УФ-СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ

Гайнуллина С.А.¹, Осипова К.К.²

Муниципальное автономное общеобразовательное учреждение

«Лицей № 160 имени Нагаева Мугина Каримовича»

¹ученица 10 В класса Лицея № 160

²учитель проектной деятельности Лицея № 160

Энергетические напитки, вопреки своему названию, не «вливают» в организм новую энергию. У них небольшая калорийность и относительно низкое содержание сахара. Своим действием эти продукты обязаны компонентам, которые заставляют организм расходовать внутренние энергетические ресурсы в ускоренном темпе. В результате, выпив 1-2 банки энергетика, мы чувствуем, как проходит ощущение усталости и появляется жажда активности. Однако этот эффект длится недолго – от 3 до 5 часов. Потом же, как правило, чувствуется еще больший упадок сил

и физическое истощение. Это вновь объясняется тем, что организм исчерпал свои ресурсы и нуждается в отдыхе для восстановления. Какие же компоненты заставляют организм открыть «второе дыхание»? Ключевую роль в составе энергетических напитков играет кофеин, который стимулирует умственную деятельность. Таурин – второй компонент, встречающийся в подавляющем большинстве энергетических напитков. Это аминокислота, которая накапливается в мышечных тканях и временно улучшает работу сердечной мышцы. Каждый из этих компонентов имеет свою предельно допустимую концентрацию (ПДК) согласно ГОСТу 52844-2007. Если их содержание завышено, то это может вызвать ряд неблагоприятных последствий для здоровья, особенно подростков. В связи с этим, в данной работе была разработана экспресс-методика для определения содержания кофеина и таурина УФ-спектрофотометрическим методом. В качестве исследуемых образцов были исследованы 10 энергетических напитков различных (Red Bull, Monster, Adrenaline Rush и др.). Методика заключается в снятии кривых светопоглощения всех исследуемых напитков, нахождения максимума поглощения для кофеина и таурина. Таурин имеет максимум поглощения при 620-6500 нм, кофеин при 273 нм. УФ-спектрофотометрия позволяет идентифицировать кофеин и таурин и определить их концентрацию.

Данная разработанная методика имеет ряд преимуществ: экспресс-анализ энергетиков (быстрота), простота метода, дешевизна.

В ходе анализа было установлено, что из 10 исследуемых образцов – заявленный состав на банке 5 образцов соответствует установленному содержанию кофеина и таурина, а в остальных 5 – содержание кофеина и таурина превышает показатели, утвержденных в ГОСТ.

Таким образом, очевиден вывод, что никакой «дополнительной энергии» такие напитки в себе не содержат, а лишь черпают запасы из нашего организма, тем самым истощая его. Об этом важно помнить молодым людям, которые нередко прибегают к такому своеобразному «допингу» с целью повышения работоспособности в период экзаменов, а также для ощущения бодрости.

© Гайнуллина С.А., Осипова К.К., 2025

УДК 542.61:546,72:542

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ЖЕЛЕЗА В ДЕТСКИХ СОКАХ
МЕТОДОМ ТОНКОСЛОЙНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Гайнуллина С.А.¹, Мусагитова Г.Х.²

*Муниципальное автономное общеобразовательное учреждение
«Лицей № 160 имени Нагаева Мугина Каримовича»*

¹ ученица 10 В класса Лицея № 160

² учитель химии Лицея № 160

Железо отвечает за многие процессы, среди главных – доставка кислорода к органам, регулировка дыхания, метаболизм. Организм не вырабатывает железо самостоятельно, человек получает 1-2 мг этого элемента вместе с пищей. Железо помогает поддерживать многие важные функции организма, влияя на уровень жизненной энергии, концентрацию внимания, желудочно-кишечные процессы, иммунную систему и регуляцию температуры тела. Его недостаток или избыток моментально сказывается на самочувствии. Недостаточное количество железа в рационе может повлиять на эффективность, с которой организм использует энергию. Железо играет важную роль в умственной и физической активности. Низкий уровень этого элемента может привести к проблемам с концентрацией внимания, раздражительности и снижению выносливости.

Рекомендуемая суточная норма потребления железа зависит от возраста, пола, образа жизни и состояния здоровья. Дети нуждаются в большем количестве железа, чем взрослые: в период роста и формирования организма любые полезные вещества расходуются гораздо быстрее. При недостатке железа в организме возникает – железодефицитная анемия. Железодефицитная анемия – это состояние, при котором снижается содержание железа в сыворотке крови, костном мозге. А нехватка железа, в свою очередь, приводит к нарушению образования гемоглобина и эритроцитов. На сегодняшний день в России проблема заболеваемости анемией является актуальной задачей.

Таким образом, цель данного проекта заключалась в определении содержания микроэлемента железа в детских яблочных соках разных марок методом тонкослойной хроматографии. В качестве исследуемых объектов выступали следующие марки соков, указанные на слайде.

Хроматографическая камера (стакан с крышкой); 2. Карандаш и линейка; 3. силуфоловые пластины (Sorbfil); 4. пипетка; 5. стеклянные капилляры – по числу соков. Реактивы: 1. Проявитель – 10 % водный раствор гексацианоферрата (II) калия; 2. Контрольный раствор – 3 % раствор хлорида железа (III); 3. Элюент – этанол: соляная кислота (1:4).

На пластины мы наносили образцы исследуемых соков, далее опускали их в камеры с растворителем на 20 минут. Затем пластины вынимали и сушили.

После этого мы на пластину наносили специальным пульверизатором проявитель. В месте обработки проявителем на поверхности пластины с контролем, образовывались синее пятна, что свидетельствует о наличии железа. Эту процедуру повторяли для каждого исследуемого сока.

Установлено, что в яблочном соке всех предложенных марок, а также в свежевыжатом соке присутствует железо. Менее интенсивное окрашивание пластин наблюдалось при исследовании соков «Дары Кубани». Более интенсивно при нанесении проявителя окрасилась пластина с нанесенными на нее каплями остальных трех образцов (пятен большое количество). Определено, что на пластине с образцом №1 образовались пятна синего цвета в большом количестве, причём они появились и выше стартовой линии.

© Гайнуллина С.А., Мусагитова Г.Х., 2025

УДК 54

ЭКОЛОГИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ ГЛАЗАМИ ШКОЛЬНИКОВ:
ВЛИЯНИЕ БЫТОВЫХ ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ НА
ОКРУЖАЮЩУЮ СРЕДУ

Галимов Д.А.¹, Зарипова Е.Р.², Шуршина А.С.¹

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Муниципальное автономное общеобразовательное учреждение
Школа № 147

Сегодня мы часто используем бытовую химию: моющие средства, порошки, напитки с кофеином и косметику. Эти вещества попадают в сточные воды, а затем в природу, где могут быть опасны для растений и микроорганизмов. Понимание того, как бытовая химия влияет на живые организмы, важно для воспитания экологической культуры у школьников и осознания реального воздействия человека на окружающую среду.

Цель нашей работы – изучить влияние кофеина на рост растений.

Задачи:

- 1) Изучить литературные данные о распространении кофеина в природе.
- 2) Провести лабораторный опыт по воздействию растворов кофеина различной концентрации на рост семян фасоли.
- 3) Сравнить показатели прорастания, длины побегов и общего состояния растений.
- 4) Сделать выводы о потенциальной опасности кофеина для окружающей среды.

Методы: анализ литературы, лабораторный эксперимент, наблюдение за ростом растений, измерение их параметров и статистическую обработку данных.

В результате эксперимента выяснили, что низкие концентрации кофеина (0,01%) стимулируют рост семян, но при повышении концентрации (0,05-0,10%) рост замедляется, а всхожесть снижается. Это говорит о том, что накопление кофеина в воде или почве может нарушить естественные процессы роста растений и микробиоты.

Таким образом, кофеин – биологически активное вещество, которое влияет на рост и развитие растений. Если он попадает в природу, это может нарушить баланс в экосистемах. Поэтому важно ограничивать сброс кофеинсодержащих отходов и разрабатывать методы очистки сточных вод.

Литература

1. Рябов А.А., Морозов В.Г. Биохимия природных ксенобиотиков. – СПб.: Изд-во СПбГУ, 2019. – 185 с.
2. Чурсин А.П. Экологическая химия: Учебное пособие. – М.: Академкнига, 2022. – 240 с.

© Галимов Д.А., Зарипова Е.Р., Шуршина А.С., 2025

УДК 372.8

ОРГАНОЛЕПТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА КАЧЕСТВА МУКИ

Ганиев И.Д.², Тухватшин В.С.¹, Нагуманова М.А.²

¹Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

²Гимназия № 102, г. Уфа, Россия

«Хлеб всему голова!» - так гласит старинная русская пословица. И действительно хлеб является неотъемлемой частью ежедневного пищевого рациона каждого человека.

Основным сырьем для хлебопечения служит пшеничная мука, получаемая из зерна пшеницы [1]. Вкусовые качества хлебобулочных изделий напрямую зависят от качества муки. В продуктовых магазинах города Уфы представлен широкий ассортимент муки различных производителей, которые борются за потребителя. На упаковке с товаром всегда указывается состав, соответствие ГОСТУ, и сорт муки. В работе проведено изучение качества муки некоторых производителей, представленных в магазинах Уфы, утверждающие, что именно их товар является самым лучшим и соответствует всем требованиям.

Объект: мука пшеничная.

Цель проекта: Изучение органолептических свойств (вкус, цвет, запах и т.д.) хлебопекарной муки.

Для работы были использованы следующие образцы муки: «Крупяной Двор», (г. Уфа), «СИТНО», АО «Магнитогорский комбинат

хлебопродуктов» (г. Магнитогорск), «Увелка», АО КХП «Злак» (Челябинская область, Увельский район), «МАКФА», АО «МАКФА» (г. Москва).

Выводы по работе

1. Все образцы муки обладают соответствующими органолептическими свойствами;
2. Все заявленные сорта соответствуют своей сортности;
3. Мука «СИТНО» и «МАКФА» содержит повышенное количество влаги;
4. Минеральные примеси отсутствуют.

Литература

1. Гинзбург А.С. Основы теории и техники сушки пищевых продуктов. М: Пищевая промышленность, 1973, 528 с.

© Ганиев И.Д., Тухватшин В.С., Нагуманова М.А., 2025

УДК 615.322

ОПРЕДЕЛЕНИЕ АКТИВНОСТИ ФЕРМЕНТА ГЛЮКОЗООКСИДАЗЫ В ПОДСОЛНЕЧНИКОВОМ МЕДЕ

Гаянова А.А.¹, Габдуллина Э.Э.², Канчурина М.М.¹

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²МОБУ СОШ д. Шамонино, Уфимский район РБ, Россия

Мед является источником не только углеводов, витаминов, белков и микроэлементов, но и ферментов. Одним из практически важным из них является глюкозооксидаза, вырабатываемая гипофарингеальными железами медоносной пчелы. Она участвует в процессе окисления глюкозы кислородом до глюконовой кислоты, которая способствует усвоению кальция в организме человека, и пероксида водорода, придающая меду антимикробные свойства. Поэтому присутствие в меде фермента глюкозооксидазы является одним из важных показателей его качества.

Всего в исследовании участвовало 9 образцов подсолнечникового меда из различных природно-сельскохозяйственных зон Республики Башкортостан. Используя спектрофотометрическим метод [1] определили активность фермента глюкозооксидазы (см. табл. 1). Во всех образцах подсолнечникового меда присутствует фермент глюкозооксидаза и его активность варьирует в диапазоне от 67,13 до 111,10 мкг H₂O₂/ч·г меда. Следовательно, все образцы меда являются натуральными.

Таблица 1

Активность фермента глюкозооксидазы в подсолнечниковом меде

| № | Шифр образца меда | Активность фермента глюкозооксидазы, мкг H ₂ O ₂ /ч·г меда |
|---|-------------------|--|
| 1 | 1 ПМ | 75,21 |
| 2 | 2 ПМ | 67,13 |
| 3 | 3 ПМ | 79,31 |
| 4 | 4 ПМ | 82,22 |
| 5 | 5 ПМ | 111,10 |
| 6 | 6 ПМ | 77,59 |
| 7 | 7 ПМ | 83,77 |
| 8 | 8 ПМ | 78,48 |
| 9 | 9 ПМ | 85,02 |

Литература

1. I. Flanjak, I. Strelec, D. Kenjerić, L. Primorac. Croatian produced unifloral honeys characterised according to the protein and proline content and enzyme activities. // J. Apic. Sci. 2016. Vol. 60, No. 1. P. 39-48.

© Гаянова А.А., Габдуллина Э.Э., Канчурина М.М., 2025

УДК 546.41-43:546.222:546.226:53.091

КОМПОЗИТ ДЛЯ АККУМУЛЯТОРОВ
НА ОСНОВЕ ПОЛИАНИЛИНА И СЕРЫ

Жигалова Е.А.¹, Фомин А.А.²

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Лицей № 5, Уфа, Россия

Электроактивные полимерные материалы на основе полианилина и наноразмерной серы востребованы для создания литий-серных аккумуляторов. Существующие методы получения таких композитов имеют существенные недостатки: механическое смешение приводит к низкой взаимосвязи компонентов, а многоэтапные синтезы требуют длительной вакуумной сушки и numerous операций выделения промежуточных соединений, что повышает себестоимость и снижает технологичность.

Разработан упрощенный способ получения композита, где частицы наноразмерной серы образуются непосредственно в реакционной смеси. Суть метода: в солянокислый раствор анилина добавляют полисульфиды кальция или лития при мольном соотношении частиц серы и анилина 1:1-10, перемешивают 30 минут, медленно добавляют солянокислый раствор персульфата аммония, выдерживают 24 часа при комнатной температуре для полимеризации, фильтруют осадок и сушат при 40°C в течение 3 часов. Выход продукта составляет 85-95%.

Предложенный способ позволяет упростить процесс синтеза за счет образования наноразмерной серы, что исключает этапы выделения и сушки промежуточных соединений. Сокращено время сушки с 24 до 3 часов. Получаемый композит обладает улучшенными характеристиками для применения в качестве катодного материала в Li-S аккумуляторах. Критически важно соблюдение мольного соотношения 1:1-10: при его нарушении ухудшаются физико-химические свойства материала. Способ обеспечивает высокий выход продукта и технологичность для промышленного производства

Литература

1. Массалимов И.А., Ахметшин Б.С., Мустафакулов Ш.С., Массалимов Б.И., Мустафин А.Г. Синтез наночастиц сульфата кальция с использованием полисульфида кальция // Бутлеровские сообщения. 2025. Т. 82. № 4. С. 24-35
2. Массалимов И.А., Самсонов М.Р., Ахметшин Б.С., Мустафин А.Г., Буркитбаев М.М., Шалабаев Ж.С., Уракаев Ф.Х. Совместное осаждение из растворов полисульфидов нанокомпозитов на основе коллоидных частиц серы и карбонатов щелочноземельных металлов // Коллоидный журнал. 2018. Т. 80. № 4. С. 424-434.

© Жигалова Е.А., Фомин А.А., 2025

УДК 663.97

ОБНАРУЖЕНИЕ АЛЬДЕГИДОВ В РАСТВОРЕ ТАБАЧНОГО ДЫМА

Зайнуллина Л.Ф., Шалыгин А.А., Валеева К.Р.

МАОУ Лицей № 5 ГО, г. Уфа

Актуальность и новизна темы исследования. Статистика показывает, что сейчас около 33% подростков России в возрасте 11-17 лет курят регулярно или иногда, причем число курящих электронные сигареты особенно высоко среди подростков 16-17 лет – до 45%. Среди 15-17-летних курит каждый второй мальчик и каждая четвертая девочка-подросток. Поскольку привычки развиваются с детства, именно в подростковом возрасте необходимо заложить установку на негативное восприятие вредной привычки и полностью отказаться от ее применения в будущем.

Цель исследования: выяснить, содержит ли табачный раствор и раствор из фильтра альдегиды, которые являются одними из опасных компонентов табачного дыма.

Оборудование: пробирки, табачный раствор, растворы из фильтра, раствор $KMnO_4$.

Ход исследования.

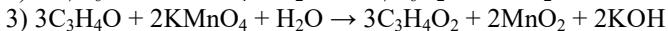
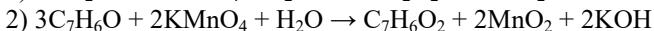
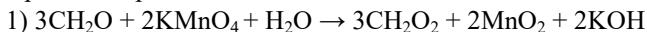
1. В пробирки добавляем по 2 мл раствора табачного дыма и раствор из фильтра.

2. Добавили в каждую пробирку по 5 капель 5% - ного раствора KMnO_4 , слегка встряхнули пробирки.

Вывод: Раствор KMnO_4 обесцвеклся в пробирке с фильтром, в результате реакции выпал бурый осадок MnO_2 .

В табачном дыме содержатся восстановители, обладающие высокой токсичностью и раздражающим действием. Это - бензальдегид, формальдегид, акролеин. При взаимодействии этих веществ с раствором KMnO_4 в нейтральной среде выпадает бурый осадок MnO_2 из-за восстановления KMnO_4 веществами, содержащимися в табачном дыме. Количество вредных веществ, в растворе табачного дыма от сигареты с фильтром меньше. Часть вредных веществ задерживается фильтром сигареты.

Уравнения реакций.



© Зайнуллина Л.Ф., Шалыгин А.А., Валеева К.Р., 2025

УДК 678

О ВОЗМОЖНОСТИ СОВМЕСТНОЙ ВТОРИЧНОЙ ПЕРЕРАБОТКИ ОТХОДОВ БАХИЛ И ПЛАСТИКОВЫХ СТАКАНЧИКОВ

Захарина А.Е., Хасанова Р.Ф.

ЧОУ ЦО «Новошкола», Уфа, Россия

Во многих школах нашей страны для сохранения чистоты помещений посетители обязаны использовать пластиковые бахилы. Также в школах устанавливаются кулеры для воды,тарой являются пластиковые стаканчики. Таким образом, масса отходов изделий из пластмасс в одной среднестатистической школе может составлять от нескольких десятков килограмм до нескольких сотен килограмм в месяц. Одним из вариантов утилизации подобных отходов, является ликвидация путем сжигания. такой способ утилизации с одной стороны предусматривает выработку энергии, но, с другой стороны является источником загрязнения атмосферного воздуха продуктами полного и неполного сгорания материалов. В связи с этим, разработка доступных методов утилизации пластиковых отходов, образующихся в школах и других организациях, не предусматривающих загрязнение окружающей среды, является актуальной задачей.

Известно, что бахилы производят из двух видов полиэтилена: полиэтилена высокого давления (ПВД), который характеризуется

высокой эластичностью, но небольшой прочностью и используется для производства одноразовых бахил недолговременного использования, и полиэтилен низкого давления (ПНД), более жесткий и прочный, чем ПВД. Такие бахилы выдерживают длительную носку. Пластиковые стаканчики, допустимые к использованию в школах, производят из полипропилена (ПП). Все виды данных полимеров относятся к термопластам и могут быть подвергнуты совместной переработке. В данной работе предложен метод совместной переработки бахил из ПНД и пластиковых стаканчиков из ПП, состоящий из следующих основных операций: удаление резинок у бахил; отмывка бахил сначала раствором моющего средства, затем теплой водой; сушка бахил и пластиковых стаканчиков до постоянной массы при температуре 70 °С; совместное измельчение пластиковых стаканчиков и бахил с помощью роторной ножевой мельницы РМ-120; получение материала методом прессования согласно ГОСТ 12019 на гидравлическом прессе «Auto MH-NE (Carver)» (США) при 210°С и выдержке под давлением 7000 кгс в течение 3 мин. Установлено, что при массовом соотношении бахилы: стаканчики не более 30:70 % полученные вторичные материалы не уступают индивидуальному первичному ПП по прочностным характеристикам и могут быть использованы в производстве пластиковых изделий технического назначения

© Захарина А.Е., Хасанова Р.Ф., 2025

УДК 372

85 ЛЕТ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ
КУДАШЕВОЙ ФЛОРИДЫ ХУСАИНОВНЫ

Ильясова С.Р.¹, Ильясова Р.Р.², Никитина В.А.²

¹МБОУ «Школа № 27 с углубленным изучением отдельных предметов»

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Многие российские ученые внесли огромный вклад в развитие мировой химической науки и являются гордостью Российской науки. Среди известных российских ученых – химиков много женщин. При этом особую роль всегда играли региональные ученые России, внесшие большой вклад в фундаментальные научные открытия и прикладные химические исследования. Одним из таких известных ученых, работавших на базе Башкирского государственного университета является Флорида Хусаиновна Кудашева, которой в 2025 году исполнилось бы 85 лет.

Ф.Х. Кудашева родилась в семье известных башкирских артистов 22 сентября 1940 года. После окончания школы с серебряной медалью поступила на химический факультет Башкирского государственного университета. После окончания специалитета университета стала первой аспиранткой кафедры физической химии и химической экологии.

Кандидатскую диссертацию защитила по теме «Хроматографическое определение некоторых серосодержащих соединений в воздухе» под руководством известного ученого – химика Айвазова Б.В. Позже Кудашева Ф.Х. защитила докторскую диссертацию по теме «Физико-химические закономерности получения углеродных волокон из нефтяного сырья».

На химическом факультете БашГУ Флорида Хусаиновна прошла достойный путь от ассистента кафедры до зав. кафедрой аналитической химии. Работала также деканом химического факультета 1979 по 1986 годы.

Флорида Хусаиновна посвятила свою жизнь химической науке, ей написано большое количество научных статей, учебных пособий по нефтехимии, хроматографии, анализу объектов окружающей среды. Она много времени посвятила подготовку новых научных и учебных кадров, для отечественной науки подготовила большое количество профессиональных химиков - кандидатов и докторов наук. Многие годы Кудашева Ф.Х. организовывала олимпиады школьников различного уровня, в том числе Всероссийские.

Флорида Хусаиновна воспитала прекрасных детей: дочь - кандидат химических наук, работает в Канаде; сын - кандидат медицинских наук, известный кардиохирург, работает в России.

Коллеги и ученики помнят Флориду Хусаиновну за ее преданность делу, благодарны ей за то, что она передавала знания, за то, что смогла «зажечь» многих своих учеников любовью к химии.

© Ильясова С.Р., Ильясова Р.Р., Никитина В.А., 2025

УДК 678.05

ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА И ОКСИДА КРЕМНИЯ

Калеева В.В.¹, Иванова Д.Р.², Гирфанова Г.З.²

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²МБОУ СОШ № 5, р.п. Чишмы, Россия

Полипропилен (ПП) является одним из наиболее широко используемых термопластов из-за своих хорошо сбалансированных механических свойств, низкой стоимости, и высокой химической стойкости. На сегодняшний день значительное внимание уделяется использованию кремнезема для повышения механических характеристик полиолефинов, включая полипропилен. В связи с этим целью данной работы является исследование влияния ультрадисперсного диоксида кремния на перерабатываемость и эксплуатационные свойства полимерных композиционных материалов (ПКМ) на основе ПП.

Получение ПКМ на основе ПП и ультрадисперсного диоксида кремния осуществляли в расплаве на лабораторной станции (пластограф)

"PlastographEC" (Brabender, Германия) в течение 15 мин при нагрузке 200 Н при температуре 180 °С с последующим прессованием на автоматическом гидравлическом прессе "AutoMH-NE" (Carver, США) при 210 °С и выдержке под давлением 7000 кгс в течение 3 мин. Физико-механические свойства ПКМ при разрыве определяли согласно ГОСТ 11262-80 на разрывной машине "Shimadzu AGS-X" (Shimadzu, Япония) при температуре 20 °С и скорости движения подвижного захвата разрывной машины 1 мм/мин. Показатель текучести расплава (ПТР) определили при условиях, регламентируемых ГОСТ 11645–73 на приборе ИИРТ-М.

Основной характеристикой при промышленном производстве ПКМ является параметр перерабатываемости сырья [1]. При увеличении содержания оксида кремния в ПКМ происходит увеличение максимального крутящего момента при вращении роторов в камере смешения пластографа по сравнению со значением максимального крутящего момента ПП без наполнителя, а следовательно, и к некоторому усложнению переработки композиционного материала. При анализе реологических свойств методом относительной реометрии (определение ПТР) полученных композитов (рис. 1) было выявлено, что повышение содержания оксида кремния в составе приводит к заметному снижению показателя текучести расплава, что обусловлено ростом доли нетекущего компонента в системе. Как показали физико-механические исследования, наполнение ПП оксидом кремния приводит к росту модуля упругости композита. Эти изменения можно объяснить не только взаимодействием между отдельными макромолекулами и поверхностью частиц, но и влиянием надмолекулярных структурных образований, свойства которых изменяются под действием наполнителя.

Таким образом, особенности наполненного композита позволяют использовать полученные ПКМ по традиционным основным технологическим способам, которые рекомендуются для переработки в изделия. Однако, факт уменьшения ПТР однозначно свидетельствует об усложнении процесса переработки композиционного материала, что должно быть учтено при составлении технологической карты производства.

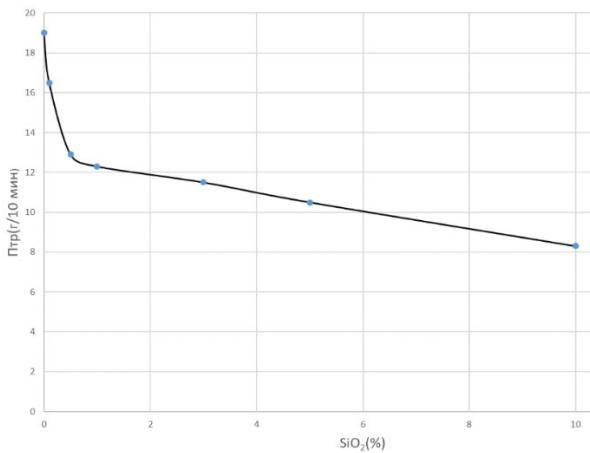


Рис. 1. Зависимость ПТР композитов на основе ПП и оксида кремния от содержания неорганической добавки в композиции.

Литература

1. Salikhov R.B., Bazunova M.V., Bazunova A.A., Salikhov T.R., Zakharov V.P. Study of thermal properties of biodegradable composite materials based on recycled polypropylene. Letters on Materials, 2018, 8(4), с. 485–488.

© Калеева В.В., Иванова Д.Р., Гирфанова Г.З., 2025

УДК 541.14:547.551.2

СИНТЕЗ ОРТО- И ПАРА-НИТРОФЕНОЛОВ В ШКОЛЬНОЙ ЛАБОРАТОРИИ

Коковихина П.А., Соловьева Е.А.

Муниципальное Автономное Общеобразовательное Учреждение
Гимназия 17, Белорецк, Россия

Возрастающее количество и качество представляемых на конкурсы проектных работ требует от участника все более творческого подхода к выбору изучаемых тем. В химии этот вопрос стоит особенно остро, так как наполняемость реактивами школьных лабораторий основывается на простом и безопасном синтезе. Отсутствие реагентов не позволяет разнообразить исследовательскую работу. Автором предпринята попытка синтезировать нитрофенолы, которые могут быть использованы в качестве кислотно-основных индикаторов при выполнении научно-исследовательских работ.

При всей востребованности нитрофенолов, вызывает удивление тот факт, что за последние десятилетия практически не появлялись новые методы получения этих веществ. Именно кажущаяся простота и легкость процесса прямого нитрования фенолов стали, по-видимому, главным

тормозом разработки новых методов синтеза нитрофенолов: зачем искать новые методы, когда обычная процедура так проста? Однако в простом методе нитрования фенолов, одновременно кроется главная трудность получения нитрофенола заданного строения. При выполнении работы автор рассмотрел несколько существующих методов. Кронхейм получал орто-изомеры нитрофенолов, нитрируя фенолы с занятым пара - положением азотистой кислотой в присутствии солей меди. Баудиши разработал метод окислительного нитрования аренов. По этой реакции нитро группа и гидроксо группа вводятся в орто-положение друг к другу при действии гидрохлорида гидроксиламина и пероксида водорода в присутствии солей меди на бензол и его производные. Георгий Анатольевич Субоч и Евгений Юрьевич Беляев разработали способ получения 4-нитрофенола окислением 4-нитрозофенола перекисью водорода в щелочной среде. Для своей работы автор выбрал прямой синтез нитрофенолов, позволяющий разделить орто- и пара-производные в школьной лаборатории. Для разделения изомеров использовался метод выпаривания, так как о-нитрофенол летуч с водяным паром, в отличие от п-нитрофенола.

Практическая значимость заключается в возможности синтеза в школьной лаборатории нитрофенолов, которые будут использованы как кислотно-основные индикаторы с зоной перехода в области рН-5,4–7,0 для аналитических работ. Вклад автора заключается в проведении синтеза, анализе результатов.

Метод прямого синтеза и разделения нитрофенолов доступен для осуществления в школьной лаборатории. Полученные вещества позволяют использовать их как кислотно-основные индикаторы.

Литература

1. Носова Э. В. Химия гетероциклических биологически активных веществ / Э. В. Носова // Учебное пособие. – Екатеринбург, 2014. – С. 194-197с.
2. Богданова, А. Г. Экстракционно-сорбционное извлечение фенола и п-нитрофенола из водных сред с применением пенополиуретана / Н. В. Складнева, С. П. Калинкина, П. Т. Суханов, Я. И. Коренман // Проблемы теоретической и экспериментальной химии: тезисы докладов XVII Российской молодежной научной конференции (Екатеринбург, 17-20 апреля 2007 г.). Екатеринбург, 2007. С. 58-59.
3. Кнуянц, И.Л. Химическая энциклопедия / И.Л. Кнуянц и др. // Советская энциклопедия / ред. И.Л. Кнуянц. М., 2002. Т. 3. С. 542-549.
4. Никольский, Б. П. Справочник химика / Б.П. Никольский и др. // ред. Б.П. Никольский. Л., Химия, 2008. Т. 2. С. 756-768.
5. Несмеянов, А. Н. Начала органической химии / Н.А. Несмеянов // В 2-х томах. М.: «Химия», 1970. Т. 2. С. 135-138.

6. Бартон, Д. Общая органическая химия /Д. Бартон // ред. Д. Бартон. М.: «Химия», 1982. Т. 3. С. 245-248.
7. Орлова, Е. Ю. Химия и технология близантных взрывчатых веществ / Е.Ю. Орлова. Изд. второе, перер. и доп. Л.: «Химия», 2005. С.138-142.
8. Малыхин Е.В. Способ получения алкиловых эфиров о- или п-нитрофенолов / Т.Н. Василевская, В.Д. Штейнгарц // Патент РФ. 1997.

© Коковихина П.А., Соловьева Е.А., 2025

УДК 54-185

ЗАЩИТНЫЕ ПОКРЫТИЯ ОТ СВЕТОВОЙ РАДИАЦИИ НА ОСНОВЕ
ПОЛИ-N-ВИНИЛПИРРОЛИДОНА И ОКСИДА ЦИНКА

Колохова С.А.

МАОУ Центр образования 35, Уфа, Россия

Полимерные материалы на основе поли-N-винилпирролидона (ПВП) и оксида цинка (ZnO) могут быть использованы в качестве УФ-фильтра или компонента покрытий благодаря свойствам обоих компонентов. ПВП - это водорастворимый полимер, который используется как связующее вещество, стабилизатор или солюбилизатор в различных продуктах, в том числе в лекарственных препаратах и косметических изделиях. Он также применяется в составе УФ-чернил и покрытий. Оксид цинка известен как минеральный УФ-фильтр, обеспечивающий физическую защиту от ультрафиолетового излучения. Он безопасен и широко используется в солнцезащитных средствах. Кроме всего прочего, оксид цинка проявляет также бактерицидные свойства.

В связи с вышесказанным в данной работе проведена разработка защитных пленочных покрытий, предотвращающих световое старение, на основе ПВП и оксида цинка и исследование их защитных свойств.

Пленки получены на основе водных дисперсий ПВП или смесей ПВП/поливиниловый спирт (ПВС) с оксидом цинка при содержании последнего от 0,1 до 3 % масс. путем полива дисперсии на предварительно обезжиренную стеклянную подложку (чашку Петри) с последующим высушиванием на воздухе. Установлено, что даже при минимальном содержании оксида цинка пленочные образцы на основе индивидуального ПВП характеризуются высокой хрупкостью. В связи с этим в качестве пленкообразующей основы рекомендовано использовать смеси ПВП/поливиниловый спирт с массовым соотношении 70:30 соответственно.

Для исследования защитных свойств полученных полимерных пленок использовали стационарный светильник ультрафиолетового и белого света Тетра-М с длиной волны 365 нм. В качестве объектов воздействия выбраны растения (микрозелень). Установлено, что растения, укрытые пленками ПВП/поливиниловый спирт/ оксид цинка не

погибают при воздействии УФ-излучения, в то время как контрольные образцы стали нежизнеспособными уже через 4 суток воздействия. Показано также, что пленки ПВП/поливиниловый спирт даже в отсутствии оксида цинка также обладают защитными свойствами. Таким образом, можно рекомендовать композиции ПВП/поливиниловый спирт в присутствии 0,1-1 % масс. оксида цинка в качестве УФ-фильтров.

© Колохова С.А., 2025

УДК 54

ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ И ВЛИЯНИЕ РАСТИТЕЛЬНЫХ МАСЕЛ
НА ЗДОРОВЬЕ ЧЕЛОВЕКА

Корнелюк А.Р., Мамаев Д.Р.

*Муниципальное автономное общеобразовательное учреждение
«Школа № 8 им. И.П. Хатунцева»*

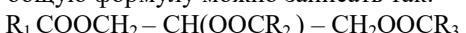
Актуальность темы исследования. Растительные масла являются одним из важных источников энергии для человеческого организма, они содержат незаменимые жирные кислоты, играют ключевую роль в структуре клеточной мембранны, синтезе гормонов, развитии нервной системы.

Цель работы: анализ химического состава растительных масел, потенциальных рисков и пользы их использования для человека.

Растительные масла представляют собой сложные смеси органических соединений, в основном триглицеридов (эфиров глицерина и жирных кислот), минорных компонентов, таких как витамины (особенно А и Е) и антиоксиданты. Влияние масел на здоровье определяется, прежде всего, типом и соотношением входящих в их состав жирных кислот (насыщенных, мононенасыщенных и полиненасыщенных - Омега-3, Омега-6). Все они необходимы для клеточных мембран, имеют антиоксидантные свойства, и влияют на метаболизм. Сбалансированное потребление различных растительных масел обеспечивает организм необходимыми веществами и предотвращает развитие, в частности, сердечно-сосудистых заболеваний.

Химический состав растительных масел:

1.Основным компонентом растительных масел, молекула которой состоит из глицеринового остова, связанного с тремя молекулами жирных кислот является триацилглицерин. У триацилглицеринов нет одной общей химической формулы, так как они представляют собой смеси сложных эфиров глицерина и различных жирных кислот, тем не менее его общую формулу можно записать так:



где R₁ R₂ R₃ – остатки разных жирных кислот.

2. Жирные кислоты – насыщенные: например, пальмитиновая (C_{16}) и стеариновая (C_{18}), содержатся в небольших количествах. Ненасыщенные: включают мононенасыщенные (олеиновая ($C_{18:1}$) и полиненасыщенные (липолевая ($C_{18:2}$), линоленовая ($C_{18:3}$)). Полиненасыщенные жирные кислоты (ПНЖК) являются строительным материалом для клеточных мембран и играют ключевую роль в обмене веществ. Например, линолевая кислота (Омега-6) участвует в регуляции артериального давления, жировых отложений и улучшает кровообращение.

3. Сопутствующие вещества: витамины – жирорастворимые, такие как витамин Е (токоферолы) и провитамин А (β -каротин). Витамины Е и А являются антиоксидантами, которые нейтрализуют свободные радикалы, предотвращая повреждение клеток и замедляя процессы старения. Систематическое потребление витамина Е снижает риск ишемической болезни сердца, инсульта и сахарного диабета.

4. Фосфолипиды – важны для клеточных мембран.

5. Фитостерины – способствуют снижению уровня холестерина.

Важно соблюдать баланс жирных кислот поэтому растительные масла необходимо комбинировать, поскольку они содержат разные соотношения Омега-3, Омега-6 и Омега-9 кислот. Избыток Омега-6, к примеру, может привести к хроническому воспалению.

По способу очистки масла делятся на нерафинированные и рафинированные.

1. Нерафинированные масла сохраняют больше полезных веществ, таких как фосфолипиды, витамины и другие органические примеси, поскольку подвергаются минимальной очистке.

2. Рафинированные – очищаются с помощью химической и паровой обработки, что приводит к удалению этих компонентов, но делает продукт нейтральнее по вкусу, запаху и цвету, а также более устойчивым к нагреванию.

Растительные масла приносят значительную пользу для здоровья, но их потенциальные риски связаны в основном с неправильным хранением, термической обработкой и степенью обработки.

Общие риски:

- окисление и хранение: все растительные масла подвержены окислению под воздействием света, воздуха и тепла, что приводит к образованию токсичных веществ. Масло следует хранить в герметично закрытой емкости, в темном, прохладном месте.
- термическая обработка: для жарки и высокотемпературной готовки следует выбирать масла с высокой точкой дымления (например, рафинированное оливковое, кокосовое или авокадовое масло). Нерафинированные масла лучше использовать для заправки салатов.

- умеренность: несмотря на пользу, все масла являются высококалорийными продуктами, и их потребление должно быть умеренным в рамках сбалансированного рациона.

Пищевое растительное масло является одним из важных источников энергии для человеческого организма, растительное масло содержит вещества, необходимые для здоровья человека. Некоторые компоненты в пищевых растительных маслах обладают противовоспалительным и антиоксидантным действием, помогая предотвращать хронические заболевания.

По сравнению с животным жиром производство пищевого растительного масла имеет преимущество с точки зрения влияния на окружающую среду: оно меньше воздействует на природную среду, поскольку не требует потребления большого количества кормов и водных ресурсов.

Литература:

1. Чимонина И.В., Шульга А.А. Влияние растительных масел на физиологические аспекты здоровья человека. Ж. / Мир науки, культуры, образования / 2015. № 3.
2. Бурункова Ю.Э, Успенская М.В. Растительные масла: свойства, технологии получения и хранения, окислительная стабильность. Санкт-Петербург. 2020. 78 с.

© Корнелюк А.Р., Мамаев Д.Р., 2025

УДК 634.11.075:664.8.037.1:581.192

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КИСЛОТНОСТИ РАЗЛИЧНЫХ СОРТОВ ЯБЛОК

Крестовников Д.Е., Дитятева И.П.

МАОУ «Лицей № 5», Уфа, Россия

Вкусовой профиль и потребительские характеристики яблок в значительной степени определяются их кислотностью, которая связана с концентрацией органических кислот, прежде всего яблочной. Этот показатель также влияет на сохранность плодов. Поскольку различные сорта яблок имеют неодинаковую кислотность, их сравнительное изучение представляет научный и практический интерес. Целью данной работы стало определение и сопоставление титруемой кислотности распространённых сортов яблок.

В ходе эксперимента были взяты свежие яблоки трех контрастных сортов: «Гренни Смит» (известный высоким содержанием кислот), «Голден Делишес» (относится к сладким сортам) и «Антоновка обыкновенная» (традиционный российский сорт с характерным вкусом). Отбор проб проводили методом случайной выборки из партии плодов одной степени зрелости. Для обеспечения репрезентативности данных из нескольких плодов каждого сорта методом механического прессования

получали объединенную пробу сока, который затем фильтровали для удаления взвесей.

Количественное определение кислотности проводили стандартным методом кислотно-основного титрования. Свежеотжатый сок объемом 10 мл помещали в коническую колбу и титровали раствором гидроксида натрия (NaOH) с точной концентрацией 0,1 моль/л. В качестве кислотно-основного индикатора использовали фенолфталеин. Титрование проводили до появления устойчивого бледно-розового окрашивания, не исчезающего в течение 30 секунд. Каждый анализ выполняли три раза для обеспечения статистической достоверности. Расчитали массовые концентрации кислот.

Результаты титрования показали значимые различия в уровне титруемой кислотности между исследуемыми сортами. Как и предполагалось, наибольший средний объем рабочего раствора щелочи был израсходован при титровании сока сорта «Гренни Смит», что однозначно свидетельствует о самом высоком содержании органических кислот в его плодах. Значения, полученные для сорта «Антоновка», заняли промежуточное положение, подтвердив его статус сорта с умеренной кислотностью. Наименьший объем щелочи был зафиксирован для сока сорта «Голден Делишес», что коррелирует с его органолептической характеристикой как сладкого сорта.

Литература

1. Скурихин И.М., Волгарев М.Н. Химический состав пищевых продуктов. М.: Агропромиздат, 1987. 360 с.
2. Руководство по методам анализа качества и безопасности пищевых продуктов / Под ред. И.М. Скурихина. М.: Брандес, 1998. 342 с.

© Крестовников Д.Е., Дитятева И.П., 2025

УДК:541.14:547.551.2

ЧТО СОДЕРЖИТСЯ В ЧАШКЕ ЧАЯ?

Кузнецова К.В., Валинурова Р.М.

*МОБУ Карайдельская средняя общеобразовательная школа № 1
муниципального района Карайдельский район РБ Россия*

Чай - один из полезнейших и любимейших напитков людей всех возрастов. Мы пьем чай на завтрак, обед или ужин, но мы редко задаемся вопросом, что содержится в нем и чем отличается один вид от другого?

Немногие люди знают о составе, полезных и вредных свойствах чая и его действии на организм человека. Первоначально чай использовался в медицинских целях – он считался ценным ароматным и лечебным растением. По ходу истории напиток стал распространяться за пределы Китая. Одним из ключевых этапов было распространение чая по Великому шёлковому пути, который способствовал обмену культурными ценностями между Востоком и Западом. Чай начал появляться в России в

конце XVI – начале XVII века. Первые сведения о напитке в российских источниках связаны с дипломатическими контактами между Россией и Китаем. В 1618 году в Московском кремле был организован приём в честь китайского посланника, с которым были поданы пиалы с напитком.

Большинство видов чая производятся из одного вида растений, которое на латыни называется *Camellia Sinesis*. Чай бывает: Чёрный, Зелёный, Белый, Улун, Пуэр, Фиолетовый, Матча и Травяные чаи.

Химический состав чая. На сегодняшний день, в созревшем чайном листе обнаружено более чем 300 различных веществ и соединений, определяющих такие достоинства чая, как вкус, аромат и цвет. В зеленых листьях чая, 72–82% составляет вода и лишь 10-28% – сухие вещества. В готовом чае, наоборот, на долю воды приходится 3-7%, а сухих веществ – 94-97%. Сухие вещества чайного листа можно разделить на две группы: водорастворимые (экстрактивные вещества, экстракт) и нерастворимые в воде. Важнейшими компонентами чайного экстракта являются дубильные вещества, алкалоиды, танин, кофеин и эфирные масла, моносахара, белковые вещества, витамины C, P, B1 (тиамин), B2 (рибофлавин), PP (никотиновая кислота), K (филлохинон), A (каротин),

Для исследования были взяты образцы чая: Черный, Зеленый, Каркаде, Морковный, Копорский (Иван-чай).

Результаты исследований:

1. С помощью экспериментов можно выделить некоторые составные компоненты чая: танин, кофеин, витамин C, красители, а также узнать pH среды чая.

2. Больше всего танина в черном, зеленом и морковном чае (рис 1).



Рис. 1. Определение танина в чае

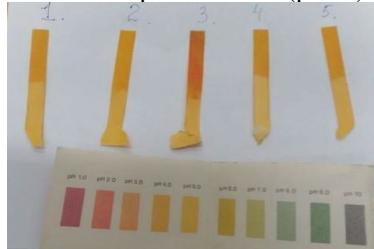


Рис. 2. Определение pH среды чая универсальной индикаторной бумагой

3. pH среда у всех видов чая нейтральная, кроме чая «Каркаде», у него кислая среда (рис. 2).

4. Большее количество кофеина отмечено в черном чае и морковном (рис. 3).



Рис. 3. Определение количества кофеина в чае

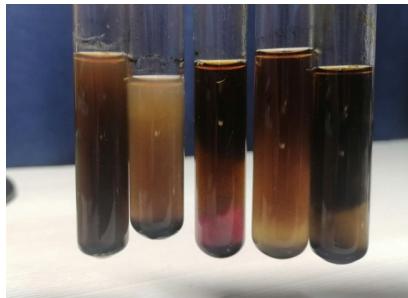


Рис. 4. Определение витамина С в чае

5. Больше всего витамина С содержится в Иван- чае и черном (рис. 4).

6. В исследовании на наличие красителей в черном, зеленом и Иван- чае произошло обесцвечивание, значит в них меньше красителей, чем в «Каркаде» и морковном чае (рис. 5).



Рис. 5. Определение наличия красителей в чае
Литература

1. Вильям Васильевич Похлебкин «Чай, его типы, свойства, употребление». М.: Центрполиграф, 2001.
2. Борис Дехтар, Минди Тумэй «Живительная сила чая». И. «Крон-Пресс», 1995–240с.

© Кузнецова К.В., Валинурова Р.М., 2025

УДК 549.517.2; 544.774

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МИКРОЧАСТИЦ ПЕРОКСИДА КАЛЬЦИЯ ДЛЯ ОЧИСТКИ ВОДЫ И ПОЧВЫ ОТ ИОНОВ ТЯЖЁЛЫХ МЕТАЛЛОВ

Кулешов Е.О.¹, Ковина К.Е.²

¹МАОУ «Лицей № 5», Уфа, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Пероксид кальция (CaO_2) – кислородсодержащее соединение, которое может применяться в экологической химии для очистки воды от токсичных ионов тяжёлых металлов. В данной работе исследованы сорбционные свойства микрочастиц пероксида кальция по отношению к катионам меди(II), свинца(II), никеля(II) и кадмия(II). Пероксид кальция был получен реакцией между гидроксидом кальция и перекисью водорода, что позволило получить порошок с содержанием CaO_2 73%. Средний размер частиц составил 12 мкм, дополнительное измельчение не проводилось.

Установлено, что эффективность сорбции зависит от pH среды. Максимальная степень извлечения всех исследуемых ионов достигается при pH около 6 (рис. 1). При более низком или более высоком pH эффективность резко снижается. Это связано с тем, что в кислой среде происходит разложение пероксида кальция с выделением кислорода, а в щелочной – снижается способность поверхности сорбента взаимодействовать с катионами металлов.

Процесс сорбции протекает быстро: равновесие устанавливается уже через 10 минут контакта сорбента с раствором. Оптимальная масса сорбента составляет 1,5 г на 25 мл раствора. При этих условиях степень извлечения ионов свинца и меди превышает 98%, кадмия и никеля – более 90%.

Преимуществом пероксида кальция является также его антимикробная активность, превышающая таковую у наночастиц серы и серебра, что позволяет использовать его не только для удаления тяжёлых металлов, но и для обеззараживания воды.

Таким образом, микрочастицы пероксида кальция представляют собой эффективный, доступный и экологически безопасный сорбент для очистки водных сред от ионов тяжёлых металлов.

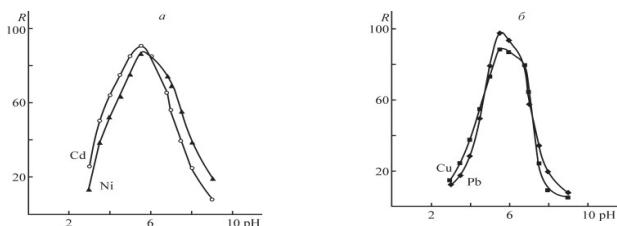


Рис. 1. Зависимость степени извлечения R (%) ионов тяжёлых металлов пероксидом кальция от рН среды.

Литература

- Массалимов И.А., Ахметшин Б.С., Мустафакулов Ш.С., Массалимов Б.И., Мустафин А.Г. Синтез наночастиц сульфата кальция с использованием полисульфида кальция // Бутлеровские сообщения. 2025. Т. 82. № 4. С. 24-35.
- Уракаев Ф.Х., Массалимов И.А., Ахметшин Б.С., Массалимов Б.И., Хусаинов А.Н., Самсонов М.Р., Мустафокулов Ш.С. Механизм и кинетика роста наночастиц серы и сульфатов щелочноземельных металлов при их соосаждении из истинных полисульфидных растворов. // Журнал физической химии. 2025. Т. 99. № 4. С. 620-635.

© Кулешов Е. О., Ковина К.Е., 2025

УДК 664.4

ПОВАРЕННАЯ СОЛЬ: ДРУГ ИЛИ ВРАГ?

Кутлугильдин С.И.

МАОУ СОШ № 110, Уфа, Россия

Человек с поваренной солью знаком издревле. В Древнем Египте соль использовали для бальзамирования мумий. Арабские и тюркские племена заключали договоры над сосудом с солью и заедали клятву ее щепоткой. Древние римляне в знак крепкой дружбы преподносили соль в подарок друг другу. Поваренная соль и по сей день играет большую роль в жизни человека. Однако соль может быть как другом, так и врагом.

С одной стороны, соль – друг, так как она помогает спасать жизни людям. Для этого врачи используют физиологический раствор, количество поваренной соли в котором 0.9 %. Цель применения физ. раствора – создание благоприятных условий для существования красных кровяных телец. В желудке человека находится соляная кислота, образование которой невозможно без участия поваренной соли. Соляная кислота помогает человеку переваривать и усваивать белковую пищу. Соляной раствор используют для промывания носа при заболеваниях ОРВИ. К тому же, ее добавляют в растворы для ингаляций.

Во время Великой Отечественной Войны хлопчатобумажные ткани пропитывали в растворе соли и прикладывали их на раны солдат.

Сегодня это свойство соли также активно применяют для лечения ран с целью предотвращения распространения в них инфекций.

С другой стороны, избыток соли – враг, так как он может привести к серьёзным проблемам со здоровьем. Переизбыток соли приводит к задержке жидкости в организме, благодаря чему появляется отечность и возможна перегрузка сердечно-сосудистой системы. Не смотря на это, задержка жидкости в сосудах необходима для поддержания водного баланса. Поэтому в жаркие дни человеку необходимо пить минеральную воду или воду с добавлением поваренной соли. Таким образом, поваренная соль защищает человека от обезвоживания. Великий полководец Суворов Александр Васильевич перед ответственными походами и штурмами крепостей всегда кормил своих солдат соленой рыбой. Это повышало выносливость воинов.

Поваренная соль применяется не только в медицине и в пищевой промышленности, но и в обычной жизни. Способность соли понижать температуру замерзания воды используется при обработке ледяных покровов тротуаров и защищает человека от падения. Однако таяние снега под действием соли приводит к порче обуви и хромированных деталей автомобилей.

Таким образом, поваренная соль – это не враг, а полезный продукт при условии ее разумного употребления.

© Кутлугильдин С.И., 2025

УДК 54

ИССЛЕДОВАНИЕ КАЧЕСТВА ВОДОПРОВОДНОЙ ВОДЫ СОВЕТСКОГО РАЙОНА

Леванов Д.А., Кучуков Я.Р., Зайнуллина Л.Ф.
МАОУ Лицей № 5 ГО, г. Уфа, Россия

Как известно, наверняка, каждому, человек примерно на четверть состоит из воды. Поэтому качество употребляемой им воды имеет жизненно-важное значение. Состоять из непригодной для жизни воды – весьма сомнительно.

Вода "из-под крана" используется нами повсеместно. По данным лаборатории питьевого водоснабжения НИИ экологии человека и окружающей среды РАМН, 90% водопроводных сетей подают в дома воду, не отвечающую санитарным нормам. Главная причина наличия в водопроводной воде вредных для здоровья нитратов, пестицидов, нефтепродуктов и солей тяжелых металлов – это катастрофическое состояние водопроводных и канализационных систем. Соединение канализационных вод с выбросами предприятий дает добавочный эффект: к перечисленным выше химическим составляющим питьевой воды добавляются и бактерии – кишечные палочки, патогенные

микроорганизмы, холерный вибрион и т.д. Поэтому актуальность данной проблемы очень высока.

Актуальность темы: соответствует ли качество водопроводной воды нормам СанПин.

Цель исследования: проанализировать параметры качества воды в микрорайоне Новикова Советского района города Уфы.

Задачи:

- 1) Изучить нормативные требования к питьевой воде;
- 2) Приобрести навыки анализа воды. Научиться определять жесткость воды тест-полоской для определения качества воды;
- 3) Выяснить качественный состав водопроводной воды;
- 4) Сопоставить качество водопроводной воды с нормами СанПиН.

Результаты исследования: В работе использовались тест-полоски для определения качества водопроводной воды микрорайона Новикова Советского района. Из полученных результатов видно, что главные показатели, как общая жёсткость воды равняется 50-100 мг/л, и водородный показатель pH равен 7,8-8,4.

Главные показатели и остальные показатели, как карбонаты, хлориды, свободный бром, катионы меди и т.п., находятся в рамках допустимых значений. Это означает, что система водоснабжения микрорайона Новикова Советского района является эффективной и соответствует требованиям СанПиН 2.1.4.1074-01 п.3 «Гигиенические требования и нормативы качества питьевой воды».

Литературы

1. СанПин 2.1.4.1074-01 Питьевая вода и водоснабжение населенных мест. Гигиенические требования и нормативы качества питьевой воды.
2. Клейн С.В., Вековшинина С.А., Сбоев А.С. «Приоритетные факторы риска питьевой воды и связанный с этим экономический ущерб» // «Гигиена и санитария». – 2016. – №1. – С. 10–14.
3. Коршунова А.Ю., Михайличенко К.Ю., Курбатова А.И. «Анализ результатов определения качества водопроводной воды». – № 1. – 2014. – С. 78–82.

© Кутлугильдин С.И., 2025

УДК 543.08:632.95:634/635

СРАВНИТЕЛЬНОЕ СОДЕРЖАНИЕ НИТРАТОВ ВО ФРУКТАХ И ЯГОДАХ МАГАЗИННОГО (ИНДУСТРИАЛЬНОГО) И ДОМАШНЕГО (ПРИУСАДЕБНОГО) ПРОИЗВОДСТВА

Макарычева К.В.¹, Косова М.А.², Зайнуллина Л.Ф.²

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²МАОУ «Лицей № 5», Уфа, Россия

Целью проведённого исследования являлось определение и сравнительный анализ содержания нитратов в популярных видах фруктов и ягод магазинного и домашнего происхождения. В качестве объектов исследования были выбраны: яблоко, груша, лимон, клубника, малина,

слива, персик, вишня, абрикос и арбуз. Анализ нитратов проводился фотометрическим методом с применением сертифицированных реагентов, позволяющих получить данные с высокой воспроизводимостью.

Полученные результаты выявили существенные различия между двумя группами образцов. Наиболее выраженный контраст отмечен для клубники и арбуза: концентрация нитратов в магазинной клубнике составила в среднем 190–230 мг/кг, тогда как в домашней – 80–120 мг/кг. В арбузах показатели находились на уровне 150–180 мг/кг для магазинных образцов и 60–90 мг/кг для домашних. У яблок, груш, слив и персиков разница была умеренной: магазинные образцы содержали 60–100 мг/кг, домашние – 40–70 мг/кг. Косточковые – вишня и абрикос – продемонстрировали превышение содержания нитратов в магазинных плодах на 25–40 %. Лимоны обеих групп отличались минимальными показателями (20–40 мг/кг), что объясняется особенностями агротехники их выращивания и меньшей способностью накапливать азотистые соединения.

Обобщая полученные данные, можно заключить, что плоды домашнего происхождения в большинстве случаев содержат меньшие концентрации нитратов, что связано с более ограниченным использованием минеральных удобрений. Проведённый анализ подчёркивает необходимость контроля нитратов в продуктах питания и информирования населения о потенциальных рисках, связанных с их избыточным потреблением. Результаты исследования могут быть использованы при разработке рекомендаций по безопасному питанию и оценке качества плодовоощной продукции.

Литература

1. Иванов И.А., Петрова Е.В. «Нитраты в продуктах питания». – М.: Наука, 2020.
2. Сидоренко Л.П. «Методы анализа нитратов в растительной продукции». – СПб.: БиоХимПресс, 2018.
3. WHO. Nitrate and Nitrite in Food. Technical Report Series, 2021.

© Макарычева К.В., Косова М.А., Зайнуллина Л.Ф., 2025

УДК:541.14:547.551.2

КАЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ ФРУКТОВЫХ СОКОВ НА НАЛИЧИЕ ВИТАМИНА С

Машковцева О.Н., Русских К.А., Смирнов Я.А., Касимов С.А.,

Джумакулыева Л.Ф., Галимарданов Т.Р., Сентемова М.С.

Муниципальное автономное образовательное учреждение

Средняя общеобразовательная школа № 74, Ижевск, Россия

Всем известно, что с наступлением холодов люди начинают часто болеть, так как их иммунитет снижается. Один из главных способов его

укрепить – правильное питание, которое включает в себя определённое количество полезных веществ, микроэлементов и витаминов. Главным витамином, являющимся хорошим защитником от простудных заболеваний, является витамин С (аскорбиновая кислота).

Проанализировав литературу, мы узнали, что витамин С содержат и фруктовые соки, (а их мы употребляем достаточно часто), но какой, из популярных бюджетных марок (так как их чаще покупают школьники и студенты) будет наиболее полезным? Именно этот вопрос лёг в основу нашей работы.

Нами было изучено несколько популярных вкусов сока: мультифрукт, яблочный, апельсиновый, вишнёвый. Марок: «Каждый день», «Мой», «Ашан» и «Сады Придонья».

Для определения витамина С, мы ссылались на его главное свойство - способность к окислению. В работе, в качестве хорошего окислителя, был выбран 5% спиртовой йод. В стакан налили 2 мл сока и добавили туда немного раствора крахмала. В полученную смесь по каплям прибавляли раствор йода до появления синего окрашивания. Количество капель пропорционально концентрации витамина С. Данные приведены в таблице:

Таблица 1

| Марка производителя | Вид сока | Количество йода, кап. |
|---------------------|--------------|-----------------------|
| "Каждый день" | Яблочный | 1 |
| "Мой" | Яблочный | 4 |
| "Ашан" | Яблочный | 3 |
| "Сады Придонья" | Яблочный | 12 |
| "Каждый день" | Апельсиновый | 2 |
| "Мой" | Апельсиновый | 5 |
| "Ашан" | Апельсиновый | 3 |
| "Сады Придонья" | Апельсиновый | 14 |
| "Каждый день" | Мультифрукт | 2 |
| "Мой" | Мультифрукт | 1 |
| "Ашан" | Мультифрукт | 3 |
| "Сады Придонья" | Мультифрукт | 9 |
| "Каждый день" | Вишня | 5 |
| "Мой" | Вишня | 4 |
| "Ашан" | Вишня | 3 |
| "Сады Придонья" | Вишня | 13 |

Проанализировав данные таблицы, можно сделать вывод, что наиболее богаты витамином С соки, марки "Сады Придонья". Соки, марки "Мой" и "Каждый день" обделены наличием аскорбиновой кислоты.

Литература

1. Волков В. Н., Давтян М. Л. Фруктовые соки: определение химического состава и качества // Химия в школе. 2013 № 3 С.45–51.
 2. Ребров, В.Г. Витамины, макро- и микроэлементы / В.Г. Ребров, О.А. Громова. – М.: ГЭОТАР- МЕД, 2008 – 968 с.
 3. Фетисова, М. В. Определение содержания витамина С в апельсиновом соке разных производителей / М. В. Фетисова, Т. Н. Некрасова. – Текст: непосредственный // Юный ученый. – 2023 – № 3 (66). – С. 147-150. – URL: <https://moluch.ru/young/archive/66/3478/> (дата обращения: 13.11.2024).
- © Машковцева О.Н., Русских К.А., Смирнов Я.А., Касимов С.А., Джумакулыева Л.Ф., Галимарданов Т.Р., Сентемова М.В., 2025

УДК 541.64+541.68+547.467

ИЗУЧЕНИЕ ВРЕМЕНИ ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЯ ПРИ ПОЛУЧЕНИЕ СШИТЫХ ПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ НИЗКО- И ВЫСОКОМЕТОКСИЛИРОВАННОГО ПЕКТИНОВ

Мингалеев Г.В.¹

Руководитель: Мингалеева Г.Р.²

¹Ученик 6A класса МАОУ Школа № 97, г. Уфа, Россия,

²УфИХ УФИЦ РАН, г. Уфа, Россия

Полимерные гидрогели представляют собой влажные и мягкие материалы, состоящие из трехмерного сетевого гидрофильтрального полимерного скелета, который содержит много воды. Из-за многочисленных гидрофильтральных групп в молекуле гидрогеля в сухом состоянии обычно могут впитывать в десятки раз больше воды по отношению к исходной массе сухого вещества, что характеризует набухающие свойства гидрогелей. Набухание является не только важной особенностью гидрогелей в сухом состоянии, но и распространенным поведением для большинства лекарственных гидрогелей. Хорошо набухающие гидрогели широко используется во многих областях. Например, многие из них используются в качестве суперабсорбентов в сельском хозяйстве и для средств личной гигиены. Гидрогели с хорошим набухающим свойством, хорошей биосовместимостью и биоразлагаемостью уже давно используются в качестве носителей лекарств, где лекарства инкапсулируются гидрогелем и защищены от атаки желудочной кислоты, высвобождение лекарства осуществляется после набухания гидрогеля. Это делает гидрогели хорошими кандидатами для контролируемого высвобождения лекарств.

Пектин является доступным природным водорастворимым полисахаридом растительного происхождения и широко используется в пищевой промышленности в качестве загустителя, желирующего агента, эмульгатора, текстуризатора или коллоидного стабилизатора [1]. В

последнее время он привлек внимание для использования в биомедицинских приложениях, что связано с его биоразлагаемостью, биосовместимостью, биологической активностью, а также с гелеобразующими и стабилизирующими свойствами [2, 3]. Пектин является гастростойким полимером и поэтому используется для контролируемой пероральной доставки лекарств [4] и 3D каркасов для регенеративной медицины [5, 6].

В зависимости от источника происхождения, методов выделения и очистки пектин различается по своей молекулярной массе, что оказывает существенной влияние на свойства не только исходных растворов, но и на свойства гидрогелей на их основе. С точки зрения химического состава мономерные звенья пектина также варьируются в зависимости от соотношения карбоксильной и метоксильной функциональных групп. Принято считать, что низкометоксилированный пектин (LP) содержит до 50% метоксильных групп, а высокометоксилированный пектин (HP), содержит 50-80% метоксильных групп [6]. Наличие функциональных групп в пектине привлекательно для получения сшитых полимеров. Так карбоксильные группы пектина связывают ионы металлов [7], образуя пектиновые гели. Этот метод сшивания представляет большой интерес, особенно для инкарпуляции биоактивных соединений и для удаления ионов металлов из сточных вод [9, 10]. Гидрогели пектина, полученные за счет сшивания с органическими молекулами, обладают более высокой стабильностью и лучшими механическими свойствами, поэтому полезны для тканевой инженерии и биомедицины.

В последнее время стратегия получения сетчатых полимеров, без участия катализаторов за счет органических молекул в качестве сшивателей становится все более популярной. В данной работе изучалось время гелеобразования при смешивании LP или HP пектина с раствором сшивателя, в которых содержалось 0.4 г, 0.3 г, или 0.2 г дигидразида природной янтарной кислоты (предоставленной для эксперимента УФИХ УФИЦ РАН). Смешанные растворы перемешивали на шейкере, засекался секундомер и определяли время гелеобразования (желатинизации) – промежуток времени после смешивания компонентов, за который она теряет текучесть и переходит в гелеобразное состояние (Таблица 1).

Таблица 1
Время гелеобразования

| Количество сшивателя в 5 мл раствора | Время гелеобразования 20 мл раствора (60 г/л) LP или HP пектина | |
|--------------------------------------|---|---|
| | Пектин низкометоксилированный (LP) фирмы «Пудовь» (Россия) | Пектин высокометоксилированный (HP) фирмы «Watt-N» (Россия) |
| | | |

Окончание табл. 1

| | | |
|-------|-------------|-------------|
| 0.4 г | 1000±30 сек | 600±40 сек |
| 0.3 г | 2000±40 сек | 800±35 сек |
| 0.2 г | - | 1000±30 сек |

Результаты эксперимента представлены в таблице 1. Из НР пектина всегда образовывался гель. Чем больше было содержание сшивателя, тем быстрее во времени происходил процесс гелеобразования. Из LP пектина гелеобразование происходило только когда было высокое содержание сшивателя, при низких значениях его не наблюдалось гелеобразования даже когда раствор выдерживали 1 час, но раствор становился менее текучим, что возможно свидетельствует о том, что частично полимер сшивался, но содержание сшивок было очень мало.

Все это свидетельствует о том, что именно метоксильные группы пектина взаимодействуют с сшивателем, образуя сшитый полимер – гидрогель, а не карбоксильные.

Фотоотчет эксперимента



Исходные растворы
пектин в воде и
сшиватель в воде



Смешение растворов
с помощью шейкера



Гелеобразование

Литература

1. Grout S., Buwalda S., Budtova T. // European Polymer Journal. 2021. V. 149. P. 110386.
2. Martău G.A., Mihai M., Vodnar D.C. // Polymers. 2019. № 11. P. 1837
3. Munarin F., Tanzi M.C., Petrini P. // Int. J. Biol. Macromol. 2012. V. 51. № 4. P. 681.
4. Dukovski J.B., Mrak L., Winnicka K., Szekalska M., Juretić M., Filipović-Grčić J., Pepić I., Lovrić J., Hafner A. // Drying Technol. 2019. V. 37. № 15. P. 1915.
5. Kulikouskaya V., Kraskouski A., Hileuskaya K., Zhura A., Tratsyak S., Agabekov V. // J. Biomed. Mater. Res. Part A. 2019. V. 107. № 8. P. 1814.
6. Lara-Espinoza C., Carvajal-Millán E., Balandrán-Quintana R., López-Franco Y., Rascon-Chu A. // Molecules. 2018. V. 23. №4. P. 942.
7. Cao L., Lu W., Mata A., Nishinari K., Fang Y. // Carbohydrate Polymers. 2020. V. 242. P. 116389.
8. Hennink W. E., van Nostrum C. F. // Advanced Drug Delivery Reviews. 2002. V. 54. № 1. P. 13.
9. Wang R., Liang R., Dai T., Chen J., Shuai X., Liu C. // Trends in Food Science & Technology. 2019. V. 91. P. 319.
10. Miso Kim, Sunwoo L. // Synthesis. 2024. V. 56. №14. P. 2263.

© Мингалеев Г.Б., 2025

УДК 543.242.3

КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ АСКОРБИНОВОЙ КИСЛОТЫ
В ПРОДУКТАХ МЕТОДОМ ЙОДОМЕТРИЧЕСКОГО ТИТРОВАНИЯ
В УСЛОВИЯХ ШКОЛЬНОЙ ЛАБОРАТОРИИ

Мустафина С.А.¹, Галиева Р.В.², Бураншина З.Т.²

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²МАОУ УГБГ № 20 им. Ф.Х. Мустафиной, Уфа, Россия

L-аскорбиновая кислота, также известная как витамин С, представляет собой водорастворимое органическое вещество, мощный антиоксидант, участвующий во многих биохимических процессах. Будучи природным иммуномодулятором, аскорбиновая кислота повышает адаптационные способности организма и его сопротивляемость к инфекциям, а также участвует в регуляции процессов метаболизма. Поскольку человеческий организм не способен к самостоятельному синтезу и накапливанию витамина С, его необходимо получать с пищей или в виде добавок.

В данной работе изучены возможности проведения количественного анализа витамина С в составе различных фруктов в условиях школьной лаборатории. Одной из характерных особенностей аскорбиновой кислоты является легкость ее окисления до дегидроаскорбиновой кислоты, не имеющей витаминных свойств, именно поэтому наиболее доступным методом ее определения является прямое йодометрическое титрование, в основе которого лежит процесс окисления исследуемых веществ элементарным йодом [1]:

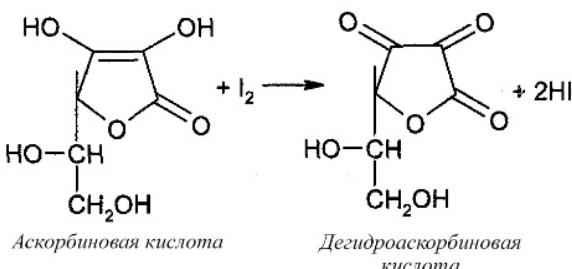


Рис. 1. Окисление аскорбиновой кислоты элементарным йодом

Для анализа были взяты свежевыжатые соки лимона, апельсина, вытяжка из плодов киви и отвар шиповника. Анализ проводили путем прямого титрования растворов соков фруктов 5%-ным аптечным раствором йода в присутствии индикатора – раствора крахмала – до стойкой синей окраски.

Таблица 1
Содержание витамина С (АК) в исследуемых продуктах (в 100 г)

| № п/п | Продукт | Экспериментально е содержание АК, мг | Теоретическое содержание АК, мг | Относительная погрешность, % |
|----------|------------------------|--|---------------------------------------|------------------------------------|
| 1 | Сок лимонный | 66 | 60 | 10 |
| 2 | Сок апельсиновый | 49 | 50 | 2 |
| 3 | Отвар шиповника | 456 | 470 | 3 |
| 4 | Вытяжка плодов киви | 158 | 180 | 12 |

Полученные в ходе исследования результаты приближены к данным, представленным в литературе (табл.1), что подтверждает возможность применения данного метода анализа в условиях школьной лаборатории.

Литература

1. Дубова Н.М., Гиндуллина Т.М. Титриметрические методы анализа: учебно-методическое пособие. Т.: Издательство Томского политехнического университета, 2011. 64-66 с.

© Мустафина С.А., Галиева Р.В., Бураншина З.Т., 2025

УДК 504.75.05:373.1

ПРАКТИЧЕСКИЕ МАСТЕР-КЛАССЫ ПО ПЕРЕРАБОТКЕ ПЛАСТИКА КАК ИНСТРУМЕНТ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ И ПОПУЛЯРИЗАЦИИ ЦИРКУЛЯРНОЙ ЭКОНОМИКИ СРЕДИ ШКОЛЬНИКОВ

Нафикова Э.В., Маликова Р.Р., Шайхулисламов Я.Р.
Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В условиях современного образовательного ландшафта особую значимость приобретают междисциплинарные подходы, интегрирующие теоретические знания с практической деятельностью (практический воркшоп).

Представленное исследование демонстрирует эффективность практических мастер-классов по переработке пластика в контексте профориентации и активизации познавательного интереса к химии. Программа мастер-классов предполагает погружение учащихся в полный технологический цикл – от анализа физико-химических свойств различных полимеров до их практической трансформации в новые продукты с использованием методов термомеханической обработки.

Особое внимание уделяется демонстрации прикладного значения химических процессов: полимеризации и деструкции макромолекул, возможностей вторичной переработки и замкнутых циклов, а также проблеме образования микропластика. Анализ эффективности различных этапов мастер-класса представлен в таблице 1.

Таблица 1

Оценка эффективности различных этапов мастер-класса

| Этап мастер-класса | Уровень вовлеченности (1-5) | Уровень усвоения материала (1-5) |
|---|-----------------------------|----------------------------------|
| Теоретическая часть (особенности переработки пластика и химии будущего) | 3,5 | 3,8 |
| Очистка и подготовка пластика | 4,2 | 4,5 |
| Переплавка и формование | 4,8 | 4,9 |
| Создание сувенирных изделий | 5,0 | 5,0 |

Анализ результатов проведения мастер-классов показывает: повышение уровня знаний школьников о проблеме загрязнения пластиком и способах ее решения; формирование позитивного отношения к переработке отходов и принципам циркулярной экономики; развитие практических навыков работы с полимерными материалами и оборудованием; стимулирование творческого мышления и проектной деятельности. Полученные данные подтверждают перспективность решения задач профориентации через демонстрацию практического применения химических знаний в контексте актуальных проблем переработки отходов и устойчивого развития.

Литература

1. Нафикова, Э. В. Инженерная экология / Э. В. Нафикова, Д. В. Александров, К. Е. Бондарь. – Уфа : Уфимский университет науки и технологий, 2024. 144 с.

© Нафикова Э.В., Маликова Р.Р., Шайхулисламов Я.Р., 2025

УДК 504.75.05:373.1

ОПЫТ ИНТЕРАКТИВНОЙ ПЕРЕРАБОТКИ ПЛАСТИКОВЫХ ОТХОДОВ НА МАСТЕР-КЛАССАХ ДЛЯ ШКОЛЬНИКОВ В РАМКАХ ПРОЕКТА «ХИМТЕХЛИДЕР»

Нафикова Э.В., Сидорова А.Н., Ахияров И.И.
Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В рамках реализации образовательного проекта «ХимТехМастер» на базе Уфимского университета науки и технологий была проведена серия мероприятий, направленных на формирование экологической культуры школьников через практическое знакомство с технологиями переработки

полимеров. В проекте приняли участие 200 учащихся 5-11 классов, которые прошли полный цикл занятий - от теоретического знакомства с основами химии полимеров до практического освоения процессов сортировки, измельчения и переработки пластиковых отходов. Особенностью проекта стало сочетание лекционного материала с реальной работой на оборудовании студенческой мастерской, где школьники самостоятельно изготавливали изделия из вторичного полиэтилена низкого давления и вторичного полиэтилена низкого давления (ПНД) с добавлением первичного. Из первичной гранулы ПНД (рисунок 1) создают изделия (рисунок 2), в данном случае – крышки. На мастер-классах обучающиеся школ измельчают данные изделия на оборудовании велошредер до мелкой фракции (рисунок 3). Далее крошка нагревается на оборудовании до температуры плавления 250 °С и прессуется под давлением, выплавляясь в новое изделия (рисунок 4 и рисунок 5)



Рис. 1. Первичная гранула ПНД



Рис. 2. Изделие из первичной гранулы ПНД



Рис. 3. Измельченные изделия из первичной гранулы ПНД



Рис. 4. Изделие из переработанного ПНД с добавлением первичной гранулы



Рис. 5. Изделие из переработанного ПНД

Результаты проведенной работы показали высокий уровень вовлеченности участников в процесс переработки: 92% школьников активно участвовали в практических занятиях, 78% проявили устойчивый интерес к лекционному материалу, а 85% выразили желание продолжить занятия в области переработки отходов и химии новых материалов. В обратной связи участники отмечали, что возможность самостоятельно превращать пластиковые крышки в полезные изделия помогла им по-новому взглянуть на проблему отходов. Многие школьники подчеркивали, что получили не только теоретические знания о маркировках пластика и технологиях переработки, но и практические навыки, которые могут применять в повседневной жизни. Полученные результаты демонстрируют эффективность практико-ориентированного подхода в экологическом образовании. В текущем учебном году планируется расширение географии проекта и проведение более 10 мастер-классов и лекций о переработке полимерных материалов с привлечением новых участников и развитием материально-технической базы студенческой мастерской.

Литература

1. Сидорова, А. Н. Реализация проекта деятельности студенческой мастерской по переработке пластика для экологического образования детей и молодежи / А. Н. Сидорова, Я. Р. Шайхулисламов // Мавлютовские чтения: Материалы XVIII Всероссийской молодёжной научной конференции. В 9-ти томах, Уфа, 25–29 ноября 2024 года. – Уфа: Уфимский университет науки и технологий, 2024. – С. 95-99.

© Нафикова Э.В., Сидорова А.Н., Ахияров И.И., 2025

УДК 54

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КАЧЕСТВА ВОДОПРОВОДНОЙ ВОДЫ

МИКРОРАЙОНА ИНОРС КАЛИНИНСКОГО РАЙОНА

Нигматзянова С.И., Мулюкова А.И., Зайнуллина Л.Ф.

МАОУ Лицей № 5, г. Уфа, Россия

Жесткость и водородный показатель водопроводной воды оказывают значительное влияние на организм человека.

Цель исследования: проанализировать параметры качества воды в микрорайоне Инерс Калининского района города Уфы; изучить способы устранения жесткости воды.

Задачи:

1) Изучить нормативные требования к питьевой воде;

2) Приобрести и совершенствовать навыки анализа воды.

Научиться определять жесткость воды тест-полоской для определения качества воды;

3) Определить жесткость воды и водородный показатель в населенном пункте Калининского района;

4) Изучить методы устранения жесткости воды.

В работе, используя тест-полоски, определена жесткость водопроводной воды в микрорайоне Инерс Калининского района. Из полученных данных видно, что значение жесткости и водородного показателя водопроводной воды находятся в пределах 50-100 мг/л и 7,6-7,8 единиц рН, что соответствует требованиям СанПиН 2.1.4.1074-01 п.3 Гигиенические требования и нормативы качества питьевой воды. Это можно объяснить эффективной работой систем фильтрации на водозаборных скважинах. Отбор проб водопроводной воды проводился в соответствии с ГОСТ Р 56237-2014.

Достичь уменьшения жесткости воды можно либо кипячением воды, при котором устраняется только карбонатная жесткость:



При химическом методе осаждения в качестве осадителей применяют известь или соду. При этом в осадок переводятся все соли кальция и магния.

Методом ионного обмена или катионирования жесткость устраниют путем пропускания воды через слой катионита. В итоге вода освобождается от катионов и анионов солей.

Литература

1. СанПин 2.1.4.1074-01 Питьевая вода и водоснабжение населенных мест. Гигиенические требования и нормативы качества питьевой воды.
2. ГОСТ Р 56237-2014 Вода питьевая. Отбор проб на станциях водоподготовки и в трубопроводных распределительных системах.
3. Глинка Н.Л. Общая химия. Ленинград, «Химия», 2021

© Нигматзянова С.И., Мулюкова А.И., Зайнуллина Л.Ф., 2025

УДК 547

ПРИМЕНЕНИЕ ПОЛИМОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ В ЗЕЛЕНОЙ ХИМИИ

Одинцов А.В.¹, Сунаргулов А.Б.², Бакирова Э.Р.²

¹МОБУ СОШ № 4, Благовещенск, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Современная наука активно ищет альтернативы традиционным материалам, производимым из невозобновляемых ископаемых ресурсов. Одним из таких решений является использование полимолочной кислоты (ПМК), которая изготавливается из возобновляемого сырья, главным образом кукурузного крахмала и сахарного тростника. ПМК обладает рядом преимуществ, определяющих привлекательность для зелёной химии: биологическая совместимость и полная биоразлагаемость; хорошие механические свойства (прочность, эластичность); термическая стабильность в определенном диапазоне температур; антимикробные свойства, полезные в медицине и пищевой промышленности [1].

Области применения ПМК весьма разнообразны [2]. ПМК используется для производства контейнеров для пищевых продуктов, медицинских изделий и товаров повседневного спроса, заменяя традиционные пластмассы. В медицинской отрасли ПМК служит материалом для изготовления рассасывающихся хирургических нитей, имплантатов и каркасов для тканевой инженерии, её биосовместимость и контролируемая скорость деградации открывают значительные перспективы для регенеративной медицины. Кроме того, ПМК применяется при создании композитных материалов, где её комбинируют с натуральными волокнами, такими как лён, хлопок или древесные частицы, для улучшения механических характеристик. Полученные таким образом биоразлагаемые композиты находят всё большее применение в строительстве и автомобилестроении.

ПМК демонстрирует огромный потенциал в качестве устойчивого материала будущего. Дальнейшие исследования позволят расширить сферу её применения и сделать производство ПМК экономически выгодным и доступным для широкого круга потребителей [3].

Литература

1. Keshavarz M.H., Nabi-Bidhendi H.R. Polylactic acid production from renewable resources: A review of recent advances. *Carbohydrate Polymers*. – 2019. – V. 213. – P. 163-174.
2. Lim L.-T., Auras R., Rubino M. Poly(lactic acid): synthesis, structures, properties, processing, and applications. Wiley & Sons, Inc., Hoboken, NJ. – 2011. P. 528.
3. Ma Q., Tang W., Yang C. et al. Sustainable poly(lactic acid)-based composites reinforced with cellulosic fibers: Preparation, characterization, and mechanical performance. *Composites Part B: Engineering*. – 2020. – V. 185. – P. 247-282.

© Одинцов А.В., Сунаргулов А.Б., Бакирова Э.Р., 2025

АНАЛИЗ СОДЕРЖАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ В
ИСТОЧНИКАХ ПОДЗЕМНЫХ ВОД г. БЛАГОВЕЩЕНСК.

Павлова Л.Р.¹, Миннибаева Э.М.²

¹*Башкирская гимназия им. Р.Т. Бикбаева № 102, Уфа, Россия,*

²*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

Ухудшение качества питьевых вод – одна из основных экологических проблем XXI века. В работе проанализированы показатели содержания органических веществ: ХПК и БПК полное, характеризующие качество вод. Пробы отбирались из четырех источников питьевого назначения в г. Благовещенск: ист. Св.-Георгиевского монастыря, ист. Св. Креста, родн. Надежда, родн. Благовещенский в мае 2025г.

Определение анализируемых показателей проводились в лаборатории РАЦККВ АО «Башкоммунводоканал». Согласно СанПиН 1.2.3685-21 нормативное значение БПКполн. для водоемов хозяйствственно-питьевого водопользования не должен превышать: – 3 мгO₂/ дм³, а ХПК – 5 мг/дм³. Во всех исследуемых образцах показатели ХПК превышали нормативное значение, а уровень БПКполн. незначительно превысило нормативное значение в водах родника Надежда (1,2 ПДК).

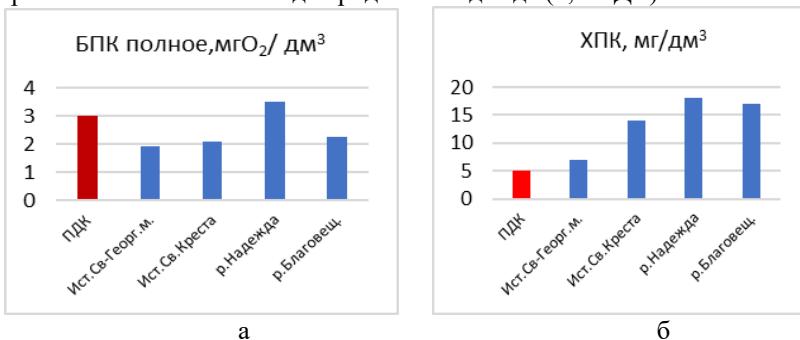


Рис 1. Показатели БПК полное и ХПК в анализируемых водах, май, 2025г.

Таким образом, в исследуемых образцах вод питьевого назначения присутствуют органические соединения, которые не подвергаются биохимическим реакциям. Для достижения уровня нормативных значений природные воды рекомендуется очищать физико-химическими методами очистки.

© Павлова Л.Р., 2025

УДК 556.04

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЗАЩИТНЫХ СВОЙСТВ ЗУБНЫХ
ПАСТ НА ОСНОВЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЕМИНЕРАЛИЗАЦИИ
ЭМАЛИ IN VITRO

Пономарев Э.Д.¹, Саттарова А.Ф.²

¹МАОУ «Башкирская гимназия № 102

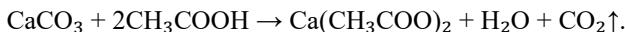
им. Рашиля Тухватовича Бикбаева», Уфа, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Зубная эмаль – это самое твердое вещество в организме человека, которое на 97% состоит из неорганических соединений, больше всего из гидроксиапатита кальция $\text{Ca}_{10}(\text{PO}_4)_6(\text{OH})_2$. Однако, она сильно подвержена разрушительному воздействию кислот, которые образуются в результате жизнедеятельности кариесогенных бактерий, которые питаются сахарами. Процесс, приводящий к вымыванию ионов кальция и фосфат ионов из кристаллической решетки гидроксиапатита, называется деминерализацией, что в конечном итоге приводит к образованию кариеса. Для предотвращения данного процесса используются зубные пасты, содержащие ряд активных компонентов, направленные на укрепление эмали и повышения устойчивости к кислотам.

Целью данного исследования стало сравнение эффективности защитных свойств пяти зубных паст: «Colgate», «Лесной бальзам», «Biogeraip», «Curgaprox» и «Splat» на модели скорлупы куриного яйца, состав которого подобен составу зубной эмали, и состоит из карбоната кальция.

Для эксперимента была использована классическая модель *in vitro*, где скорлупа куриного яйца служит аналогом зубной эмали. Были подготовлены 6 образцов яичной скорлупы примерно одинаковой площади. Пять образцов были обработаны густой суспензией соответствующих зубных паст на 10 часов, после чего высушены. Шестой образец использовался в качестве сравнения и не обрабатывался. Все образцы были помещены в идентичные объемы 9%-ного раствора уксусной кислоты (CH_3COOH). Фиксация времени начала реакции и полного разрушения скорлупы проводилась визуально и с помощью секундометра. Механизм реакции кислоты с карбонатом кальция скорлупы:



Растворение в сравнительном образце началось мгновенно, с интенсивным выделением пузырьков CO_2 . Полное разрушение наступило через 3 минуты. Это подтвердило высокую реакционную способность карбоната кальция в уксусной кислоте.

«Лесной бальзам» (с экстрактами коры дуба и пихты) проявила минимальный защитный эффект (5 минут), что объясняется тем, что

основными активными компонентами данной пасты являются фитокомплексы, обладающие противовоспалительным и вяжущим действием, но не формирующие устойчивого защитного барьера на поверхности скорлупы, препятствующего ионному обмену H^+ и Ca^{2+} .

«Colgate» (с фторидом натрия, NaF). Время разрушения увеличилось до 15 минут. Это объясняется образованием на поверхности скорлупы тонкой пленки фторида кальция (CaF_2) и, что более важно, проникновением ионов фтора с образованием фторапатита $Ca_{10}(PO_4)_6F_2$. Кристаллическая решетка фторапатита более устойчива к воздействию кислот, чем гидроксиапатит и карбонат кальция, что и обеспечило значительное замедление реакции. «Splat» (с гидроксиапатитом кальция и ферментами). Результат был сопоставим с «Colgate», разрушение составило примерно 16 минут. Заявленный в составе гидроксиапатит ($Ca_{10}(PO_4)_6(OH)_2$) является биомиметическим – его наночастицы способны заполнять микродефекты на поверхности скорлупы, создавая более плотный и менее проницаемый для кислоты слой.

«Curaprox» (с цитратом цинка и фторидом натрия) показал выраженный защитный эффект (22 минуты). Данная паста сочетает два механизма: реминерализующий (фторид натрия, как и в «Colgate») и антибактериальный (цинк). В условиях нашего эксперимента ионы цинка могли способствовать образованию более стабильного и прочного защитного слоя на поверхности, усиливая действие фтора.

«Biorgeraiр» (с технологией Micogegeraiр® – гидроксиапатит). Продемонстрировал наивысшую эффективность. Растворение началось лишь через 5 минут, а полное разрушение заняло 30 минут. Это можно объяснить тем, что используемый в пасте синтетический гидроксиапатит имеет размер частиц, близкий к биологическому. Благодаря этому он не просто создает барьер, а входит в кристаллическую решетку карбоната кальция, и значительно повышает химическую стойкость.

Результаты эксперимента были сведены в таблицу 1.

Таблица 1
Сопоставление времени разрушения скорлупы под воздействием
различных зубных паст

| Контрольный образец | Colgate | Лесной бальзам | Biorgeraiр | Curaprox | Splat |
|---------------------|---------|----------------|------------|----------|--------|
| 3 мин | 15 мин | 5 мин | 30 мин | 22 мин | 16 мин |

Проведенный эксперимент наглядно показал, что различные зубные пасты обеспечивают различную степень защиты от деминерализации благодаря принципиально разным химическим механизмам действия. Наиболее перспективными с точки зрения защиты эмали от кислот являются пасты, содержащие фториды и частицы гидроксиапатита, что подтверждается данными, полученными в ходе экспериментальной модели.

УДК 372.8

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЖЁСТКОСТИ ВОДЫ В СНТ «ЗДОРОВЬЕ»
ЧИШМИНСКОГО РАЙОНА РЕСПУБЛИКИ БАШКОРТОСТАН
МЕТОДОМ ТИТРОВАНИЯ

Сираев М.Д.², Тухватшин В.С.¹, Еремеева Ф.Н.²

¹Уфимский университет науки и технологий, г. Уфа, Россия

²Гимназия № 3 им. А.М. Горького, г. Уфа, Россия

В настоящее время одной из актуальных экологических проблемой является качество воды, в том числе и питьевой. По данным ВОЗ, около 90% всех инфекционных болезней в мире связано с неудовлетворительным качеством питьевой воды и нарушениями санитарно-гигиенических норм водоснабжения. Поэтому проблема контроля качества питьевой воды является серьёзной проблемой, что определяет актуальность работы. Оценивая воду на содержание минеральных солей, отдельно выделяют концентрацию в ней солей кальция (Ca^{2+}) и магния (Mg^{2+}), говоря о степени жесткости воды. Установлено, что в местностях с пониженным содержанием кальция в питьевой воде сердечные заболевания более распространены. В то же время употребление жесткой воды увеличивает опасность мочекаменной болезни, неблагоприятно влияет на состояние сосудов. Содержание солей кальция и магния в питьевой воде определяется, согласно нормам ГОСТа [1].

Цель работы: исследовать жесткость питьевой воды в СНТ «Здоровье» Чишминского района Республики Башкортостан методом титрования.

Задачи: 1. Изучить понятие жесткость, её влияние на живые организмы и механизмы, а также нормативные документы, определяющие требования к питьевой воде по этому показателю; 2. Провести отбор проб воды из разных скважин СНТ «Здоровье» Чишминского района Республики Башкортостан и определить жёсткость комплексонометрическим методом.

Объект исследования: вода разных скважин СНТ «Здоровье» Чишминского района Республики Башкортостан

Выводы по работе

По результатам химического анализа установлено, что жёсткость проб воды с четырёх разных скважин СНТ «Здоровье» Чишминского района Республики Башкортостан выше 10°Ж, поэтому вода относится к жёсткой, что не соответствует нормам СанПиН, такую воду пить не рекомендуется.

Литература

1. СанПиН 2.1.4.1074-01 Питьевая вода. Гигиенические требования к качеству воды централизованных систем питьевого водоснабжения. [Электронный ресурс] URL:<http://docs.cntd.ru/document/901798042>

© Сираев М.Д., Тухватшин В.С., Еремеева Ф.Н., 2025

УДК 541.14:547.551.2

ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ НАПИТКОВ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ОРГАНИЗМ

Сулейманова Э.А.¹, Гурбанов А.А.², Зайнулина Л.Ф.²

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Муниципальное автономное общеобразовательное учреждение
«Лицей № 5» городского округа город Уфа Республики Башкортостан

Энергетические напитки появились в 20 веке как ответ на потребность в быстром восстановлении энергии и улучшении работоспособности. Первые коммерчески успешные энергетики начали производиться в 1960-х годах, и с тех пор их популярность стремительно возросла. Энергетические напитки можно классифицировать по содержанию кофеина, сахара, витаминов и других активных компонентов. Существуют как безалкогольные, так и алкогольные варианты, а также натуральные и синтетические составы. Все энергетические напитки содержат сахарозу и глюкозу, которые являются основными источниками энергии для организма. Кроме того, в них присутствуют кофеин, L-карнитин и глюкуронолактон. Также добавляются консерванты, красители, ароматизаторы и другие химические компоненты. Этот «микс» можно найти в каждой банке энергетика.

Сравнительный анализ энергетических напитков на основе этикеток показывает, что они содержат схожие компоненты. Калорийность напитков составляет: «Adrenalin rush» - 54 ккал, «FLASH» - 50 ккал, «Red Bull» - 46 ккал. Все образцы имеют высокое содержание углеводов и содержат консерванты, красители и ароматизаторы. Наименьшее количество кофеина и таурина обнаружено в «FLASH». Аскорбиновая кислота присутствует в «Adrenalin rush» и «FLASH», а витамины указаны во всех напитках. Производители рекомендуют не употреблять их детям до 18 лет. Органолептические свойства энергетических напитков зависят от добавок и красителей. Было проведено определение pH среди энергетических напитков с помощью универсальной индикаторной бумаги. Каждый напиток был протестирован, и цвет индикаторной бумаги сравнивался со шкалой. Результаты показали, что pH всех образцов находится в диапазоне от 3 до 4, что указывает на высокую кислотность напитков. Это может быть связано с наличием аминокислот, аскорбиновой и угольной кислот. Нормальный уровень кислотности желудка составляет pH = 2,5, и его повышение может увеличить риск желудочно-кишечных заболеваний. После эксперимента с активированным углем было выявлено, что во всех образцах присутствует краситель. Основным тонизирующим веществом, входящими в состав энергетиков, является кофеин. Содержание кофеина

в энергетических напитках составляет от 280 до 320 мг/л, при рекомендуемом значении 150 мг в сутки. Поэтому необходимо учитывать суммарное суточное потребление кофеина (кофе, чай и другие кофеин содержащие напитки). Повышение предельной дозы негативно сказывается на состоянии сердечно - сосудистой и нервной систем.

Употребление энергетических напитков во время тренировок и при интенсивных физических нагрузках нежелательно, так как это может привести к повышению артериального давления и учащению пульса. Таурин, который содержится в этих напитках, синтезируется организмом в достаточном объеме, поэтому его добавление не имеет смысла. Избыточное количество витаминов в напитках также не принесет пользы для здоровья. Наилучший способ восстановления сил – это качественный отдых, оптимизация физических нагрузок и соблюдение режима сна и бодрствования.

В заключение, энергетические напитки, появившиеся в 20 веке, стали популярными благодаря своей способности быстро восстанавливать энергию и улучшать работоспособность. Однако их состав, включающий кофеин, сахар, консерванты и красители, вызывает серьезные опасения. Высокая кислотность и содержание кофеина могут негативно сказаться на здоровье, особенно при чрезмерном употреблении. Рекомендуется избегать их употребления детьми и при интенсивных физических нагрузках, так как это может привести к повышению артериального давления и другим проблемам со здоровьем. Вместо этого для восстановления сил лучше полагаться на качественный отдых и правильный режим.

Литература

1. Кукушкин Ю.Н. Химия вокруг нас: Справочное пособие. М.: Высшая школа, 1992.
2. Ахметов М.А. Пища с точки зрения химика. Ульяновск. 2002
3. Крупина Т.С. Пищевые добавки. М.: «Сирийпрема», 2006.

© Сулейманова Э.А., Гурбанов А.А., Зайнулина Л.Ф., 2025

УДК 577.1; 373.3

УГЛУБЛЕННОЕ МЕЖПРЕДМЕТНОЕ ИЗУЧЕНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ НА УРОКАХ ХИМИИ И БИОЛОГИИ

Сюльдина Ю.М.

МОБУ СОШ № 1, Белорецк, РБ, Россия

Задача учителя при изучении в 10-х классах органической химии и биологии - раскрыть основные законы химии биологически активных веществ, в частности, структуру и пространственную организацию белковых молекул, нуклеиновых кислот, углеводов, липидов, гормонов, биокатализаторов, изучить их свойства, классификацию и механизм

действия ферментов, основы химического синтеза и биосинтеза полимеров.

Обучающиеся должны усвоить основы биохимии кислородо- и азотсодержащих веществ, характерных для всех живых организмов, играющих определенную роль в процессах жизнедеятельности.

Для успешного усвоения программы и выполнения заданий ЕГЭ по биологии обучающиеся должны знать о роли витаминов и гормонов как биорегуляторов – соединений, которые химически контролируют обмен веществ.

Особое внимание при изучении школьного курса органической химии и биологии уделяется лабораторным работам: по биологии – «Исследование нуклеиновых кислот, выделенных из клеток различных организмов», «Изучение каталитической активности ферментов (амилазы, каталазы)», «Качественные реакции на белки (биуретовая и ксантопротеиновая)» и по химии - «Образование и гидролиз этилата натрия», «Обнаружение многоатомных спиртов», «Цветная реакция на фенол», «Синтез этилацетата» и другие практические работы. Более качественное изучение биологически активных веществ осуществляется в проектной деятельности, когда обучающийся всесторонне раскрывает те или иные аспекты.

Потребность в биологически активных веществах на современном этапе тесно связана с решением широкого круга проблем: производства лекарственных средств, продуктов питания и экологическим оздоровлением окружающей среды.

© Сюльдина Ю.М., 2025

УДК 54

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИРОДНЫХ ПИГМЕНТОВ, НАХОДЯЩИХСЯ В РАСТЕНИЯХ

Фазлыева А.Р., Фазлыева Г.З.

Муниципальное автономное образовательное учреждение
«Гимназия № 115» г. Уфы

В условиях растущей обеспокоенности экологической безопасностью синтетических красителей, которые являются токсичными веществами, возрастает актуальность поиска и исследования натуральных альтернатив. Природные пигменты растений, обладая биоразлагаемостью и довольно полезными для здоровья свойствами, представляют перспективные источники для замены синтетических красителей в различных отраслях, особенно пищевой, фармакологической, текстильной.

Цель исследования: комплексное изучение свойств основных групп растительных пигментов (хлорофилла, каротиноидов, антоцианов, бетанинов) и оценка возможности их практического применения.

В работе проведены экстракции пигментов из различных растений. Исследовано влияние pH среды, интенсивности освещения и присутствия ионов металлов на стабильность и окраску выделенных пигментов.

Рассмотрена возможность практического использования полученных экстрактов для окрашивания природных материалов на примере ткани и бумаги. Проведено разделение пигментов методом тонкослойной хроматографии.

Выявлено, что pH среды оказывает существенное влияние на цвет антоцианов и бетанинов, что позволяет использовать их в качестве индикаторов. Сделано предположение о реакции антоцианов с щелочью. Выявлена различная фотостабильность пигментов под воздействием света. Показано влияние ионов металлов на цвет пигментов, особенно антоцианов, которое можно использовать для получения разнообразных цветов. Изучена возможность успешного использования растительных экстрактов для окрашивания природных материалов, что открывает перспективы для использования экологически чистых технологий.

Результаты данного исследования подтверждают возможность использования растительных пигментов в качестве безопасной и экологически благоприятной замены синтетических красителей в пищевой, косметической, текстильной и других отраслях.

Проведенное исследование показывает многообразие свойств растительных пигментов и доказывает их потенциал для широкого применения как безопасных и устойчивых красителей, способствуя снижению негативного воздействия на окружающую среду и улучшению качества жизни.

Литература

1. Быкова Е., Физиология растений. Практикум. Методы определения пигментов. / М.: «Феникс», 2010. – 96.
2. Селиванов Е.В., Красители в биологии и медицине. – Барнаул: Азбука, 2003. – 40 с.
3. Кириллов Ю.И., и др. (2012). Природные красители пищевых продуктов. Пищевая Промышленность, (5), 22-25.

© Фазлыева А.Р., 2025

УДК 543.2

ИССЛЕДОВАНИЕ РОЛИ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ В УПАКОВКЕ ПРОДУКТОВ

Фархутдинова С.Д., Давлетшина К.А.
МАОУ «Лицей № 5», Уфа, Россия

Одной из ключевых задач пищевой промышленности является продление срока годности продуктов, особенно богатых жирами и ненасыщенными соединениями, подверженными окислению кислородом воздуха. Этот процесс приводит к изменению вкуса и снижению пищевой ценности. В промышленности для решения этой проблемы применяется метод упаковки в модифицированной атмосфере, в которой азот (N_2) – самый распространённый компонент. Азот относится к инертным газам:

он химически стабилен, не токсичен, недорог и не вступает в реакции при обычных условиях, что делает его идеальным для вытеснения кислорода из упаковки. Целью данной работы стало изучение влияния присутствия азота на сохранность пищевых продуктов, в частности чипсов.

В ходе эксперимента были взяты два одинаковых пакета чипсов одного производителя: один – вскрытый и оставленный открытым на 24 часа, второй – с сохранённой заводской упаковкой, наполненной азотом. По истечении суток проведена органолептическая оценка (вкус, запах, хрусткость). Также был поставлен демонстрационный опыт: в колбу с горящей свечой вводили углекислый газ и азот с помощью баллонов, чтобы показать, что азот, как и CO₂, подавляет горение, а значит, препятствует окислению.

Результаты показали, что чипсы в заводской упаковке сохранили свежесть и хрустящую структуру, тогда как открытые продукты стали мягче и приобрели посторонний запах – следствие окисления жиров кислородом воздуха. Это подтверждает, что азот вытесняет кислород из упаковки, замедляя окислительные процессы и рост микроорганизмов.

Азот выступает не как консервант в химическом смысле, а как барьерный газ, физически изолирующий продукт от кислорода. Это особенно важно для продуктов, содержащих ненасыщенные жирные кислоты, которые легко окисляются с участием кислорода по радикальному механизму. Полученные результаты наглядно иллюстрируют применение знаний о свойствах газов в быту и подчёркивают значение азота как элемента, входящего в состав множества биологически активных соединений.

Литература

1. Евстафьева Е.А., Куприянов М.А., Лисицын А.Б. Технология упаковки: вакуумирование или модифицированные газовые среды // Все о мясе. 2007. № 5. С. 32-33.
2. Хромова А.А., Акулова Л.Н. Химический анализ чипсов в лабораторных условиях: автореф. дис. хим. наук: М., 2023. 16 с.

© Фархутдинова С.Д., Давлетшина К.А., 2025

УДК 541.14:547.551.2

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПРИРОДНЫХ ИНДИКАТОРОВ И
РАЗРАБОТКА УЧЕБНОЙ РН-ШКАЛЫ ДЛЯ ШКОЛЬНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Федорищева А.А., Гильманов А.М., Ишмакаева Г.И., Ганеева Г.Х.

¹*МОБУ СОШ д. Тереклы, Архангельский р-н, Россия*

²*Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

В условиях школьного образования и ограниченного доступа к химическим реагентам особенно полезным становятся природные индикаторы, позволяющие проводить наглядные и безопасные эксперименты по определению pH сред. Они позволяют эффективно изучать тему кислотно-основного равновесия (pH).

В данной работе исследуется сравнительный анализ индикаторных свойств растительных экстрактов и разрабатывается pH-шкала для применения в школьной лаборатории. [1-2]. В ходе работы сравнили эффективности водных вытяжек краснокочанной капусты, черники и чая каркаде. Установили, что экстракт краснокочанной капусты обладает наиболее выраженными индикаторными свойствами – от розового в кислой среде до зеленого в щелочной. [3] Другие исследуемые индикаторы продемонстрировали ограниченную цветовую гамму. На основе полученных данных была разработана наглядная цветовая pH-шкала с четкими визуальными границами. Шкала прошла успешную апробацию на реальных объектах и подтвердила свою эффективность: газированная вода (pH 5), молоко (pH 6-7), яблочный сок (pH 4) и лимонная кислота (pH 2).

Результаты свидетельствуют о перспективе использования pH-шкалы на основе краснокочанной капусты в качестве универсального природного индикатора. А так же данная шкала отличается простотой изготовления, доступностью материалов и безопасностью использования в школьной лаборатории.

Литература

1. Скворцов, Д. Г. Использование природных индикаторов в школьном химическом эксперименте / Д. Г. Скворцов, О. В. Иванова // Химия в школе. – 2020. – № 5. – С. 45–52.
2. Петрова, А. Н. Натуральные индикаторы кислотности: учебное пособие для учащихся / А. Н. Петрова. – Москва: Просвещение, 2018. – 96 с.
3. Медведева, Е. В. Исследование антоцианов растительного происхождения как кислотно-основных индикаторов / Е. В. Медведева // Современные проблемы науки и образования. – 2019. – № 2. – С. 34–41.
4. Adams, M. R. Food additives and natural colorants / M. R. Adams, J. N. Smith // Journal of Food Science. – 2021. – Vol. 86, № 3. – P. 45–52.

© Федорищева А.А., Гильманов А.М., Ишмакаева Г.И.,
Ганеева Г.Х., 2025

УДК 373.3, 543.632.6

ВОЛШЕБНЫЙ ЙОД: КАК НАЙТИ КРАХМАЛ В НАШЕЙ ЕДЕ.

Хузина Л.Л.¹, Хузин А.А.², Дмитриенко Я.И.²

Башкирский государственный аграрный университет¹, Уфа, Россия

²МАОУ «Лицей № 58», Уфа, Россия

Мы решили стать детективами и узнать, в какой еде прячется крахмал. Для расследования мы взяли сырой и варёный картофель, яблочное пюре, которое сделала мама, покупное яблочное пюре для самых маленьких детей и специальный пищевой крахмал – белый порошок, который продается в магазин. Нашим главным помощником стал обычный аптечный йод. Все знают, что йодом мажут ранки, но он умеет кое-что ещё волшебное: он меняет цвет, когда встречается с крахмалом, и становится синим или фиолетовым!

Мы капнули йод на все наши образцы и стали ждать. Вот что у нас получилось:

Пищевой крахмал (белый порошок) показал самый главный фокус! Когда мы капнули на него йод, он моментально стал темно-синим, почти чёрным. Это был самый яркий цвет из всех! Этот опыт стал нашим контролем – мы теперь точно знали, как йод реагирует на чистый крахмал.

Сырой картофель сразу же стал ярко-синей! Это значит, что в нем очень-очень много крахмала. Он там спрятан в виде овальных крупных зерен.

Варёный картофель тоже посинел, но цвет был не таким ярким, больше фиолетовым. Оказалось, что, когда мы варим картофель, крупинки крахмала внутри нее набухают от горячей воды и лопаются, как воздушные шарики.

Домашнее яблочное пюре почти не изменило цвет. Может быть, появилось совсем слабое пятнышко. Мы узнали, что в самих яблоках крахмала очень мало, а когда мы их варим, чтобы сделать пюре, он и вовсе почти весь исчезает.

Самое большое удивление ждало нас с покупным детским яблочным пюре. Мы капнули йод, а никакого синего цвета не появилось! Совсем! Значит, крахмала там нет. Мы узнали, что производители специально разрушают весь крахмал, превращая его в сахар, который йод "не видит".

Мы узнали, что с помощью йода, можно найти крахмал в нашей еде и что во время приготовления пищи крахмал меняет свои свойства. Мы стали настоящими экспертами по крахмалу!

Литература

1. Нечаев А.П., Траубенберг С.Е., Кочеткова А.А. и др. Пищевая химия. – СПб.: Лань, 2017. – 672 с.

2. Стандарт ГОСТ Р 53959-2010 Пюре яблочное для детского питания.
Технические условия.

© Хузина Л.Л., Хузин А.А., Дмитриенко Я.И., 2025

УДК 543.3

ХИМИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ВОДЫ НА СОДЕРЖАНИЕ ТЯЖЁЛЫХ
МЕТАЛЛОВ В КАРЬЕРАХ БЕЛОРЕЦКОГО РАЙОНА

Черноусов А.А.¹, Давлеткиреева Я.Р.², Зайнуллина Л.Ф.²

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²МАОУ «Лицей № 5», Уфа, Россия

В работе проведена химическая оценка качества воды в заброшенных карьерах Белорецкого района (Карьер Галамит и Серменевские карьеры). Методами органолептического, физико-химического анализа и биотестирования установлено, что вода в обоих водоемах по органолептическим показателям соответствует норме. Выявлено наличие тяжелых металлов (свинец, железо, алюминий), а в Серменевских карьерах – повышенное содержание меди, хрома и хлоридов. Фитотоксичность воды из Серменевских карьеров оценена как слабая. Результаты свидетельствуют о потенциальной экологической опасности и необходимости мониторинга данных водоемов. Установлено, что вода в Серменевских карьерах характеризуется повышенной минерализацией, в частности, концентрация ионов Cu^{2+} составила 30 мг/л, что в 6 раз выше, чем в карьере Галамит (5 мг/л). Фитотоксичность воды из Серменевских карьеров составила 22,8%, что свидетельствует о слабом токсическом эффекте.

Результаты измерений в разных карьерах

| | Карьер Галамит | Серменевские карьеры |
|---|----------------|----------------------|
| pH | 7,4 | 7,8 |
| Жесткость | 2°Ж | 3°Ж |
| Ca^{2+} (определяется по жесткости) | 40,08 | 60,12 |
| Mg^{2+} в дм ³ (определяется по жесткости) | 24,3 | 36,45 |
| $CaCO_3$ в дм ³ воды (определяется по жесткости) | 100 | 150 |
| Общая щелочность | 0,000244 | 0,001159 |
| Хлорид ионы | 0,00025332 | 0,130853 |
| Температура воды | 10 | 0 |

| | | |
|--|----------|----------|
| Электрохимический потенциал | -84,7 | -73,1 |
| Датчик Ионметр | 1296,621 | 1350,093 |
| Концентрация сульфидов, мг/л | 0 | 10 |
| Концентрация катионов Cu ⁽²⁺⁾ , мг/л | 5 | 30 |
| Концентрация Cr ⁽⁶⁺⁾ в хроматах, мг/л | 3 | 3 |

Литература

- Горная энциклопедия, в 5 т. гл. ред. Е.А. Козловский. М. Изд-во «Советская энциклопедия». 1987.
- Воздействие на окружающую среду открытых горных разработок, Калиева К.Б., Ишкенов Б.Т., г. Актобе. 2017.
- Тяжёлые металлы в экосистемах. Медведев И.Ф. и Деревягин С.С., Саратов. 2017.

© Черноусов А.А., Давлеткиреева Я.Р., Зайнуллина Л.Ф., 2025

УДК 547

ПРИМЕНЕНИЕ ПОЛИКАПРОЛАКТОНА В ЗЕЛЕНОЙ ХИМИИ

Шабанов А.А.¹, Сунаргулов А.Б.², Бакирова Э.Р.²

¹МАОУ «Лицей № 5», Уфа, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Известно, что современный мир остро нуждается в экологически безопасных продуктах и материалах, соответствующих принципам устойчивого развития. Важнейшим элементом стратегии перехода к экономике замкнутого цикла является замена синтетических полимеров, произведённых из нефти, на биологически разлагающиеся аналоги. Среди них одним из наиболее востребованных является поликарболактон (ПКЛ). Уникальные свойства ПКЛ включают в себя: прочность, биосовместимость, способность к биоразложению, отсутствие токсичных эффектов, легкую перерабатываемость и т.д. [1].

Благодаря своим уникальным свойствам ПКЛ находит применение в самых разных отраслях – от медицины до производства потребительских товаров. В медицинской сфере его используют для создания шовных материалов, имплантатов, ортопедических конструкций и систем для пролонгированного высвобождения лекарственных препаратов. Способность к контролируемой биодеградации в организме и стимуляция клеточного роста делают ПКЛ перспективным материалом для тканевой инженерии и регенеративной медицины. В сфере упаковки ПКЛ служит экологичной альтернативой традиционным пластикам: из него

производят биоразлагаемые пакеты, плёнки и контейнеры для хранения овощей, фруктов и другой сельскохозяйственной продукции, что способствует снижению нагрузки на экосистемы. Кроме того, на основе ПКЛ создают композиционные материалы для производства мебели и предметов интерьера, сочетающие прочность с простотой утилизации, что особенно ценно [2].

Использование ПКЛ открывает новые горизонты для зелёной химии и экономики замкнутого цикла. Дальнейшее изучение и разработка инновационных технологий помогут преодолеть существующие барьеры и обеспечить стабильное будущее для последующих поколений [3].

Литература

1. Anjum F.A., Khan M.S., Al-Harrasi A. Green chemistry approaches towards environmental sustainability: From waste management to clean technologies. *Chemical Reviews.* – 2020. – V. 120. – N. 13. – P. 6244-6296.
2. Suksomboon N., Srinivasan M.V., Shekhar V. Bio-based plastics and their role in reducing plastic pollution. *Environmental Pollution.* – 2021. – V. 274.
3. Kumar A., Singh R., Tiwari U.C. Eco-friendly strategies for polycaprolactone synthesis and its applications. *Materials Today Communications.* – 2022. – V. 32.

© Шабанов А.А., Сунарголов А.Б., Бакирова Э.Р., 2025

УДК 613.26:612.392.72:546.175

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ НИТРАТОВ В ОВОЩАХ И ФРУКТАХ

Шаймухаметова Н.И., Ахмадуллина Л.Р.

МБОУ Гимназия с. Чекмагуш, Чекмагуш, Россия

Всё больше людей в современном мире стараются вести здоровый образ жизни: занимаются спортом, соблюдают правильное питание. Важную роль в правильном питании играют овощи и фрукты, которые доступны на полках магазинов круглый год. У покупателей часто возникает вопрос о качестве продуктов. В случаях неправильного выращивания продуктов, хранения и приготовления, их полезные свойства минимизируются или исчезают вовсе, и зачастую появляются различные токсины, в том числе, нитраты. Нитраты всегда есть в растительной продукции независимо от действий человека. Образуются в процессе роста, а также после применения азотных удобрений. В малых дозах нитраты безвредны, однако при систематическом употреблении они накапливаются в организме и оказывают вредное или смертельное воздействие [1].

Цель настоящей работы заключалась в определении содержания нитратов в овощах и фруктах, сравнение его с нормами предельно-допустимых концентраций (ПДК).

Для анализа были отобраны часто употребляемые населением фрукты и овощи, поставляемые фирмами в торговые сети «Магнит», «Монетка», «Пятёрочка» села Чекмагуш и собственного приусадебного участка. Исследование проводилось экспресс-методом оценки нитратов в овощах и фруктах в быту прибором «СОЭКС-ЭКОВИЗОР F4», откалиброванным по содержанию нитрат-ионов

Результат экспресс-анализа выдаётся нитрат-тестером в виде концентрации нитрат-ионов и сравнения её с предельно-допустимой концентрацией для измеряемого продукта.

По результатам измерений содержание нитратов в большинстве продуктов не превышали ПДК. Но в некоторых овощах и фруктах содержание нитратов очень высокое. Продукция с повышенным содержанием нитратов перед употреблением должна пройти специальную обработку во избежание возникновения различных патологий.

Литература

1. Обухова А.В., Харина Г.В. Проблема аккумуляции нитратов в овощах и фруктах. – Екатеринбург: Материалы VI Международной научно-практической конференции преподавателей, молодых учёных и студентов, 2023. – С. 243.

© Шаймухаметова Н.И., Ахмадуллина Л.Р., 2025

УДК 547.458.88

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ЯБЛОЧНОГО ПЕКТИНА С КВАРЦЕТИНОМ

Шихмуратова Р.Р.¹, Гизитдинова Л.С.², Ямансарова Э.Т.³

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Муниципальное автономное общеобразовательное учреждение
«Лицей № 5», Уфа, Россия

³Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Эффективность усвоения медикаментов и витаминных комплексов тесно связана с их растворимостью в средах организма. Многие флавоноиды, используемые в лечебных целях, характеризуются плохой растворимостью в физиологических жидкостях, что приводит к их низкой биодоступности.

Из-за этого важной задачей является исследование методов повышения их биодоступности. Одним из подходов к решению этой проблемы является создание соединений природных полисахаридов, особенно с флавоноидами.

Целью данной работы является изучение процесса адсорбции кверцетина пектином из водно-этанольных растворов.

Объектами исследования являлись яблочный пектин со степенью этерификации 58% и молекулярной массой 26000 Da и кверцетин марки ХЧ производства Chemapolc чистотой 97%.

Взаимодействие пектина и кверцетина было изучено на примере адсорбционных моделей, варьируя концентрацию кверцетина в растворе, pH среды, время взаимодействия и температуру.

Из формы графика на рис.1 определено, что в интервале концентраций кверцетина 0–5 мг/мл кислотность среды не оказывает влияние на взаимодействие с пектином.

Установлено из рис.2 и рис.3, что получение комплексов кверцетина с яблочным пектином следует проводить при комнатной температуре в течение 15–20 минут.

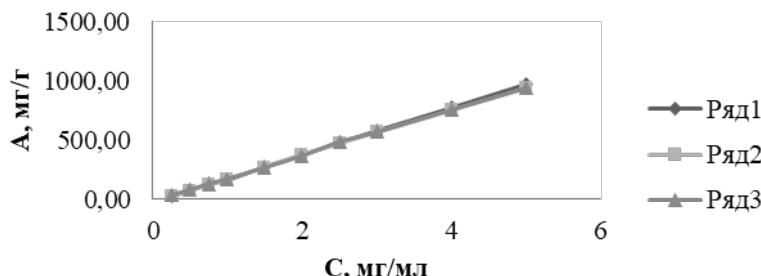


Рис. 1. Изотерма адсорбции кверцетина пектином при концентрации и разных pH 4,45; 6,86 и 9,18.

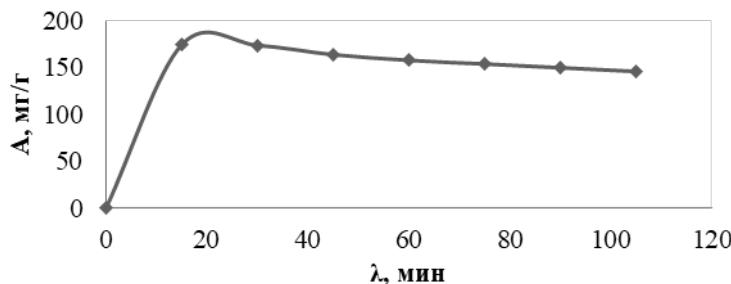


Рис. 2. Зависимость адсорбции кверцетина пектином от времени

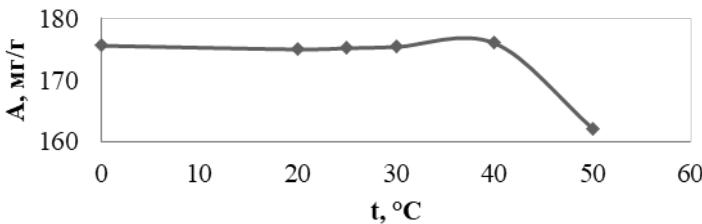


Рис. 3. Зависимость адсорбции кверцетина пектином от температуры

Литература

- Сычев И. А., Калингина О.В., Лаксаева Е. А. / биологическая активность растительных полисахаридов / Рязанский государственный медицинский университет имени академика И. П. Павлова. 2009.
- Коссиор Л. А., Караваева А. В., Ананьевна Е. П. // Четвертый Международный съезд «Актуальные проблемы создания новых лекарственных препаратов природного происхождения», Великий Новгород, 29 июня – 1 июля 2000 г.: Материалы съезда. СПб., 2000. 168–172 г.
- Садовой, В. В. Разработка технологии пищевой добавки, обогащенной флавоноидами / В. В. Садовой, А. А. Аралина, Т. В. Щедрина // Известия высших учебных заведений. Пищевая технология. 2015. № 1(343). С. 31-34.

© Шихмуратова Р.Р., Гизитдинова Л.С., Ямансарова Э.Т., 2025

УДК 541.64

ДИФУЗИОННЫЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ПЕКТИНА

Шуршина С.А.¹, Сачков А.Г.¹, Шуршина А.С.²

¹ МАОУ Школа № 110, Уфа, Россия

² Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Разработка новых полимерных материалов для лечения ран различной этиологии привлекает внимание исследователей ввиду необходимости повышения эффективности терапевтических процедур и сокращения сроков регенерации тканей. Полимерные пленки используются как перспективные раневые покрытия, поскольку они способны защищать повреждённую область от внешних факторов, минимизировать риск инфицирования, обладают лучшей адгезией к поверхности кожи, эластичностью и способностью создавать благоприятную влажную среду для заживления.

Одним из методов регулирования транспортных свойств полимерных материалов является разработка методов управления структурой

полимера в растворе. Самым распространенным способом изменения уровня структурообразования в растворах является регулирование природы растворителя, за счет использования модифицирующих добавок или сорасторителей. В данной работе в качестве таких сорасторителей использовались спирты – этанол и глицерин. В качестве полимера-основы – пектин.

В ходе выполнения изучения высвобождения антибиотика цефазолина из пленок на основе пектина было показано, что, варьируя природу вводимого сорасторителя можно в широком диапазоне управлять скоростью высвобождения антибиотика из пленок. Установлено, что введение сорасторителя глицерина приводит к уменьшению скорости выхода цефазолина из пектиновых пленок. При этом, чем больше сорасторителя вводится, тем сильнее наблюдаемый эффект.

В случае использования в качестве сорасторителя этанола наблюдается противоположная ситуация. А именно, введение сорасторителя этанола приводит к ускорению высвобождения цефазолина из пектиновых пленок.

Таким образом, в ходе проведения исследования обнаружено, что природа вводимого сорасторителя влияет на диффузационные свойства пленок на основе пектина.

© Шуршина С.А., Сачков А.Г., Шуршина А.С., 2025

СОДЕРЖАНИЕ
Пленарные доклады

| | |
|--|----|
| ЗАМЕЩЕННЫЕ МОЧЕВИНЫ И ИХ ИЗОСТЕРИЧЕСКИЕ АНАЛОГИ – ПЕРСПЕКТИВНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ Бутов Г.М..... | 3 |
| БЕНЗОКСАЗЕПИНЫ И БЕНЗОКСАЗОЦИНЫ: СПОСОБЫ ПОЛУЧЕНИЯ, БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫЕ ПРЕДСТАВИТЕЛИ, СТРУКТУРНАЯ И ПРОСТРАНСТВЕННАЯ ИЗОМЕРИЯ Гатаулин Р.Р. | 4 |
| ВОДОРАСТВОРIMЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ФУЛЛЕРена: ДИЗАЙН, СИНТЕЗ И ПРИМЕНЕНИЕ В БИОМЕДИЦИНЕ И ФОТОВОЛЬТАИКЕ Краевая О.А., Большакова В. С., Перегудов А.С., Зарубаев В.В., Костюк С.В., Шестаков А.Ф., Трошин П.А..... | 5 |
| КСАНТИНЫ КАК ОСНОВА ДЛЯ СОЗДАНИЯ ЛЕКАРСТВ К НОВЫМ МИШЕНЯМ Халиуллин Ф.А..... | 6 |
| ВЛИЯНИЕ ХИМИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ НА ФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ ОРГАНИЧЕСКОЙ ЭЛЕКТРОНИКИ Юсупов А.Р. | 8 |
| <i>Секция I</i> | |
| СИНТЕЗ 3-АЦИЛ-2-ГЕТАРИЛХРОМОНОВ С НИТРОКСИЛЬНЫМИ ЗАМЕСТИТЕЛЯМИ Аgliulin K.B., Stepanov A.B., Яровенко B.N., Краюшкин M.M., Третьяков E.B..... | 9 |
| СИНТЕЗ N1-(4-ХЛОРБЕНЗИЛ)-N1-(ФУРАН-2-ИЛМЕТИЛ)-N3,N3- ДИМЕТИЛПРОПАН-1,3-ДИАМИНА И ПРЕДСКАЗАНИЕ ЕГО АНТИ- БАКТЕРИАЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ Акимова Е.С., Султанова Р.М. | 10 |
| СИНТЕЗ 3-(5,6-ДИМЕТИЛ-1Н-БЕНЗИМИДАЗОЛ--1-ИЛ)- ПРОПАН-1,2-ДИОЛА. Акимова К.А., Цикалов В.В., Баевский М.Ю. | 11 |

| | |
|--|----|
| СИНТЕЗ И МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРРОЛИДИНА – ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ИНГИБИТОРОВ ЯНУС- КИНАЗЫ JAK1 | |
| Алмазова А.В., Кострюков С.Г. | 12 |
| ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ α -АЗИДОКЕТОНОВ И ЦИАНТИОАЦЕТАМИДА | |
| Ачмиз Р.Г., Левашов А.С., Доценко В.В. | 15 |
| СИНТЕЗ ЗАМЕЩЕННЫХ 1,2,3 ТРИАЗОЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ТЕТРАФЕНИЛЭТИНИЛОЛОВА | |
| Ачмиз Р.Г., Левашов А.С., Доценко В.В. | 16 |
| СИНТЕЗ АДДУКТА НА ОСНОВЕ ФУЛЛЕРЕНА И НОРАДРЕНАЛИНА ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАЗВУКА | |
| Байкова Р.А., Кинзябаева З.С., Сабиров Д.Ш. | 17 |
| СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРАЗОЛИНА НА ОСНОВЕ 1,4-ДИВИНИЛБЕНЗОЛА, АКТИВИРОВАННОГО НИТРИЛЬНЫМИ ГРУППАМИ | |
| Безрукова Е.В., Черноярова А.О., Калязин В.А., Кострюков С.Г. | 18 |
| СИНТЕЗ α,β -НЕПРЕДЕЛЬНЫХ КЕТОНОВ СОДЕРЖАЩИХ 1,3-ДИОКСАНОВЫЙ ФРАГМЕНТ | |
| И ИХ СЕЛЕКТИВНОЕ ВОССТАНОВЛЕНИЕ | |
| Березняк Я.С., Султанова Р.М. | 19 |
| ПОДБОР УСЛОВИЙ КОНДЕНСАЦИИ 6-СТИРИЛ-4- АРИЛДИГИДРОИРИМИДИН-2-ОНОВ С ПИРОГАЛЛОЛОМ | |
| Богданова Н.А., Макарушко Е.Н., Чиркова Ж.В. | 20 |
| 4-(ПРОПАРГИЛТИО)СИДНОНИМИНЫ: СИНТЕЗ И РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ В РЕАКЦИЯХ | |
| АЗИД-АЛКИНОВОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ | |
| Брыксин Д.Н., Черепанов И.А. | 21 |

| | |
|--|----|
| ДИАСТЕРЕОСЕЛЕКТИВНОЕ ВОССТАНОВИТЕЛЬНОЕ АМИНИРОВАНИЕ 2-ЦИКЛОГЕКСЕНИЛЦИКЛОГЕКСАНОНА Важенин Б.В., Голованов А.А., Соков С.А..... | 23 |
| СЕЛЕКТИВНЫЙ СИНТЕЗ И ОПТИМИЗАЦИЯ УСЛОВИЙ ПОЛУЧЕНИЯ 3 β -ГИДРОКСИ-17-[3-(ПИРИДИН-2-ИЛ)-ПРОП-2-ЕН-1-ОН]-ХОЛЛОНГДИОНА Галимова З.И., Фатхутдинова Р.В., Валиуллин И.Ф., Миннибаева Э.М., Смирнова И.Е..... | 25 |
| НОВЫЕ РЕГУЛЯТОРЫ РОСТА РАСТЕНИЙ – ПРОИЗВОДНЫЕ ЭТИЛЕНДИМОЧЕВИНЫ (EDU) Гармай Г.А., Ощепков М.С., Быстрова Н.А., Кочетков К.А..... | 26 |
| СИНТЕЗ КОНДЕНСИРОВАННЫХ БИЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ, СОДЕРЖАЩИХ ФРАГМЕНТЫ γ -ЛАКТАМА И ОКСАЗОЛИДИНА Германенко Н.О., Хабибрахманова А.М., Миргалимова А.И., Шайхулова А.А., Курбангалиева А.Р..... | 28 |
| СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ (\pm)-САЛЬСОЛИДИНА С ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ПРОТИВООГУХОЛЕВОЙ АКТИВНОСТЬЮ Гильмутдинов А.Р., Ковальская А.В., Цыпышева И.П..... | 29 |
| ПРИМЕНЕНИЕ ДИАЗОКЕТОНА С СУКЦИНИМИДНЫМ ФРАГМЕНТОМ В СИНТЕЗЕ 3,4,5-ТРИЗАМЕЩЕНОГО 1 Н-ПИРАЗОЛА Гиндуллина Г.М., Сахаутдинов И.М..... | 31 |
| ПОЛУЧЕНИЕ 3,4,5-ТРИЗАМЕЩЕННЫХ 1Н-ПИРАЗОЛОВ ИЗ 2,3-АЛЛЕНОАТОВ, СОДЕРЖАЩИХ ПИРРОЛИДИНДИОНОВЫЙ ФРАГМЕНТ Гиндуллина Г.М., Сахаутдинов И.М..... | 33 |
| ПОЛУЧЕНИЕ N-АРИЛ-С-ФОСФОНОАЦЕТАМИДИНОВ НА ОСНОВЕ МЕТОКСИЗАМЕЩЁННЫХ АРИЛАМИНОВ И ДИМЕТИЛ-2-(N-АЛКИЛИМИНО)ЭТЕНИЛФОСФОНАТОВ Головко А.И., Свинцицкая Н.И..... | 34 |

| | |
|---|----|
| СИНТЕЗ ОКТАГИДРО-2Н-ХРОМЕНОВ, СОДЕРЖАЩИХ ИМИДАЗОЛЬНЫЙ ФРАГМЕНТ – ПЕРСПЕКТИВНЫХ ГИПОТЕРМИЧЕСКИХ АГЕНТОВ Головченко Д.Д., Ли-Жуланов Н.С..... | 35 |
| 2-АМИНОФУРАН-3,4-ДИКАРБОКСИЛАТЫ: СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И БИОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА Гомонов К.А., Пелипко В.В., Макаренко С.В..... | 37 |
| МОНОТИОМАЛОНДИАНИЛИД В СИНТЕЗЕ НОВЫХ ЧАСТИЧНО НАСЫЩЕНЫХ НИКОТИНАМИДОВ Горниченко Р.Н., Курочкин И.О., Доценко В.В., Аксенов Н.А..... | 38 |
| ПЕРЕАМИНИРОВАНИЕ 3-ДИМЕТИЛАМИНОМЕТИЛЕН-4- (ТИО)ОКСОХРОМЕН-2-ОНОВ 1,2,4-ТРИАЗОЛ-3-АМИНОМ: СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНЫЙ СИНТЕЗ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МЕХАНИЗМА. Гребенникова В.А, Мажукина А.О..... | 39 |
| СИНТЕЗ НОВЫХ ГУАНИДИНОВ НА ОСНОВЕ N-ЗАМЕЩЕННЫХ 6-АМИНО-7-ГИДРОКСИ-2,2,4-ТРИМЕТИЛ-1,2,3,4- ТЕТРАГИДРОХИНОЛИНОВ Грибанова Я.А., Потапов А.Ю..... | 41 |
| НОВЫЙ МЕТОД СИНТЕЗА ПРОИЗВОДНЫХ БИС(ПИРИД-2-ИЛ)ДИСУЛЬФИДА Дахно П.Г., Доценко В.В..... | 42 |
| СИНТЕЗ НОВЫХ ОЛЕАННОВЫХ α -ГИДРОКСИЭПОКСИДОВ Елхов И.А., Толмачева И.А., Гришко В.В..... | 44 |
| НОВЫЙ СПОСОБ ХЛОРАЦЕТИЛИРОВАНИЯ 3- МЕТОКСИФЕНОЛА Жураева М.Ш., Чориев А.У., Абдушукуров А.К..... | 45 |

| | |
|--|----|
| ПРОИЗВОДНЫЕ 4,5-ДИХЛОР-2-(4-ГИДРОКСИ-3,5-ДИ- ИЗОПРОПИЛБЕНЗИЛИДЕН)ЦИКЛОПЕНТ-4-ЕН-1,3-ДИОНА С АМИНОКИСЛОТАМИ | |
| Исхакова Э.Р., Хасанова Л.С., Егоров В.А., Миннибаева Э.М..... | 46 |
| СИНТЕЗ ГАММА-ГИДРОКСИАЦЕТИЛЕНКЕТОНОВ И ИХ ПРЕВРАЩЕНИЯ В УСЛОВИЯХ СУПЕРЭЛЕКТРОФИЛЬНОЙ АКТИВАЦИИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ СИЛЬНЫХ КИСЛОТ БРЕНСЕДА | |
| Каляев М.В. | 47 |
| ВНУТРИМОЛЕКУЛЯРНАЯ КОНДЕНСАЦИЯ ЗАМЕЩЕННЫХ ПИРРОЛИДИНОВ КАК СПОСОБ СИНТЕЗА КАРКАСНЫХ БИЦИКЛОВ. | |
| Калязин В.А., Царев Д.С., Безрукова Е.В., Кострюков С.Г..... | 49 |
| КОНДЕНСАЦИЯ 2-R-[1,2,4]ТРИАЗОЛО[1,5-А]ПИРИМИДИН-6- КАРБАЛЬДЕГИДОВ С 3-R1-РОДАНИНАМИ | |
| Карелина К.О., Потапов А.Ю., Вандышев Д.Ю., Шихалиев Х.С..... | 51 |
| СИНТЕЗ АМИНОКИСЛОТНЫХ КОНЬЮГАТОВ 18β-ГЛИЦИРРЕТИНОВОЙ КИСЛОТЫ СПЕЙСЕРНОГО ТИПА | |
| Каримова Э.Р., Шарафутдинов Р.Р., Балтина Л.А..... | 53 |
| АМИДЫ 2,5-ПИРАЗИНДИКАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ В СИНТЕЗЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ПИНЦЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ Pd(II) | |
| Катранова А.Ю., Алексанян Д.В..... | 54 |
| СИНТЕЗ И ХОЛИНЭСТЕРАЗНАЯ АКТИВНОСТЬ ДИЭТОКСИФОСФОРИЛ-ПРОИЗВОДНОГО 2,3-ИНДОЛО-ОЛЕАНОЛОВОЙ КИСЛОТЫ | |
| Керимова А.В..... | 57 |
| СИНТЕЗ НОВЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ ИЗ N-(ХЛОРАЦЕТИЛ)ПРОИЗВОДНЫХ ФЕНОТИАЗИНА И ДИФЕНИЛАМИНА | |
| Киндоп Вл.К., Дисюк В.А., Киндоп В.К., Доценко В.В., Беспалов А.В..... | 58 |

| | |
|--|----|
| ТРАНСФОРМАЦИЯ МЕТИЛЕНОВОЙ ГРУППЫ ПРОИЗВОДНЫХ 10-УНДЕЦЕНОВОЙ КИСЛОТЫ ВО ВТОРИЧНЫЕ СПИРТЫ РЕАКЦИЕЙ ЭПОКСИДИРОВАНИЯ И ГИДРИДНОГО ВОССАНОВЛЕНИЯ | |
| Коваленко А.А., Праздничных Р.В., Выдрина В.А., Яковлева М.П., Ишмуратов Г.Ю..... | 59 |
| ОКИСЛЕНИЕ α -ГИНЕНА ПРОМЫШЛЕННО ДОСТУПНЫМ ПРЕПАРАТОМ НУК-15 | |
| Коваленко А.А., Мухачев К.Е., Выдрина В.А., Яковлева М.П., Ишмуратов Г.Ю..... | 60 |
| ТРЁХКОМПОНЕНТНЫЙ СИНТЕЗ ПОЛИЗАМЕЩЁННЫХ СПИРОИНДОЛИНОПИРРОЛИЗИДИНКАРБОНИТРИЛОВ И СПИРОИНДОЛИНОПИРРОЛИЗИДИНОНОВ | |
| Кочуков А.С., Сорокин В.В., Давыдов Н.И., Плотников Н.А., Возягин Д.П., Оприщенко Н.В., Борисова С.В., Семченко О.Н..... | 61 |
| СИНТЕЗ 1,2,3,4-ТЕТРАГИДРОПИРИДИНОВ НА ОСНОВЕ 3-[(2-ПРОПИЛСУЛЬФАНИЛ)МЕТИЛ]ПЕНТАН-2,4-ДИОНА И АНИЛИНОВ | |
| Кузнецова А.Н., Нугуманов Р.М., Баева Л.А..... | 62 |
| СИНТЕЗ 4-[(АЛКИСУЛЬФАНИЛ)МЕТИЛ]-1Н-ПИРАЗОЛОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ МИКРОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ | |
| Кузнецова А.Н., Нугуманов Р.М., Баева Л.А..... | 63 |
| СИНТЕЗ 4-[(2-ПРОПИЛСУЛЬФАНИЛ)МЕТИЛ]-5-ФЕНИЛ-3- (ТРИФТОРМЕТИЛ)-1Н-ПИРАЗОЛОВ НА ОСНОВЕ 1-ФЕНИЛ-4,4,4-ТРИФТОРБУТАН-1,3-ДИОНА | |
| Кузнецова А.Н., Бикташева Л.Ф., Баева Л.А..... | 65 |
| СИНТЕЗ НОВЫХ ЗАМЕЩЁННЫХ СПИРО[ПИРРОЛО[3,2,1- ij]ХИНОЛИН-1,2'-[1,3,4]ТИАДИАЗОЛ]-2-ОНОВ С ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ПРОТИВОРАКОВОЙ АКТИВНОСТЬЮ | |
| Лаптеев Д.Д., Медведева С.М., Шихалиев Х.С. | 66 |

| | |
|---|----|
| РЕАКЦИЯ ОКСИМЕТИЛИРОВАНИЯ В РЯДУ ПРОИЗВОДНЫХ 2-АМИНО-N-(ФЕНИЛ)-2-ТИОКСОАЦЕТОГИДРАЗОНОИЛЦИАНИДА | 67 |
| Левченко А.Г., Решетникова А.А., Дахно П.Г., Доценко В.В..... | |
| 2-(ХЛОРМЕТИЛ)ПИРИДО[3',2':4,5]ТИЕНО[3,2-D]ПИРИМИДИН-4(3Н)- ОНЫ КАК АЛКИЛИРУЮЩИЕ РЕАГЕНТЫ ДЛЯ СИНТЕЗА | |
| ТИЕНО[2,3-В]ПИРИДИНОВ | |
| Маркелевич Д.Ю., Доценко В.В..... | 68 |
| КОНДЕНСАЦИЯ 1,2-ФЕНИЛЕНДИАМИНА С МЕТАКРИЛОВОЙ КИСЛОТОЙ | |
| Махунова А.В., Баевский М.Ю., Чупахина Т.А..... | 70 |
| СИНТЕЗ АЦЕТАЛЕЙ НА ОСНОВЕ | |
| 2,2-ДИБРОММЕТИЛ-1,3-ПРОПАНДИОЛА | |
| Мусин А.И., Шарифов М.Х, Борисова Ю.Г.. | 71 |
| СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И РЕАКЦИИ [3+2]-ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ БИС-ТИОЭФИРОВ 5-ПРОПАРГИЛОКСИ-2(5Н)-ФУРАНОНА | |
| Никифорова Д.Д., Сайгитбаталова Е.Ш., Герасимова Д.П., | |
| Лодочникова О.А., Курбангалиева А.Р..... | 72 |
| СИНТЕЗ И АНТИБАКТЕРИАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ | |
| ПИРИДИЛЗАМЕЩЕННЫХ АМИНОХРОМЕНКАРБОНИТРИЛОВ | |
| И ХРОМЕНОПИРИМИДИНОНОВ НА ИХ ОСНОВЕ | |
| Никулин А.В., Астанкова А.С. Кривенько А.П., Бурыгин Г.Л..... | 73 |
| РАЗРАБОТКА МЕТОДА СИНТЕЗА НОВЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, НЕСУЩИХ ФРАГМЕНТЫ ФТОРХИНОЛОНА | |
| И 2(5Н)-ФУРАНОНА | |
| Новикова Ю.В., Латыпова Л.З., Курбангалиева А.Р..... | 74 |
| ПОЛУЧЕНИЕ АМИДОВ 3,5-ДИНИТРОБЕНЗОЙНОЙ КИСЛОТЫ | |
| Норкина Д.Д., Путис С.М..... | 75 |
| ПОЛУЧЕНИЕ НЕОЖИДАННОГО ПРОДУКТА ЦИКЛИЗАЦИИ ПРИ | |
| ИЗЧЕНИИ РЕАКЦИИ АЦИЛИРОВАНИЯ N-ЗАМЕЩЕННЫХ | |
| 4Н-ТИЕНО[3.2-В]ПИРРОЛ-5-КАРБОКСИЛАТОВ | |
| Торосян С.А., Нуриахметова З.Ф., Гималова Ф.А..... | 77 |

| | |
|--|----|
| ТЕТРАГИДРОФУРАНОЛ-3 В РЕАКЦИИ МАННИХА С ЦИКЛИЧЕСКИМИ АМИНАМИ | |
| Охиров Ш.М., Валитова Р.С., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф..... | 78 |
| [3+3]-ЦИКЛОКОНДЕНСАЦИЯ β -КАРБОНИЛЗАМЕЩЕННЫХ 4Н-ХРОМЕНОВ С α -АМИНО-NH-АЗОЛАМИ | |
| Парфенов К.В., Осипов Д.В., Осянин В.А., Красников П.Е..... | 80 |
| СИНТЕЗ N6- α -АЗИДОАЦЕТИЛСИДНОНИМИНОВ И ИХ РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ В РЕАКЦИЯХ АЗИД-АЛКИНОВОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ | |
| Платонов И.А., Калганова Н.В. | 81 |
| АСИММЕТРИЧЕСКОЕ ВОССТАНОВЛЕНИЕ 2-, 3-, 4 АЦЕТИЛПИРИДИНОВ, КАТАЛИЗИРУЕМОЕ PETROSELINUM CRISPUM | |
| Привалов Н.В., Чанышева А.Р., Зорин В.В..... | 83 |
| РЕАКЦИИ АНГЕЛИКА ЛАКТОНОВ С АРЕНАМИ В ТРИФТОРМЕТАНСУЛЬФОНОВОЙ КИСЛОТЕ | |
| Пузанов А.И..... | 85 |
| ПЕРСУЛЬФАТНОЕ ОКСИЛЕНИЕ 2-БРОМПИРИДИНА | |
| Рашитова Л.Ш., Латыпова А.А., Хазимуллина Ю.З..... | 86 |
| СИНТЕЗ И СВОЙСТВА НОВЫХ N-(ГИДРОКСИАЛКИЛ)ТИОАКРИЛАМИДОВ | |
| Решетникова А.А., Левченко А.Г., Доценко В.В..... | 87 |
| СИНТЕЗ 1-ИЗОПРОПИЛ-2-ФОРМИЛ-5-ХЛОР-1Н-БЕНЗИМИДАЗОЛА, КАК ТЕМПЛАТА ДЛЯ СОЗДАНИЯ ПОЛИЯДЕРНЫХ КЛАСТЕРОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ | |
| Решетъко М.А. А.В. Баевский М.Ю., Чупахина Т.А. | 89 |
| ОДНОРЕАКТОРНЫЙ ОЗОНОЛИТИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ ТОЗИЛ И N- АЦИЛ ПРИЗВОДНЫХ ОПТИЧЕСКИ ЧИСТОГО (3R)- | |
| ГИДРОКСИНОНАНАЛЯ ИЗ (R)-(+) -РИЦИНОЛЕВОЙ КИСЛОТЫ | |
| Сайтов К.М., Яковлева М.П., Назаров И.С., Ишмуратов Г.Ю..... | 90 |

| | |
|---|-----|
| ОЗОНОЛИЗ Н-ТОЗИЛ-2-(ЦИКЛОАЛК-2-ЕНИЛ)АНИЛИНОВ Сафаргалин Р.Р., Гатауллин Р.Р. | 91 |
| СИНТЕЗ ФУРАНОВОГО АНАЛОГА ДУБИАМИНА ИЗ 5- ГИДРОКСИМЕТИЛФУРФУРОЛА Сахаутдинова Г.Ф., Маннанов Т.А., Сахаутдинов И.М. | 93 |
| СИНТЕЗ ФУРАНСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРРОЛО[2,1- А]ИЗОХИНОЛИНОВ НА ОСНОВЕ ФОСФОРАНИЛИДЕНСУКЦИНИМИДА Сахаутдинова Г.Ф., Сахаутдинов И.М., Маннанов Т.А., Мустафин А.Г. | 94 |
| ЕСТЬ ЛИ СВЯЗЬ МЕЖДУ ЦИТОТОКСИЧЕСКОЙ И ПРОТИВОМАЛЯРИЙНОЙ АКТИВНОСТЬЮ ДЛЯ АНАЛОГОВ АРТЕМИЗИНИНА Семаков А.В., Пухов С.А., Глоба А.А. | 96 |
| ИЗУЧЕНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ С ДНК КАТИОННЫХ КОМПЛЕКСОВ ФЕРРОЦЕНА Сипиева А.С. | 97 |
| СИНТЕЗ И ПРОТИВОВИРУСНАЯ АКТИВНОСТЬ 1,2,3-ТРИАЗОЛИЛ- СВЯЗАННОГО ГЛИКОКОНЬЮГАТА АРТЕСУНОВОЙ КИСЛОТЫ Смирнова А.А., Третьякова Е.В. | 98 |
| СИНТЕЗ МЕРОТЕРПЕНОВ, СОДЕРЖАЩИХ ФРАГМЕНТ 1,2-НАФТОХИНОНА, НА ОСНОВЕ ЛЕВОПИМАРОВОЙ КИСЛОТЫ Смыслова А.М., Немтарев А.В., Миронов В.Ф. | 99 |
| СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 2-ПИРИДОНА С ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ПРОТИВОВИРУСНОЙ АКТИВНОСТЬЮ Сорокина В.А., Ковальская А.В., Цыпышева И.П. | 100 |
| НОВЫЕ ОКСАТИАМАКРОЦИКЛЫ НА ОСНОВЕ 2(5H)-ФУРАНОНА И ДИТИОЛА: СИНТЕЗ, СТРОЕНИЕ И РЕАКЦИИ ОКИСЛЕНИЯ Тимербаева Г.Р., Раббаниева Э.С., Герасимова Д.П., Чембулатова М.А. | 102 |

| | |
|---|-----|
| СИНТЕЗ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ Р- и As СОЛЕЙ, СОДЕРЖАЩИХ АЛКИЛОКСИПРОПИЛЬНЫЙ ФРАГМЕНТ – МОДИФИКАТОРОВ ЛИПИДНЫХ СИСТЕМ | |
| Титов Е.А., Немтарев А.В., Паширова Т.Н., Миронов В.Ф..... | 103 |
| УСТАНОВЛЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ДОБАВОК ПОРИСТОГО УГЛЕРОДСОДЕРЖАЩЕГО МАТЕРИАЛА НА СЕЛЕКТИВНОСТЬ ОБРАЗОВАНИЯ 4,4-ДИМЕТИЛДИОКСАНА-1,3 ИЗ 2-МЕТИЛПРОПЕНА | |
| Тухватшин В.С., Кузнецов В.А., Исмагилов Р.Р., Фаттахов А.Х., Вакулин И.В., Талипов Р.Ф..... | 104 |
| СИНТЕЗ δ-ЛАКТОНОВ НА ОСНОВЕ ЛЕВОГЛЮКОЗЕНОНА | |
| Улмасбаева З.А., Халилова Ю.А., Файзуллина Л.Х..... | 105 |
| МОДИФИКАЦИЯ 6-СТИРИЛДИГИДРОПИРИМИДИНОНОВ ПО С-5 ПОЛОЖЕНИЮ | |
| Урядова А.М., Макарова Е.С., Филимонов С.И..... | 107 |
| СИНТЕЗ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ЛИГАНДОВ И ИХ КОМПЛЕКСОВ С ЦИРКОНИЕМ ДЛЯ ПРОМЫШЛЕННОЙ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ | |
| Федотова Е.А., Отвагин В.Ф., Федоров А.Ю..... | 109 |
| СИНТЕЗ СЕМИКАРАБАЗОНА ЦИАНУРОВОЙ КИСЛОТЫ | |
| Хабеева А.Н., Лендеяева Д.А., Карасева И.Н., Попова Ю.В..... | 110 |
| ОКИСЛЕНИЕ ЦИКЛОГЕКСАНОНОВ РЕАГЕНТОМ НУК-15 ПО БАЙЕРУ-ВИЛЛИГЕРУ | |
| Хаирова Э.Ф., Миннибаева Э.М., Коваленко А.А., Выдрина В.А., Яковлева М.П..... | 111 |
| 6-АЦЕТИЛ-1,1,2,4,4,7-ГЕГСАМЕТИЛТЕТРАЛИН В СИНТЕЗЕ НОВЫХ ФОСФОНИЛИРОВАННЫХ ТИАЗОЛО[3,2-а]ПИРИМИДИНОВ | |
| Хворов В.Н., Скрылькова А.С., Егоров Д.М..... | 112 |
| СИНТЕЗ 3-МЕТИЛ-1Н-2-ОКСА-4А,9-ДИАЗОФЛУОРЕНА | |
| Цикалов В.В., Чалова Е.С., Цикалова В.Н., Поддубов А.И . | 113 |

| | |
|--|-----|
| СИНТЕЗ РЯДА БЕНЗИМИДАЗОЛОВ НА ОСНОВЕ ФЕНОКСИУКСУСНЫХ КИСЛОТ | |
| Цикалова В.Н., Гусейнова У.Р., Баевский М.Ю., Поддубов А.И..... | 114 |
| | |
| СИНТЕЗ И ПРОТИВОГРИБКОВЫЕ СВОЙСТВА ТЕТРАЗОЛИЛСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ РЯДА 2(5Н)-ФУРАНОНА И 3-ПИРРОЛИН-2-ОНА | |
| Чарушин Н.С., Сайгитбаталова Е.Ш., Колышкина С.В., Латыпова Л.З., Дымов К.А., Каюмов А.Р., Курбангалиева А.Р..... | 115 |
| | |
| СИНТЕЗ 3-АМИНО-4,6-ДИАРИЛФУРО[2,3- <i>b</i>]ПИРИДИН-2- КАРБОКСАМИДОВ | |
| Шитиков Н.В., Строганова Т.А., Василин В.К..... | 117 |
| | |
| РЕАКЦИИ S-АЛКИЛИРОВАНИЯ 2-ОКСО-1-(2-ОКСОИНДОЛИН-3- ИЛИДЕН)-2-ФЕНИЛЭТАН-1-ТИОЛАТА ТРИЭТИЛАММОНИЯ | |
| Шраменко В.В., Беспалов А.В., Доценко В.В..... | 118 |
| | |
| СИНТЕЗ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ ТЕТРАЛИНОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЕМ 2-АРИЛЦИКЛОСОРБИЛ-1,1- ДИКАРБОКСИЛАТОВ С АРОМАТИЧЕСКИМИ АЛЬДЕГИДАМИ ПОД ДЕЙСТВИЕМ TaCl ₅ | |
| Юлбарисов А.Б., Зосим Т.П., Кадикова Р.Н., Рамазанов И.Р..... | 119 |
| | |
| АРИЛИРОВАНИЕ АЛИФАТИЧЕСКИХ АЛЬДЕГИДОВ ПОД ДЕЙСТВИЕМ СИСТЕМЫ РЕАГЕНТОВ TaCl ₅ -Mg | |
| Юлбарисов А.Б., Габдуллин А.М., Кадикова Р.Н., Мозговой О.С., Рамазанов И.Р..... | 120 |
| | |
| Та-КАТАЛИЗИРУЕМОЕ АМИДИРОВАНИЕ ОДНООСНОВНЫХ КАРБОНОВЫХ КИСЛОТ С ПОМОЩЬЮ ФУНКЦИОНАЛЬНО ЗАМЕЩЕННЫХ ПЕРВИЧНЫХ АРОМАТИЧЕСКИХ АМИНОВ | |
| Юлбарисов А.Б., Габдуллин А.М., Кадикова Р.Н., Мозговой О.С., Рамазанов И.Р..... | 121 |

Секция II

| | |
|--|-----|
| СОЗДАНИЕ ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНОГО СЕНСОРА НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНО ИМПРИНТИРОВАННОГО ПОЛИПИРРОЛА ДЛЯ АНАЛИЗА ЭНАНТИОМЕРОВ КЛОПИДОГРЕЛА Абдуллин Я.Р., Перфилова Ю.А., Назыров М.И., Умутбаев Н.С..... | 123 |
| КИСЛОТНО-АКТИВИРОВАННОЕ ВОЛОКНО ФИБРОИНА, С ИММОБИЛИЗОВАННЫМ НА НЁМ ФЕРРОНОМ, РАЗРАБОТАНО В КАЧЕСТВЕ ОПТИЧЕСКОГО СЕНСОРА ДЛЯ ИОНОВ ЖЕЛЕЗА Авазязов М.А., Аширов М.А..... | 124 |
| ПРОГНОЗИРОВАНИЕ БАРЬЕРНЫХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ Алдошина Д.Д., Лифанова Е.Г., Лифанов А.Д. | 126 |
| ПРИМЕНЕНИЕ УГЛЕРОДНЫХ ТОЧЕК ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИОНОВ МЕТАЛЛОВ Алламбергенова Ф.Р., Сманова З.А., Ахмадов У.Н., Адилова М.Х., Кутлимуротова Н.Х. | 128 |
| ВЛИЯНИЕ УСЛОВИЙ СУШКИ НА СВОЙСТВА КРИОСТРУКТУРИРОВАННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СМЕСЕЙ НАТРИЕВЫХ СОЛЕЙ N-СУКЦИНИЛХИТОЗАНА И КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ Алмаев Б.Ф., Базунова М.В..... | 130 |
| СОРБЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ СОРБЕНТОВ НА ОСНОВЕ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ К ИОНАМ ЛИТИЯ Ахмедова У.Р., Кутлимуротова Н.Х..... | 131 |
| КИНЕТИЧЕСКИЕ И АКТИВАЦИОННЫЕ ПАРАМЕТРЫ РЕАКЦИИ ОЗОНА С 5,6-ДИМЕТИЛУРАЦИЛОМ Бадретдинова Ю.И..... | 134 |

| | |
|---|-----|
| ВЛИЯНИЕ ОКСИДА ЦИНКА И ХИТОЗАНА НА ПОКАЗАТЕЛЬ ТЕКУЧЕСТИ РАСПЛАВА КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА И ПОЛИКАПРОЛАКТОНА Бакирова Э.Р., Сунаргулов А.Б., Кулиш Е.И..... | 135 |
| ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ АТОМА ГАЛОГЕНА И МЕЗО-ЗАМЕСТИТЕЛЯ НА СПЕКТРАЛЬНЫЕ, ГЕНЕРАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА И СТАБИЛЬНОСТЬ КОНЪЮГАТОВ BODIPY С МОНОТЕРПЕНОИДАМИ Белякова Е.Ю., Еремеева Ю.В., Лапшина Е.Н., Гусева Г.Б., Антина Е.В..... | 136 |
| ВЛИЯНИЕ ЧИСЛА АТОМОВ Li НА СОРБЦИОННЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ГРАФЕНА Блохина А.Н., Крылова К.А..... | 138 |
| КОЛОРИМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР ИОНОВ Zn ²⁺ НА ОСНОВЕ ОКТАМИТИЛЗАМЕЩЕННОГО 3,3'-БИС(ДИПИРРОМЕТЕНА) Бочаров П.С., Бумагина Н.А., Антина Е.В..... | 140 |
| ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ АДСОРБЦИИ 4-АМИНО-3,5,6-ТРИХЛОРПИРИДИН-2-КАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ НА АКТИВИРОВАННОМ УГЛЕ Булкин С.А., Шарифуллина Л.Р..... | 141 |
| ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ ЯЗЫК ДЛЯ КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА ПРЕПАРАТОВ ТИМОЛОЛА Булышева Е.О., Зильберг Р.А..... | 143 |
| ВОЛЬТАМПЕРРОМЕТРИЧЕСКАЯ СЕНСОРНАЯ СИСТЕМА НА ОСНОВЕ ПАСТОВЫХ ЭЛЕКТРОДОВ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ КОМПЛЕКСНЫМИ СОЕДИНЕНИЯМИ НИКЕЛЯ (II), ДЛЯ КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА ПРЕПАРАТОВ АТЕНОЛОЛА Волкова А.А., Терес Ю.Б., Зильберг Р.А..... | 144 |
| МОДИФИКАЦИЯ ПОЛИЭФИРНЫХ КОМПОЗИТОВ АЗОТ- И СЕРЕБРОСОДЕРЖАЩИМИ БИОЦИДНЫМИ ДОБАВКАМИ: ОЦЕНКА АНТИМИКРОБНЫХ СВОЙСТВ Габдуллина Э.Р., Фараизов И.И., Тимофеев В.П., Ковшов А.Ю., Латыпова Э.Р..... | 146 |

| | |
|--|-----|
| ВЛИЯНИЕ АЗОТ- И МЕДЬСОДЕРЖАЩИХ БИОЦИДНЫХ ДОБАВОК НА АНТИМИКРОБНЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИЭФИРНЫХ КОМПОЗИТОВ | |
| Габдуллина Э.Р., Фараизов И.И., Тимофеев В.П., Ковшов А.Ю., Латыпова Э.Р..... | 148 |
| РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ОЗОНА ПО ОТНОШЕНИЮ К НЕКОТОРЫМ ПРОИЗВОДНЫМ ПУРИНА | |
| Гималетдинова Э.Р..... | 149 |
| ПРИМЕНЕНИЕ ФЕНТОН-ПОДОБНЫХ СИСТЕМ ДЛЯ РЕШЕНИЯ ПРОБЛЕМ ДЕТОКСИКАЦИИ ОРГАНИЧЕСКИХ ЗАГРЯЗНИТЕЛЕЙ ПРОМЫШЛЕННЫХ СТОЧНЫХ ВОД | |
| Женисова Д.Т., Сафаров Р.З..... | 150 |
| ЭКОЛОГИЧНЫЕ ПРОТИВОИЗНОСНЫЕ ДОБАВКИ ДЛЯ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА И БИОДИЗЕЛЯ | |
| Замахина К.Д., Раскильдина Г.З., Нелькенбаум К.С..... | 153 |
| КОМПОЗИТНЫЙ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР ДЛЯ РАСПОЗНАВАНИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ МЕТИОНИНА НА ОСНОВЕ ХИРАЛЬНОГО БОРОФОСФАТА МЕДИ С ОТКРЫТОЙ КАРКАСНОЙ СТРУКТУРОЙ И НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА | |
| Зекиева А.Ф., Булышева Е.О., Зильберг Р.А..... | 155 |
| ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХИРАЛЬНОГО РАСПОЗНАВАНИЯ ЦЕОЛИТОПОДОБНОГО МАТЕРИАЛА БОРОФОСФАТА АММОНИЯ $(\text{NH}_4)_4[\text{H}_2\text{B}_2\text{P}_4\text{O}_{16}]$ | |
| Изибаева Д.В., Нуретдинова А.Ш., Утеева Ж.Д..... | 157 |
| ИССЛЕДОВАНИЕ ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНОСТИ ЦЕОЛИТОПОДОБНОГО МАТЕРИАЛА БОРОФОСФАТА АММОНИЯ $(\text{NH}_4)_4[\text{H}_2\text{B}_2\text{P}_4\text{O}_{16}]$ НА ПРИМЕРЕ α -ПИНЕНА | |
| Изибаева Д.В., Нуретдинова А.Ш., Утеева Ж.Д..... | 158 |
| СЕНСОРНАЯ ПЛАТФОРМА НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСА Ni(II) ДЛЯ РАСПОЗНАВАНИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ НАПРОКСЕНА | |
| Ишмакаева Г.И., Мухаметдинов Ч.Р., Зильберг Р.А..... | 159 |

| | |
|---|-----|
| ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОСТРАНСТВЕННОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛ ИНДОМЕТАЦИНА В РАЗЛИЧНЫХ СРЕДАХ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МЕТОДА NOESY | |
| Ковалев А.Е., Белов К.В., Ходов И.А..... | 161 |
| ВЛИЯНИЕ ДОБАВОК НА ХЕМИЛЮМИНЕСЦЕНЦИЮ ПРИ ЛАККАЗНОМ ОКИСЛЕНИИ ТРЕХАТОМНЫХ ФЕНОЛОВ | |
| Кравченко Е. М., Одарюк И. Д., Дорошкевич В.С..... | 163 |
| ПРОИЗВОДСТВО ДВУХКОМПОНЕНТНОЙ ГРУНТОВКИ НА ПОЛИУРЕТАНОВОЙ ОСНОВЕ В РАМКАХ ИМПОРТОЗАМЕЩЕНИЯ: ОТ ВЫЗОВА К ВОЗМОЖНОСТИ | |
| Красникова А.В., Тимофеев В.П., Ковшов А.Ю..... | 165 |
| РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ НИЗКО- И ВЫСОКОМЕТОКСИЛИРОВАННОГО ПЕКТИНОВ И ДИГИДРАЗИДОВ ДИКАРБОНОВЫХ КИСЛОТ | |
| Лежнина В.О., Исканьярова Р.Г., Сагитова А.Ф., Мингалеева Г.Р..... | 167 |
| УСТАНОВЛЕНИЕ СТРУКТУРНЫХ ФАКТОРОВ, ОПРЕДЕЛЯЮЩИХ ТЕМ-ПЕРАТУРУ КИПЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ | |
| Лифанов А.Д., Лифанова Е.Г..... | 170 |
| ПРИМЕНЕНИЕ МАССИВА ПЬЕЗОСЕНСОРОВ ДЛЯ ЭКСПРЕСС- ОПРЕДЕЛЕНИЯ СВОБОДНЫХ ЛЕГКОЛЕТУЧИХ КОМПОНЕНТОВ В ПИЩЕВЫХ ПРОДУКТАХ | |
| Лифанова Е.Г., Лифанов А.Д | 172 |
| ОРГАНИЧЕСКИЙ РЕАГЕНТ ЦИНКОН И ЕГО ИК-СПЕКТРЫ | |
| Мадаминова К.Н., Аширов М.А..... | 174 |
| ВОЗМОЖНОСТЬ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МЕТИЛОВОГО ЭФИРА ЭПОКСИДИРОВАННОГО СОЕВОГО МАСЛА В КАЧЕСТВЕ ПЛАСТИФИКАТОРА ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА | |
| Мазина Л.А., Нафикова Р.Ф., Закиева А.И., Ахметханов Р.М..... | 176 |
| 2-ЦИАНО-Н'-ФЕНИЛАЦЕТОГИДРАЗИДА КАК ИНГИБИТОР СВОБОДНОРАДИКАЛЬНОГО ОКИСЛЕНИЯ КИСЛОРОДСОДЕРЖАЩИХ СУБСТРАТОВ | |
| Мигранов А.Р., Якупова Л.Р., Грабовский С.А., Сафиуллин Р.Л..... | 177 |

| | |
|--|-----|
| МГК-АНАЛИЗ ВРЕМЕННОЙ СЕПАРАЦИИ ЭКСТРАКЦИИ САПОНИНОВ ИЗ РАСТИТЕЛЬНОГО СЫРЬЯ | |
| Мигранова В.Р., Сидельников А.В..... | 178 |
| СОРБЦИОННОЕ ИЗВЛЕЧЕНИЕ ИОНОВ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ ГИДРОГЕЛЕМ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ И ПОЛИАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ | |
| Минко К.Д., Лакиза Н.В..... | 180 |
| СОРБЦИОННОЕ ИЗВЛЕЧЕНИЕ ИОНОВ ТЯЖЕЛЫХ МЕТАЛЛОВ ГИДРОГЕЛЕМ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ И ПОЛИАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ | |
| Минко К.Д., Лакиза Н.В..... | 182 |
| ИНТЕРПРЕТАЦИЯ НЕТРИВИАЛЬНОГО ПРОДУКТА ПЕРЕГРУППИРОВКИ БЕКМАНА МЕТОДОМ ЯМР- СПЕКТРОСКОПИИ | |
| Мосалёв П.О., Охиров Ш.М., Латыпова Э.Р., Лобов А.Н., Талипов Р.Ф..... | 184 |
| СИНТЕЗ И РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ИОННЫХ ГИДРОГЕЛЕЙ ХИТОЗАНА С 5-НОРБОРНЕН-2,3-ДИКАРБОНОВОЙ КИСЛОТОЙ | |
| Муфтахов В.В., Мулюкова С.М., Королев И.Н., Мингалеев В.З..... | 185 |
| ИДЕНТИФИКАЦИЯ МИНЕРАЛЬНЫХ ВОД МУЛЬТИСЕНСОРНОЙ СИСТЕМОЙ ТИПА «ЭЛЕКТРОННЫЙ ЯЗЫК» | |
| Мухаметдинов Ч.Р., Зильберг Р.А., Ишмакаева Г.И..... | 187 |
| ДИЗАЙН И МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НОВЫХ ИНГИБИТО-РОВ КОРОНАВИРУСА SARS-COV-2 | |
| Никитина К.Ю., Лифанова Е.Г., Лифанов А.Д..... | 189 |
| ВЛИЯНИЕ СПОСОБА ДЕГИДРАТАЦИИ СОРБЕНТОВ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ НА КИНЕТИКУ СОРБЦИИ ИОНОВ СВИНЦА (II) | |
| Никитина М.М., Лакиза Н.В., Алтер Е.Д., Гоцуленко А.О..... | 191 |
| ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХИРАЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ ЦЕОЛИТОПОДОБНОГО МАТЕРИАЛА $(\text{NH}_4)_4[\text{H}_2\text{B}_2\text{P}_4\text{O}_{16}]$ | |
| Нуретдинова А.Ш., Мансурова Э.Р., Утеева Ж.Д..... | 193 |

| | |
|---|-----|
| ИНГИБИТОРЫ КИСЛОТНОЙ КОРРОЗИИ НА ОСНОВЕ ГЕТЕРОСОЕДИНЕНИЙ Нухова В.Х., Смольникова О.Г..... | 194 |
| СОСТАВ, КОНСТАНТЫ УСТОЙЧИВОСТИ И ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ ПРОЦЕССА КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ α - β - И γ -ЦИКЛОДЕКСТРИНОВ С АЦЕТАМИНОФЕНОМ Огнева А.С., Чернобровкина В.И..... | 196 |
| АЛКАЛОИДЫ РАСТЕНИЯ <i>RINDERA CYCLODONTA</i> Олимова Х.Н., Курбанов У.Х., Нигматуллаев А., Тургунов К.К., Мукаррамов Н.И..... | 197 |
| ИЗУЧЕНИЕ ТЕРМОДИНАМИКИ РЕАКЦИИ ПОЛУЧЕНИЯ ЦИКЛИЧЕСКИХ АЦЕТАЛЕЙ Пономарева А.С., Карасева И.Н., Попова Ю.В., Востриков С.В..... | 199 |
| ЗЕЛЁНЫЙ СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДА КОБАЛЬТА (II, III) Ражабова Ш.Р., Кутлимуратова Н.Х..... | 200 |
| ИЗУЧЕНИЕ ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ СОЗДАНИЯ ОПТИЧЕСКИ ЧУВСТВИТЕЛЬНОГО СЛОЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИОНОВ МЕТАЛЛОВ ПУТЕМ ИММОБИЛИЗАЦИИ РЕАГЕНТА ТИРОНА НА ФИЛЬТРОВАЛЬНОЙ БУМАГЕ Сабиров Н.Ш., Аширов М.А., Палванов Н.С..... | 202 |
| СТАБИЛИЗАЦИЯ КОМПОЗИТНЫХ СОСТАВОВ, СОДЕРЖАЩИХ ОГНЕСТОЙСКИЕ ДОБАВКИ С НИЗКОЙ СТЕПЕНЬЮ ТЕРМОСТАБИЛЬНОСТИ, ВЛИЯЮЩИХ НА ВРЕМЯ ЖЕЛАТИНИЗАЦИИ СОСТАВОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭФИРНЫХ СМОЛ Сагадеева Р.Р., Тимофеев В.П., Ковшов А.Ю..... | 204 |
| ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ ДЛЯ ПРОГНОЗИРОВАНИЯ РАСТВОРИМОСТИ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ Сафина А.А., Лифанова Е.Г., Лифанов А.Д..... | 206 |
| СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ ДИСПЕРГИРОВАННЫХ СИСТЕМ НА ОСНОВЕ НАНОУГЛЕРОДНОГО МАТЕРИАЛА Севостьянов Д.В., Сундеткалиев Д.Б., Рамазанова А.В., Фатхиев Т.И., Мустафин И.А., Ханов А.Р..... | 208 |

| | |
|---|-----|
| СЕДИМЕНТАЦИОННАЯ УСТОЙЧИВОСТЬ ПОЛИМЕР-КОЛЛОИДНЫХ ДИСПЕРСИЙ НА ОСНОВЕ N-СУКЦИНИЛХИТОЗАНА И ЧАСТИЦ ЙОДИДА СЕРЕБРА | |
| Соснина Д.А., Базунова М.В..... | 210 |
| ВЛИЯНИЕ ФТАЛАЗОЛА И ХИТОЗАНА НА ПОКАЗАТЕЛЬ ТЕКУЧЕСТИ РАСПЛАВА КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА И ПОЛИКАПРОЛАКТОНА | |
| Сунаргулов А.Б., Бакирова Э.Р., Кулиш Е.И..... | 212 |
| МЕТОД ПОЛУЧЕНИЯ НАНОУГЛЕРОДА НА НИКЕЛЬСОДЕРЖАЩЕМ КАТАЛИЗАТОРЕ | |
| Сундеткалиев Д.Б., Рамазанова А.В., Фатхиев Т.И., Мустафин И.А., Ханов А.Р..... | 214 |
| ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНЫЕ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ, МОДИФИЦИРОВАННЫЕ КОМПЛЕКСАМИ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С ХИРАЛЬНЫМИ ЛИГАНДАМИ ПРИРОДНОГО И СИНТЕТИЧЕСКОГО ПРОИСХОЖДЕНИЯ | |
| Терес Ю.Б., Волкова А.А., Зильберг Р.А..... | 216 |
| ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЛИЧЕСТВЕННОГО СОДЕРЖАНИЯ КОФЕИНА В ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ НАПИТКАХ МЕТОДОМ УФ-СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ | |
| Гайнуллина Ю.Ю., Фаздалова И.Р..... | 218 |
| ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЛИЧЕСТВЕННОГО СОДЕРЖАНИЯ ТАУРИНА В ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ НАПИТКАХ МЕТОДОМ УФ-СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ | |
| Гайнуллина Ю.Ю., Фаздалова И.Р..... | 219 |
| СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЙ КОМПЛЕКС 5-ГИДРОКСИ-1,3,6-ТРИМЕТИЛУРАЦИЛА С ЯНТАРНОЙ КИСЛОТОЙ И ЕГО БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ | |
| Фазлыева Л.А..... | 220 |
| ВЛИЯНИЕ ДИАМЕТРА ПОР СИНТЕТИЧЕСКИХ ЦЕОЛИТОВ НА ЭНЕРГИЮ СТАБИЛИЗАЦИИ ФОРМИРОВАНИЯ ПЕРЕХОДНОГО СОСТОЯНИЯ В РЕАКЦИИ ПЕРЕГРУППИРОВКИ АЗА-КЛЯЙЗЕНА | |
| Фахретдинов Д.Ш., Валитова Р.С., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф..... | 221 |

| | |
|---|-----|
| КАТАЛИЗ УЛЬТРАДИСПЕРСНЫХ (НАНОРАЗМЕРНЫХ) МЕТАЛЛСОДЕРЖАЩИХ СУСПЕНЗИЙ ПРИ ПЕРЕРАБОТКЕ НЕФТИ Храмцова Л.А., Судакова О.М., Корнилова А.А., Мустафин А.Г., Галиахметов Р.Н..... | 223 |
| КАТАЛИТИЧЕСКИЕ ПРЕВРАЩЕНИЯ ВАКУУМНОГО ГАЗОЙЛЯ В ПРИСУТСТВИИ МЕТАЛЛОГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ Храмцова Л.А., Судакова О.М., Мустафин А.Г., Галиахметов Р.Н..... | 225 |
| ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ РАСТВОРОВ АСФАЛЬТЕНОВ МЕТОДАМИ ИК- И ИМПЕДАНСНОЙ СПЕКТРОСКОПИИ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ ХЕМОМЕТРИКИ К.А. Храмцова, А.Х. Бикмеева, Д.И. Дубровский, Д.М. Бикмеев..... | 227 |
| ФОРМИРОВАНИЕ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ КОМПЛЕКСОВ ГИДРАЗИДА ИЗОНИКОТИНОВОЙ КИСЛОТЫ С α -, β - И γ -ЦИКЛОДЕКСТРИНАМИ Чернобровкина В.И., Огнева А.С. | 228 |
| АНТИОКИСЛИТЕЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ 10Н-ФЕНОТИАЗИНА В РЕАКЦИИ ИНИЦИИРОВАННОГО ОКИСЛЕНИЯ ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА Шараева К.С..... | 229 |
| АНТИОКСИДАНТНАЯ АКТИВНОСТЬ 10Н-ФЕНОТИАЗИН-2- КАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ НА ПРИМЕРЕ МОДЕЛЬНОЙ РЕАКЦИИ РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОГО ОКИСЛЕНИЯ ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА Шараева К.С..... | 230 |
| АЗОТСОДЕРЖАЩИЕ ПРОДУКТЫ ТРАНСФОРМАЦИИ ЦИКЛОГЕКСАНОНА КАК ИНГИБИТОРЫ РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОГО ОКИСЛЕНИЯ ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА Шараева К.С., Охиров Ш.М., Латыпова Э.Р..... | 231 |
| КИНЕТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ N-(10Н-ФЕНОТИАЗИН-2-ИЛ- МЕТИЛ)ОКТАНАМИДА В РЕАКЦИИ РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОГО ОКИСЛЕНИЯ ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА Шараева К.С..... | 233 |

| | |
|--|-----|
| РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ ПРОИЗВОДНЫХ ФЕНОТИАЗИНА В КАЧЕСТВЕ ИНГИБИТОРОВ ОКИСЛЕНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ | |
| Шараева К.С..... | 234 |
| <i>Секция III</i> | |
| МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ПРОИЗВОДНЫХ 3,4-ДИГИДРОПИРИМИДИН-2-ОНА С АКТИВНЫМ ЦЕНТРОМ ИЗОФОРМ ЦИКЛООКСИГЕНАЗ (ЦОГ-1 И ЦОГ-2) | |
| Андреев Д.А., Максимов Л.С., Хайруллина В.Р..... | 235 |
| ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ УРОВНИ НОМО-LUMO АНТРАЦЕНА И АДДУКТОВ НА ЕГО ОСНОВЕ | |
| Гарифуллин М.Ф., Саттарова А.Ф., Корнилов Д.А..... | 237 |
| ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ ИНГИБИТОРЫ ОНКОГЕНЕЗА НА ОСНОВЕ АМИДОВ С ГАЛОГЕНФЕНИЛЗАМЕЩЕННЫМИ ФРАГМЕНТАМИ | |
| Гладких Б.П., Бутов Г.М. | 239 |
| КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ ВЗАИМОСВЯЗИ СТРУКТУРЫ И АКТИВНОСТИ ИНГИБИТОРОВ 15-ЛИПОКСИГЕНАЗЫ | |
| Максимов Л.С., Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р..... | 240 |
| МАШИННЫЙ ПОИСК ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ АНТИКОАГУЛЯНТОВ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ | |
| 3,4-ДИГИДРОПИРИМИДИН-2-ТИОНА | |
| Максимов Л.С., Хайруллина В.Р..... | 241 |
| КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ ЗАВИСИМОСТЕЙ СТРУКТУРЫ И АКТИВНОСТИ ИНГИБИТОРОВ ЦИКЛООКСИГЕНАЗЫ-2 НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ДИАРИЛГЕТЕРОЦИКЛОВ | |
| Максимов Л.С., Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р..... | 242 |
| ПОТЕНЦИАЛЬНО АКТИВНЫЕ ИНГИБИТОРЫ ЛАНОСТЕРОЛ 14А-ДЕМЕТИЛАЗЫ <i>SACCHAROMYCES CEREVISIAE</i> СРЕДИ | |
| НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 3,4-ДИГИДРОПИРИМИДИН-2-ОНА И 3,4-ДИГИДРОПИРИМИДИН-2-ТИОНА | |
| Максимов Л.С., Мулаева С.А., Хамитова Г.М., Гимадиева А.Р..... | 243 |

Секция IV

| | |
|--|-----|
| СОЗДАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ БЕЗОПАСНОГО СЛАЙМА В ДОМАШНИХ УСЛОВИЯХ | 245 |
| Абдрахиков А.Р., Шафигуллина Э.М..... | |
| ДИЗАЙН И РАЗРАБОТКА НОВЫХ АНАЛОГОВ-АКТИВАТОРОВ АМФ-ПРОТЕИНКИНАЗЫ ДЛЯ ЛЕЧЕНИЯ МЕТАБОЛИЧЕСКИХ ЗАБОЛЕВАНИЙ | 246 |
| Альмухаметов М.Р., Парфенова Л.В..... | |
| ИЗУЧЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ВИТАМИНА С В РАЗЛИЧНЫХ ФРУКТАХ И ОВОЩАХ И ЕГО ВЛИЯНИЕ НА ОРГАНИЗМ ЧЕЛОВЕКА | 247 |
| Байдулина Э.В., Султанова А.И..... | |
| СОВРЕМЕННЫЕ МЕТОДЫ ОЦЕНКИ ЖЕСТКОСТИ ВОДЫ | |
| Белоногова В.В., Бакирова Э.Р., Белоногов Э.В..... | 249 |
| ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ НИТРАТОВ И НИТРИТОВ В ОВОЩАХ РАСТЕНИЕВОДСТВА | |
| Белоногова В.В., Бакирова Э.Р., Белоногов Э.В..... | 250 |
| ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВОЗОБНОВЛЯЕМОГО СЫРЬЯ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ, СОДЕРЖАЩИХ КИСЛОРОД И АЗОТ | |
| Беляева А.А., Имангулова Д.М..... | 251 |
| ПУТЬ К СОЗДАНИЮ КРОВООСТАНАВЛИВАЮЩЕГО СРЕДСТВА ИЗ МИКРОКРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ | |
| Валиуллина Э.А., Струков Д.А., Зайнуллина Л.Ф..... | 253 |
| ОПРЕДЕЛЕНИЕ КАЧЕСТВА ПИТЬЕВОЙ ВОДЫ В ПОСЕЛКЕ УК АШИНСКОГО РАЙОНА ЧЕЛЯБИНСКОЙ ОБЛАСТИ | |
| Волкова А.А., Волкова А.А., Сорокина В.Р. | 254 |
| РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СОДЕРЖАНИЯ КОФЕИНА И ТАУРИНА В ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ НАПИТКАХ МЕТОДОМ | |
| УФ-СПЕКТРОФОТОМЕТРИИ..... | 255 |

| | |
|---|-----|
| ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ ЖЕЛЕЗА В ДЕТСКИХ СОКАХ МЕТОДОМ ТОНКОСЛОЙНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ Гайнуллина С.А., Мусагитова Г.Х..... | 257 |
| ЭКОЛОГИЧЕСКИЕ ПРОБЛЕМЫ ГЛАЗАМИ ШКОЛЬНИКОВ: ВЛИЯНИЕ БЫТОВЫХ ХИМИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ НА ОКРУЖАЮЩУЮ СРЕДУ Галимов Д.А., Зарипова Е.Р., Шуршина А.С..... | 258 |
| ОРГАНОЛЕПТИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА КАЧЕСТВА МУКИ Ганиев И.Д., Тухватшин В.С., Нагуманова М.А..... | 259 |
| ОПРЕДЕЛЕНИЕ АКТИВНОСТИ ФЕРМЕНТА ГЛЮКОЗООКСИДАЗЫ В ПОДСОЛНЕЧНИКОВОМ МЕДЕ Гаянова А.А., Габдуллина Э.Э., Канчурина М.М..... | 260 |
| КОМПОЗИТ ДЛЯ АККУМУЛЯТОРОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИАНИЛИНА И СЕРЫ Жигалова Е.А., Фомин А.А..... | 261 |
| ОБНАРУЖЕНИЕ АЛЬДЕГИДОВ В РАСТВОРЕ ТАБАЧНОГО ДЫМА Зайнуллина Л.Ф., Шалыгин А.А., Валеева К.Р..... | 262 |
| О ВОЗМОЖНОСТИ СОВМЕСТНОЙ ВТОРИЧНОЙ ПЕРЕРАБОТКИ ОТХОДОВ БАХИЛ И ПЛАСТИКОВЫХ СТАКАНЧИКОВ Захарина А.Е., Хасанова Р.Ф..... | 263 |
| 85 ЛЕТ СО ДНЯ РОЖДЕНИЯ КУДАШЕВОЙ ФЛОРИДЫ ХУСАИНОВНЫ Ильясова С.Р., Ильясова Р.Р., Никитина В.А..... | 264 |
| ПОЛУЧЕНИЕ И СВОЙСТВА ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА И ОКСИДА КРЕМНИЯ Калеева В.В., Иванова Д.Р., Гирфанова Г.З..... | 265 |
| СИНТЕЗ ОРТО- И ПАРА-НИТРОФЕНОЛОВ В ШКОЛЬНОЙ ЛАБОРАТОРИИ Коковихина П.А., Соловьева Е.А..... | 267 |
| ЗАЩИТНЫЕ ПОКРЫТИЯ ОТ СВЕТОВОЙ РАДИАЦИИ НА ОСНОВЕ ПОЛИ-N-ВИНИЛПИРРОЛИДОНА И ОКСИДА ЦИНКА Колохова С.А..... | 269 |

| | |
|--|-----|
| ХИМИЧЕСКИЙ СОСТАВ И ВЛИЯНИЕ РАСТИТЕЛЬНЫХ МАСЕЛ НА ЗДОРОВЬЕ ЧЕЛОВЕКА | |
| Корнелюк А.Р., Мамаев Д.Р..... | 270 |
| ОПРЕДЕЛЕНИЕ КИСЛОТНОСТИ РАЗЛИЧНЫХ СОРТОВ ЯБЛОК | |
| Крестовников Д.Е., Дитятева И.П..... | 272 |
| ЧТО СОДЕРЖИТСЯ В ЧАШКЕ ЧАЯ? | |
| Кузнецова К.В., Валинурова Р.М..... | 273 |
| ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МИКРОЧАСТИЦ ПЕРОКСИДА КАЛЬЦИЯ ДЛЯ ОЧИСТКИ ВОДЫ И ПОЧВЫ ОТ ИОНОВ ТЯЖЁЛЫХ МЕТАЛЛОВ | |
| Кулемшов Е.О., Ковина К.Е..... | 273 |
| ПОВАРЕННАЯ СОЛЬ: ДРУГ ИЛИ ВРАГ? | |
| Кутлугильдин С.И..... | 277 |
| ИССЛЕДОВАНИЕ КАЧЕСТВА ВОДОПРОВОДНОЙ ВОДЫ СОВЕТСКОГО РАЙОНА | |
| Леванов Д.А., Кучуков Я.Р., Зайнуллина Л.Ф..... | 278 |
| СРАВНИТЕЛЬНОЕ СОДЕРЖАНИЕ НИТРАТОВ ВО ФРУКТАХ И ЯГОДАХ МАГАЗИННОГО (ИНДУСТРИАЛЬНОГО) | |
| И ДОМАШНЕГО (ПРИУСАДЕБНОГО) ПРОИЗВОДСТВА | |
| Макарычева К.В., Косова М.А., Зайнуллина Л.Ф..... | 279 |
| КАЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ ФРУКТОВЫХ СОКОВ НА НАЛИЧИЕ ВИТАМИНА С | |
| Машковцева О.Н., Русских К.А., Смирнов Я.А., Касимов С.А., Джумакулыева Л.Ф., Галимарданов Т.Р., Сентемова М.С..... | 280 |
| ИЗУЧЕНИЕ ВРЕМЕНИ ГЕЛЕОБРАЗОВАНИЯ ПРИ ПОЛУЧЕНИЕ СШИТЫХ ПОЛИМЕРОВ НА ОСНОВЕ НИЗКО- | |
| И ВЫСОКОМЕТОКСИЛИРОВАННОГО ПЕКТИНОВ | |
| Мингалеев Г.В..... | 282 |
| КОЛИЧЕСТВЕННЫЙ АНАЛИЗ АСКОРБИНОВОЙ КИСЛОТЫ В ПРОДУКТАХ МЕТОДОМ ЙОДОМЕТРИЧЕСКОГО ТИТРОВАНИЯ | |
| В УСЛОВИЯХ ШКОЛЬНОЙ ЛАБОРАТОРИИ | |
| Мустафина С.А., Галиева Р.В., Бураншина З.Т. | 285 |

| | |
|--|-----|
| ПРАКТИЧЕСКИЕ МАСТЕР-КЛАССЫ ПО ПЕРЕРАБОТКЕ ПЛАСТИКА КАК ИНСТРУМЕНТ ЭКОЛОГИЧЕСКОГО ОБРАЗОВАНИЯ И ПОПУЛЯРИЗАЦИИ ЦИРКУЛЯРНОЙ ЭКОНОМИКИ СРЕДИ ШКОЛЬНИКОВ | |
| Нафикова Э.В., Маликова Р.Р., Шайхулисламов Я.Р..... | 286 |
| ОПЫТ ИНТЕРАКТИВНОЙ ПЕРЕРАБОТКИ ПЛАСТИКОВЫХ ОТХОДОВ НА МАСТЕР-КЛАССАХ ДЛЯ ШКОЛЬНИКОВ В РАМКАХ ПРОЕКТА «ХИМТЕХЛИДЕР» | |
| Нафикова Э.В., Сидорова А.Н., Ахияров И.И..... | 287 |
| ОПРЕДЕЛЕНИЕ КАЧЕСТВА ВОДОПРОВОДНОЙ ВОДЫ МИКРОРАЙОНА ИНОРС КАЛИНИНСКОГО РАЙОНА | |
| Нигматзянова С.И., Мулюкова А.И., Зайнуллина Л.Ф..... | 290 |
| ПРИМЕНЕНИЕ ПОЛИМОЛОЧНОЙ КИСЛОТЫ В ЗЕЛЕНОЙ ХИМИИ | |
| Одинцов А.В., Сунаргулов А.Б., Бакирова Э.Р..... | 291 |
| АНАЛИЗ СОДЕРЖАНИЯ ОРГАНИЧЕСКИХ ВЕЩЕСТВ В ИСТОЧНИКАХ ПОДЗЕМНЫХ ВОД Г. БЛАГОВЕЩЕНСК | |
| Павлова Л.Р., Миннибаева Э.М..... | 292 |
| СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ЗАЩИТНЫХ СВОЙСТВ ЗУБНЫХ ПАСТ НА ОСНОВЕ МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЕМИНЕРАЛИЗАЦИИ ЭМАЛИ IN VITRO | |
| Пономарев Э.Д., Саттарова А.Ф..... | 293 |
| ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЖЁСТКОСТИ ВОДЫ В СНТ «ЗДОРОВЬЕ» ЧИШМИНСКОГО РАЙОНА РЕСПУБЛИКИ БАШКОРТОСТАН МЕТОДОМ ТИТРОВАНИЯ | |
| Сираев М.Д., Тухватшин В.С., Еремеева Ф.Н..... | 295 |
| ХИМИЧЕСКИЙ АНАЛИЗ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ НАПИТКОВ И ИХ ВЛИЯНИЕ НА ОРГАНИЗМ | |
| Сулейманова Э.А., Гурбанов А.А., Зайнулина Л.Ф..... | 296 |
| УГЛУБЛЕННОЕ МЕЖПРЕДМЕТНОЕ ИЗУЧЕНИЕ БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ВЕЩЕСТВ НА УРОКАХ ХИМИИ И БИОЛОГИИ | |
| Сюльдина Ю.М..... | 297 |
| ИССЛЕДОВАНИЕ ПРИРОДНЫХ ПИГМЕНТОВ, НАХОДЯЩИХСЯ В РАСТЕНИЯХ | |
| Фазлыева А.Р., Фазлыева Г.З..... | 298 |

| | |
|---|-----|
| ИССЛЕДОВАНИЕ РОЛИ ИНЕРТНЫХ ГАЗОВ В УПАКОВКЕ ПРОДУКТОВ Фархутдинова С.Д., Давлетшина К.А..... | 299 |
| СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПРИРОДНЫХ ИНДИКАТОРОВ И РАЗРАБОТКА УЧЕБНОЙ РН-ШКАЛЫ ДЛЯ ШКОЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ Федорищева А.А., Гильманов А.М., Ишмакаева Г.И., Ганеева Г.Х..... | 301 |
| ВОЛШЕБНЫЙ ЙОД: КАК НАЙТИ КРАХМАЛ В НАШЕЙ ЕДЕ Хузина Л.Л., Хузин А.А., Дмитриенко Я.И..... | 302 |
| ХИМИЧЕСКАЯ ОЦЕНКА ВОДЫ НА СОДЕРЖАНИЕ ТЯЖЁЛЫХ МЕТАЛЛОВ В КАРЬЕРАХ БЕЛОРЕЦКОГО РАЙОНА Черноусов А.А., Давлеткиреева Я.Р., Зайнуллина Л.Ф..... | 303 |
| ПРИМЕНЕНИЕ ПОЛИКАПРОЛАКТОНА В ЗЕЛЕНОЙ ХИМИИ Шабанов А.А., Сунаргулов А.Б., Бакирова Э.Р..... | 304 |
| ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ НИТРАТОВ В ОВОЩАХ И ФРУКТАХ Шаймухаметова Н.И., Ахмадуллина Л.Р..... | 305 |
| КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ЯБЛОЧНОГО ПЕКТИНА С КВАРЦЕТИНОМ Шихмуратова Р.Р., Гизитдинова Л.С., Ямансарова Э.Т..... | 306 |
| ДИФФУЗИОННЫЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ПЕКТИНА Шуршина С.А., Сачков А.Г., Шуршина А.С..... | 308 |

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

**ПРОБЛЕМЫ И ДОСТИЖЕНИЯ ХИМИИ
КИСЛОРОД- И АЗОТСОДЕРЖАЩИХ
БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ**

*Сборник тезисов
IX Всероссийской молодежной конференции
(г. Уфа, 20–21 ноября 2025 г.)*

Электронное издание сетевого доступа

*За достоверность информации, изложенной в статьях, а также корректное
написания формул и схем ответственность несут авторы публикаций*

Статьи публикуются в авторской редакции

Подписано к использованию 17.12.2025 г.
Гарнитура «Times New Roman». Объем 10,83 Мб.
Заказ 354.

*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