

ДОСТИЖЕНИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ: ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

**Сборник тезисов
X Всероссийской молодежной конференции
(г. Уфа, 22 – 23 мая 2025 г.)**

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

**ДОСТИЖЕНИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ:
ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ**

**Сборник тезисов
X Всероссийской молодежной конференции
(г. Уфа, 22–23 мая 2025 г.)**

Научное электронное издание сетевого доступа

Уфа
Уфимский университет
2025

УДК 546.1
ББК 24.1
Д70

*Публикуется по решению кафедры
органической и биоорганической химии УУНиТ.
Протокол № 5 от 12.05.2025 г.*

Редакционная коллегия:

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

Достижения молодых ученых: химические науки: тезисы докладов X Всероссийской молодежной конференции (г. Уфа, 22 – 23 мая 2025 г.) / отв. ред. Р.М. Ахметханов [Электронный ресурс] / Уфимск. ун-т науки и технологий. – Уфа: Уфимский университет, 2025. – 443 с. – URL: <https://uust.ru/media/documents/digital-publications/2025/068.pdf> – Загл. с титула экрана.
ISBN 978-5-7477-6091-2

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

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

Тексты воспроизводятся с представленных авторами оригиналов.

УДК 546.1
ББК 24.1

ISBN 978-5-7477-6091-2

© Уфимский университет, 2025

СЕКЦИЯ
«НЕОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЯЖЕЛЫХ НЕФТЯНЫХ ОСТАТКОВ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Амангельда А.А., Васильева А.В., Ширяева Р.Н.

Уфимский государственный нефтяной технический университет,

Уфа, Россия

Вопрос о взаимосвязи химического состава нефтяных остатков и получаемого из них кокса является наиболее из сложных в производстве кокса. Упорядоченность структур кристаллитов кокса зависит от структуры исходных ароматических соединений: распределения углерода в ароматических фрагментах, наличия заместителей в ароматических кольцах, определяющих начальные химические превращения и реакционную способность промежуточных свободных радикалов [1].

Известно, что по электронным спектрам поглощения можно определить возможный выход кокса и склонность тяжелых остатков к образованию упорядоченной структуры [2].

Объектами исследования служили экстракт процесса «Дуосол» (I), крекинг-остаток мангышлакской нефти (II), гудрон мангышлакской нефти (III), дистиллятный крекинг-остаток (IV), асфальт пропановой деасфальтизации гудрона (V).

В таблице приведены характеристики остатков по данным УФ-спектроскопии.

Таблица 1.

Сырье	K_{435} , количество углерода в ароматических структурах	ΔK , коксообразующая способность	Выход кокса, % масс.
I	22,6	1,69	24,4
II	14,1	1,18	18,3
III	9,8	0,88	14,5
IV	41,1	2,89	39,9
V	20,5	1,61	23,8

Как видно из таблицы, выход кокса коррелирует с количеством атомов углерода в ароматических структурах.

Склонность остатков к образованию упорядоченной структуры оценивалось по отношению $K_{435} / \Delta K$, где K_{435} – удельный коэффициент поглощения при длине волны 435 нм. По этому показателю остатки располагаются в ряд: IV > V > I > II > III. Наиболее упорядоченную структуру имеют ароматизированные остатки IV, V, I, менее упорядоченную структуру – высокопарафинистые остатки II, III.

По результатам проведенных лабораторных испытаний установлено, что введение остатка V в остаток IV в количестве 5% позволяет увеличить выход кокса в среднем на 14% отн. Происходит увеличение размеров кристаллитов кокса с 3,71 Å до 3,85 Å и уменьшение межслоевого расстояния с 0,348 нм до 0,346 нм.

Литература

1. Доломатов М.Ю., Запорин В.П. и др. Разработка новых направлений оценки выхода и качества нефтяного углерода с применением электронной феноменологической спектроскопии // Башкирский химический журнал. 2023. Т. 30. № 2. С. 41-44.

2. Кузьмина З.Ф. Исследование спектральными методами дистиллятных и остаточных нефтепродуктов как сырья термических процессов. – Автореф. дис. канд. – Уфа. 1980. 23 с.

© Амангельда А.А., Васильева А.В., Ширяева Р.Н., 2025

УДК 54.057

ГИДРОТЕРМАЛЬНЫЙ СИНТЕЗ СИЛИКАТОВ КАЛЬЦИЯ

Андрющенко Э.Н.^{1,2}, Ярусова С.Б.^{1,2}, Гордиенко П.С.¹, Достовалов Д.В.¹,
Куравый В.Г.¹

¹Институт химии ДВО РАН, Владивосток, Россия

²Владивостокский государственный университет, Владивосток, Россия

Силикаты кальция широко применяются в различных отраслях промышленности [1]. Гипсосодержащее техногенное сырье является перспективным источником для получения силикатов кальция, в том числе, с применением метода гидротермального синтеза [2]. В данной работе осуществлен гидротермальный синтез силикатов кальция из отходов производства борной кислоты (борогипса) и гидроксида калия при температуре 120°C в течение 1–24 ч и соотношении твердой и жидкой фаз 1:5. Установлено, что при указанных режимах степень превращения КОН α_t достигает 87.0 %. Фазовый состав продуктов синтеза в течение 24 ч характеризуется наличием кристаллической фазы тоберморита Ca_{2.25}Si₃O_{7.5}(OH)_{1.5}·H₂O и фазы кальцита CaCO₃. После обжига осадка при 1000°C образуется волластонит CaSiO₃ триклинной модификации. Плотность исходного образца – 2.22 г·см⁻³, после обжига – 2.97 г·см⁻³. Установлено, что, полученный продукт состоит из частиц различной формы размером от 500 нм до 5-6 мкм и агломератов частиц размером до 20-30 мкм. Встречаются единичные частицы игольчатой формы и частицы с плоскими гранями лепестковой формы.

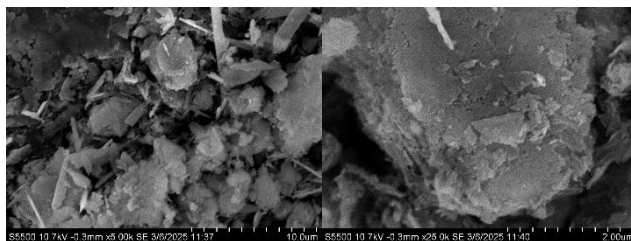


Рис. 1. СЭМ изображения микрочастиц продукта гидротермального синтеза в течение 24 ч

Исследование выполнено в рамках государственного задания Института химии ДВО РАН (FWFN(0205)-2025-0002, тема 2, раздел 3).

Литература

1. Гладун В.Д., Акатьева Л.В., Холькин А.И. Синтетические силикаты кальция. – М.: ИРИСБУК, 2011. – 232 с.

2. Комплексная переработка борсодержащего минерального сырья и техногенных отходов: монография. – Владивосток: Изд-во ВВГУ, 2024. – 198 с.

© Андриющенко Э.Н., Ярусова С.Б.,
Гордиенко П.С., Достовалов Д.В., Курявый В.Г., 2025

УДК 541.123.3

ДИАГРАММА СОСТОЯНИЙ СИСТЕМЫ Р – Рb

Баранова Т.В.¹, Семенова Г.В.¹, Сушкова Т.П.¹

¹Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

В последнее время в связи с ростом интереса к слоистым структурам, в частности, к ромбической модификации фосфора (черный фосфор), появились новые результаты исследований как пниктогенов, так и систем, образованных ими [1, 2]. Наличие высоколетучего компонента создает определенные трудности при синтезе этих образцов, поэтому в качестве вспомогательного компонента может использоваться свинец [3], добавление которого должно смягчать условия получения фосфидов, понижая температуру синтеза и давление пара фосфора в системе. Развитие этого направления сдерживается отсутствием надежных сведений о фазовых равновесиях в системе Р – Рb. Установление характера взаимодействия компонентов в данной системе методом рентгенофазового и дифференциального термического анализа составляло цель настоящей работы.

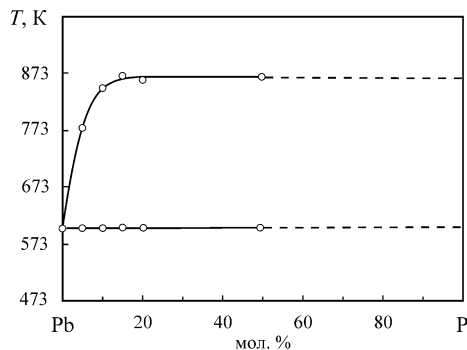


Рис. 1. Диаграмма состояний системы Р – Pb

Синтез компонентов проводили из красного фосфора ОСЧ-9-5 и свинца гранулированного ХЧ-99.9 в толстостенных вакуумированных кварцевых ампулах в однозонной печи SNOL 4/1100 с программируемым режимом нагревания. Рентгенофазовый анализ осуществляли на дифрактометре *EMPYREAN* в геометрии θ - θ с фокусировкой по Бреггу – Брентано; источник излучения – рентгеновская трубка с медным анодом, $\lambda = 0.1541$ нм (Cu $K_{\alpha 1}$), $\lambda = 0.1544$ нм (Cu $K_{\alpha 2}$). Съемку проводили в дискретном режиме с шагом 0.02° и временем экспозиции в каждой точке 40 с. Погрешность определения межплоскостных расстояний не превышала $5 \cdot 10^{-4}$ нм. Для расшифровки полученных дифрактограмм использовали литературные данные [4,5]; моделирование теоретических порошкограмм производили при помощи программы *PowderCell 2.3*. На рентгенограммах всех образцов фиксируются рефлексы свинца, а также кристаллического фосфора. При этом помимо фиолетового фосфора (Гитторфа), получение которого из расплавов со свинцом описано в литературе, было зафиксировано появление черного (ромбического) фосфора – стабильной полиморфной модификации фосфора.

Дифференциальный термический анализ осуществляли на установке с программируемым нагревом печи при скорости нагревания 3 К/мин. В работе использовались хромель-алюмелевые термопары; полученный сигнал обрабатывался в компьютерной программе *MasterSCADA*. Погрешность определения температуры фазовых превращений составляла ± 1 К. На термограммах всех образцов было отмечено два эндозффекта: первый (низкотемпературный) фиксировался при одной и той же температуре, близкой к 600 К, второй эффект соответствовал ликвидусу рассматриваемой системы. Стоит отметить, что уже для образца, содержащего 20 мол. % фосфора, второй эффект регистрировался при 862 К. Это соответствует давлению насыщенного пара фосфора 37 атм, что осложняло анализ более богатых летучим компонентам сплавов. Диаграмма состояний системы Р – Pb (рис.1) является диаграммой эвтектического типа с температурой

эвтектики 600 К, причем эвтектическая точка лежит в области очень малых концентраций фосфора («вырожденная» эвтектика).

Таким образом, при использовании свинца в качестве дополнительного компонента, смягчающего условия получения фосфидов, необходим существенный избыток свинца для понижения температуры плавления. Кристаллизация же фиолетового и черного фосфора в присутствии свинца способствует понижению давления пара в системе.

Литература

1. Applications of Phosphorene and Black Phosphorus in Energy Conversion and Storage Devices / J. Pang [et al.] // *Adv. Energy Mater.* – 2018. – Vol. 8, № 8. – p. 1702093.
2. Nilges T. Phosphorus: The Allotropes, Stability, Synthesis, and Selected Applications / T. Nilges, P. Schmidt, R. Wehrich // *Encyclopedia of Inorganic and Bioinorganic Chemistry*, 2018. – P. 1-18.
3. Семенова Г.В. Твердые растворы в тройных системах с участием элементов пятой группы / Г.В. Семенова, Е.Г. Гончаров. – М.: Моск. физ.-техн. ин-т, 2000. – 160 с.
4. Phosphorus: new in situ powder data from large-volume apparatus / Crichton W.A. [et al.] // *Powder Diffraction.* – 2003. – Vol. 18, № 2. – P. 155-158.
5. Krebs H. Ueber Struktur und Eigenschaften der Halbmetalle. XXII. Die Kristallstruktur des Hittorfschen Phosphors // H. Krebs, H. Thurn // *Acta Crystallographica B*, 1969. – P. 125-135.

© Баранова Т.В., Семенова Г.В., Сушкова Т.П., 2025

УДК 661.856:062.2.08

ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОРАЗМЕРНОГО КАРБОНАТА МЕДИ, СТАБИЛИЗИРОВАННОГО МЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗОЙ, МЕТОДОМ РЕНТГЕНОФАЗОВОГО АНАЛИЗА

Блинов А.В., Бочаров Н.М., Русев Н.А., Рехман З.А., Голик Д.Б.
Северо-Кавказский Федеральный Университет, Ставрополь, Россия

В последнее время у исследователей увеличился интерес к получению искусственно сконструированной структуры наночастиц с новыми свойствами. Соединения с четко определенной структурой, полученные из специально подобранных наночастиц, предоставляют возможности для оптимизации свойств материалов и открывают возможности для наблюдения интересных и потенциально полезных новых свойств. Медь участвует в сшивании коллагена в кости. Биоорганические ионы, такие как кремний, магний, стронций, цинк и медь, по-прежнему можно рассматривать как важные кофакторы ферментов, коферментов или протезных групп. Кроме того, они активно участвуют в ионных каналах или в процессе вторичной передачи сигналов либо при прямой стимуляции, либо в качестве аналога [1]. Ученые давно изучают и получают химически модифицированные полимеры с целью разработки новых биоматериалов с инновационными физико-химическими свойствами [2]. Важным классом

модифицированных полимеров являются эфиры целлюлозы, такие как метилцеллюлоза (МЦ), гидроксиэтилцеллюлоза (ГЭЦ), гидрокси-пропилметилцеллюлоза (ГПМЦ) и карбоксиметилцеллюлоза (КМЦ). Целлюлоза – самый распространённый полисахарид в природе; это регулярный и линейный полимер, состоящий из (1→4)-связанных β-d-глюкопиранозильных звеньев. Целлюлоза нерастворима в воде, это обусловлено межмолекулярными водородных связей между гидроксильными группами, эта связь приводит к образованию высокоупорядоченных кристаллических областей. Метилцеллюлоза – один из важнейших коммерческих эфиров целлюлозы, используемый во многих отраслях промышленности. В этом производном целлюлозы метильные группы (-CH₃) замещают гидроксильные группы. Это производное обладает амфифильными свойствами и уникальными физико-химическими свойствами. МЦ становится растворимой в воде, также проявляет нетипичные термодинамические свойства: вязкость водного раствора остается постоянной и с повышением температуры выше критической точки (30 °C) вязкость сильно увеличивается, что приводит к образованию термообратимого геля. Для получения стабильных наночастиц карбоната меди использовалась метилцеллюлоза в качестве стабилизатора для предотвращения коагуляции частиц. Нами проведено исследование, целью которого является изучение фазового состава наночастиц карбоната меди, стабилизированного метилцеллюлозой.

Полученный образец исследовали методом рентгенофазового анализа на рентгеновском дифрактометре «PANalytical Empyrean». Полученная дифрактограмма представлена на рисунке 1.

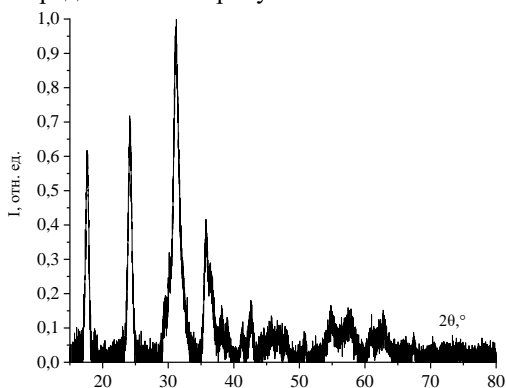


Рис. 1. Дифрактограмма образца наноразмерного карбоната меди, стабилизированного метилцеллюлозой

Анализ полученной дифрактограммы показал, что фазовый состав образца наноразмерного карбоната меди составляет основной карбонат меди

с химической формулой $\text{Cu}_2(\text{OH})_2\text{CO}_3$. Основной карбонат меди имеет моноклинную кристаллическую решетку с пространственной группой P21/a.

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

Литература

1. Wang W., Yeung K.W.K. Bone grafts and biomaterials substitutes for bone defect repair: A review // Bioactive materials. – 2017. – Т. 2 – № 4 – С. 224-247.
2. Moore J.A., Carraher Jr C.E. Modification of polymers // Modification of Polymers. – 2012. – Vol. 21. – P. 1.

© Блинов А.В., Бочаров Н.М., Русев Н.А., Рехман З.А., Голик Д.Б., 2025

УДК 543.544

СИНТЕЗ ErFe_2O_4 КАК ПОТЕНЦИАЛЬНО АКТИВНОГО КАТАЛИТИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА С МАГНИТНЫМИ СВОЙСТВАМИ.

Волков А.С.¹, Томина Е.В.^{1,2}, Гудкова Н.А.¹

¹*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

²*Воронежский государственный лесотехнический университет им. Г.Ф. Морозова, Воронеж, Россия*

Создание новых наноразмерных полифункциональных материалов представляется на данный момент одной из главных задач современного материаловедения. Целью исследования являлся синтез феррита эрбия как перспективного функционального материала с каталитическими и магнитными свойствами для создания магнитоактивных катализаторов, извлекаемых из жидких сред магнитной сепарацией.

Для потенциальных катализаторов одной из важнейших характеристик является площадь удельной поверхности. С этой точки зрения перспективным представляется синтез наноразмерного феррита эрбия со структурой шпинели методом цитратного горения, обеспечивающего в силу своего механизма получение высокопористых материалов с высокой удельной поверхностью [1].

Для осуществления синтеза в стехиометрическом соотношении в дистиллированной воде растворяли кристаллогидраты нитратов железа $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (ТУ 6-09-02-553-96) и $\text{Er}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (ТУ 6-09-4676-83), к раствору добавили 28% раствор аммиака (ГОСТ 24147-80) в количестве, достаточном для образования гидроксидов эрбия и железа. Затем к смеси гидроксидов железа и эрбия добавляли 46% лимонную кислоту (ГОСТ 908-2004) и нагревали до образования растворимых цитратов железа и эрбия. Раствор выпаривали до образования геля – цитрата железа-эрбия. При дальнейшем нагревании происходило возгорание геля с образованием

порошка чёрного цвета ErFe_2O_4 . Феррит эрбия промывали дистиллированной водой, отфильтровывали, высушивали на воздухе, отжигали в муфельной печи в целях удаления воды, непрореагировавших органических веществ при температуре 800°C в течение 1 часа.

Образцы исследовали методом сканирующей электронной микроскопии (СЭМ, термоэмиссионный сканирующий электронный микроскоп EM6900-ЭМТИОН с системой энергодисперсионного микроанализа (EDS), детектор модели Xplore 30 производства Oxford Instruments) (рис.1).

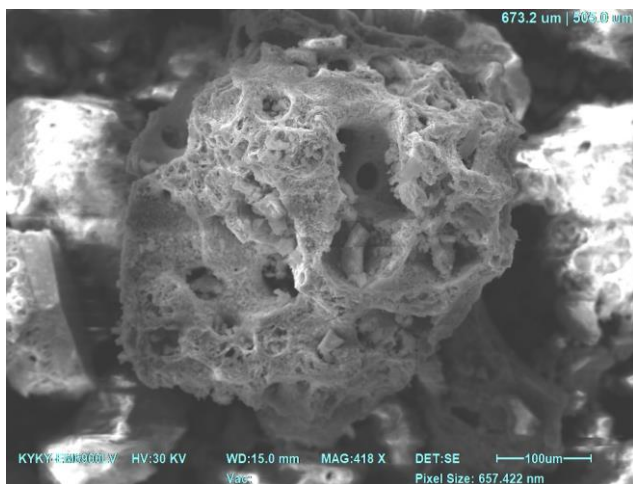


Рис. 1. СЭМ изображение феррита эрбия

Таблица 1

Процентное содержание элементов.

Элемент	Атом%
Fe	28,24
Er	14,09
O	57,67

Среднее содержание элементов в образцах по данным ЭДС (табл.1) хорошо согласуется с ожидаемым химическим составом для стехиометрических образцов. Согласно данным СЭМ (рис.1) микроструктура синтезированных образцов феррита эрбия характеризуется развитой поверхностью, образовавшейся за счет обильного выделения газообразных продуктов (преимущественно CO , CO_2) при горении цитратов. Это открывает потенциальные возможности создания на основе

наноразмерного феррита эрбия функциональных материалов с широким спектром свойств: каталитических, адсорбционных, магнитных.

Литература

1. Томина, Е.В. Синтез наноразмерного феррита кобальта и его каталитические свойства в фентоноподобных процессах / Е.В. Томина, Н.А. Куркин, А.В. Дорошенко // Неорганические материалы. – 2022. – Т. 58, № 7. – С. 727-732.

© Волков А.С., Томина Е.В., Гудкова Н.А., 2025

УДК 546.94+54-386

СИНТЕЗ И СТРОЕНИЕ БИЯДЕРНОГО ХЛОРИДОТИОКАРБАМИДНОГО КОМПЛЕКСА ОСМИЯ(III) $[\text{Os}(\text{Thio})_6][\text{OsCl}_6] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

Грицунова Д.Д., Ефременко А.В., Терёшина Т.А., Доброхотова Е.В.,
Култышкина Е.К., Рудницкая О.В., Хрусталеv В.Н.

*Российский университет дружбы народов им. Патриса Лумумбы,
кафедра общей и неорганической химии, Москва, Россия*

Тиокарбамидные комплексы осмия исследуются уже в течение многих лет, но, несмотря на это, на сегодняшний день известно ограниченное количество структурно охарактеризованных хлоридотиокарбамидных комплексов осмия [1].

Красные кристаллы (рис. 1) $[\text{Os}^{\text{III}}(\text{Thio})_6][\text{Os}^{\text{III}}\text{Cl}_6] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ были получены в результате реакции $\text{H}_2\text{OsCl}_6 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ с $\text{SC}(\text{NH}_2)_2$ в HCl (1:1). К раствору H_2OsCl_6 в HCl добавляли кристаллический тиокарбамид в соотношении $\text{Os}:\text{Thio} = 1:8$ и нагревали на плитке до перехода окраски раствора из жёлтой в красно-оранжевую. Выпавший через несколько дней осадок отфильтровывали, промывали водой, ацетоном и высушивали в эксикаторе над KOH . Выход ~ 25 %. Соединение нерастворимо в воде, ацетоне, спирте, эфире, хлороформе.

Структура (рис. 2) была установлена с помощью рентгеноструктурного анализа: комплекс состоит катиона $[\text{Os}(\text{Thio})_6]^{3+}$ и аниона $[\text{OsCl}_6]^{3-}$ кристаллизуется в моноклинной сингонии, пространственная группа $\text{P2}_1/\text{c}$, $a = 12,57146(16) \text{ \AA}$, $b = 8,60274(10) \text{ \AA}$, $c = 14,79042(18) \text{ \AA}$, $V = 1468,71(3) \text{ \AA}^3$, $Z = 2$. Длины связей $d(\text{Os}-\text{S}) = 2,3917(8) - 2,4148(9) \text{ \AA}$, $d(\text{Os}-\text{Cl}) = 2,3840(7) - 2,3940(7) \text{ \AA}$, что характерно для соединений осмия в степени окисления +3.

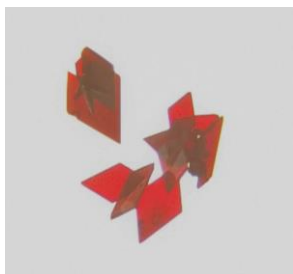


Рис. 1. Фотография кристаллов под микроскопом

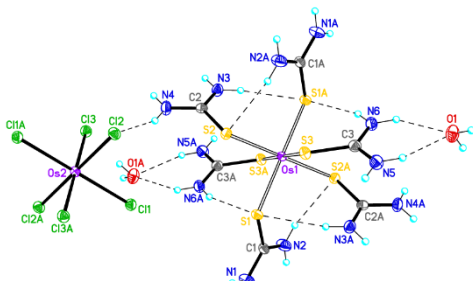


Рис. 2. Структура $[\text{Os}(\text{Thio})_6][\text{OsCl}_6] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

ЭСП хлоридотиокарбамидного комплекса осмия(III) в вазелиновом масле характеризуется наличием двух полос поглощения при 490 и 560 нм, что подтверждает наличие иона $[\text{Os}(\text{Thio})_6]^{3+}$ в составе соединения.

В ИК спектре соединения присутствуют интенсивные полосы поглощения в области $3300\text{--}3000\text{ см}^{-1}$ и $1600\text{--}1400\text{ см}^{-1}$, обусловленные валентными и деформационными колебаниями связей в $-\text{NH}_2$ группе, которые близки по своему положению для свободного тиокарбамида. Частота валентных колебаний связи группы $-\text{CS}$ тиокарбамида ($\sim 730\text{ см}^{-1}$) в спектре смещается до 660 см^{-1} . Полоса валентных колебаний при 1060 см^{-1} практически полностью исчезает, что характерно для тиокарбамидных комплексов, где координация тиокарбамида осуществляется через атом серы.

В длинноволновой области ИК спектра (рис. 3) хлоридотиокарбамидного комплекса осмия(III) присутствует интенсивная полоса поглощения, обусловленная валентными колебаниями связи $\text{Os}\text{--}\text{Cl}$ при 276 см^{-1} [2].

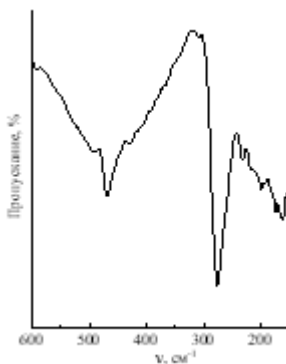


Рис. 3. Длинноволновый ИК спектр $[\text{Os}(\text{Thio})_6][\text{OsCl}_6] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

Литература

1. ccdc [сайт]. – URL: <https://www.ccdc.cam.ac.uk/>
2. Грибановская М.Г., Рудницкая О.В., Пичков В.Н. и др. Исследование координационных соединений осмия с тиомочевинной методом инфракрасной спектроскопии // Коорд. хим., 1989. – Т. 15, № 7. – С. 991- 994.

© Грицунова Д.Д., Ефременко А.В., Терёшина Т.А., Доброхотова Е.В.,
Култышкина Е.К., Рудницкая О.В., Хрусталеv В.Н., 2025

УДК 543.42:541.64

ИССЛЕДОВАНИЕ ИК-СПЕКТРОВ КОМПОЗИТОВ ФЕРРИТА КОБАЛЬТА С БИОУГЛЕМ

Дорошенко А.В.¹, Томина Е.В.^{1,2}

¹*Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия*

²*Воронежский государственный лесотехнический университет
им. Г.Ф. Морозова, Воронеж, Россия*

Интерес к наноразмерным ферритам со структурой шпинели (MFe_2O_4) значительно увеличился из-за их многофункциональных свойств. Однако наночастицы ферритов часто склонны к агрегации, что делает материал нестабильным. В контексте уменьшения уровня загрязнения окружающей среды и переработки органических отходов все шире применение находит биомасса (сельскохозяйственные отбросы и отходы лесного комплекса, побочные продукты промышленных процессов и осадки сточных вод), превращаемая в биоуголь (БУ). Биоуголь обладает большой удельной площадью поверхности, а также увеличенной концентрацией кислородсодержащих функциональных групп, что обуславливает его высокую эффективность в процессах адсорбции.

Уголь, благодаря своей низкой стоимости, стабильности, экологической безопасности и отличной адсорбционной способности, может быть использован для синтеза композитов $\text{MFe}_2\text{O}_4@\text{C}$, что позволит улучшить функциональные свойства компонентов за счет синергетического эффекта [1].

Синтез композитов феррита кобальта с биоуглем (БУ) проводили методом цитратного горения [2]. БУ был получен в процессе пиролиза березовых опилок. Два образца БУ получены в процессе низкотемпературного пиролиза (400 °C и 500 °C соответственно), третий - в процессе среднетемпературного пиролиза (600 °C).

Для проведения анализа функциональных групп и химических связей в синтезированных образцах использовали ИК-Фурье спектрометр МРА. Полученные ИК-спектры представлены на рисунке 1.

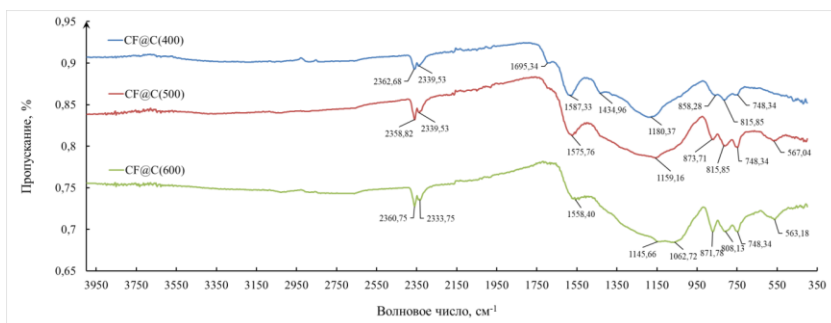


Рис. 1. ИК-спектры композитов $\text{CoFe}_2\text{O}_4@\text{C}(400)$, $\text{CoFe}_2\text{O}_4@\text{C}(500)$, $\text{CoFe}_2\text{O}_4@\text{C}(600)$ (CF@C(400), CF@C(500) и CF@C(600) соответственно)

Анализируемый спектральный диапазон составлял $4000\text{--}350\text{ см}^{-1}$. В ИК-спектрах образцов CF@C(500) и CF@C(600) наблюдаются полосы $567,04\text{ см}^{-1}$ и $563,18\text{ см}^{-1}$ соответственно. Их принято относить к внутренним валентным колебаниям металла в узле $\text{Fe}_{\text{тетра}}\text{--O}$ (тетраэдрический комплекс). Для композита, отожжённого при 400 °C , полос в данном диапазоне не наблюдается. Вибрации при растяжении от $748,34\text{ см}^{-1}$ до $874,71\text{ см}^{-1}$ связаны с полосой Co--O в октаэдрических участках $\text{Co}_{\text{окта}}\text{--O}$. Соответствующие полосы поглощения значительно слабее выражены в спектре образца CF@C(400). Эти колебания указывают на формирование структуры шпинели феррита кобальта в приготовленных образцах композитов [3-4].

Также в спектрах синтезированных образцов наблюдались полосы при $2333,75\text{--}2362,68\text{ см}^{-1}$, $1558,40\text{--}1587,33\text{ см}^{-1}$ и $1062,72\text{--}1158,40\text{ см}^{-1}$, характерные для связи C--O . Полоса при $1695,34\text{ см}^{-1}$, связанная с растяжением и изгибом валентных колебаний O--H адсорбированных молекул воды, выражена для CF@C(400) и отсутствует для остальных образцов. Растягивающая полоса на $1434,96\text{ см}^{-1}$ относится к асимметричным колебаниям группы --COO-- . Слабые характерные полосы при 2950 см^{-1} – C--H/CH_2 -колебания [4].

Таким образом, можно сделать вывод, что структура шпинели феррита кобальта полностью сформировалась для порошков CF@C(500) и CF@C(600). Во всех трех образцах наблюдаются вибрации при растяжении связей C--O . Для композита CF@C(400) наблюдаются колебания связей O--H , COO-- и C--H/CH_2 -колебания. Предположительно это связано с меньшей температурой обработки угля для данного композита.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, проект 23-23-00122.

Литература

1. Spinel ferrites nanoparticles: Synthesis methods and application in heterogeneous Fenton oxidation of organic pollutants – A review / A. Soufi, H. Hajjaoui, R. Elmoubarki, M. Abdennouri, S. Qourzal, N. Barka // *Applied Surface Science Advances*. – 2021. – Vol. 6. – P. 100145.
2. Томина Е.В. Синтез наноразмерного феррита кобальта и его каталитические свойства в фентоноподобных процессах / Е.В. Томина, Н.А. Куркин, А.В. Дорошенко // *Неорганические материалы*. – 2022. – Т. 58., № 7. – С. 727-732.
3. Hemant K. Photocatalytic degradation of naphthol blue black dye using undoped and Al-doped cobalt ferrite nanoparticles / K.Hemant, G. Arun, R. Amit // *Kuwait Journal of Science*. – 2024. – Vol. 51. – P. 100208.
4. Eco-friendly synthesis of nano ferrites for effective dye degradation and enhanced antimicrobial protection / M. Dhayalan, R. Govindasamy, K. Prakasham, M.A. Khan, A. Phanumartwath // *Journal of King Saud University – Science*. – 2024. – Vol. 36. – P. 103466.

© Дорошенко А.В., Томина Е.В., 2025

УДК 544.723.21: 541.183: 661.183.45: 661.183.6

СИНТЕЗ МИКРО-МЕЗОПОРИСТОГО ЦЕОЛИТА МСМ-22 С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРИРОДНОГО АЛЮМОСИЛИКАТА

Жирнова Е.Д.¹, Травкина О.С.^{1,2}, Косарева А.Е.¹

¹*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россия*

²*Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

Среди 256 структур цеолитов, признанных Международной цеолитной ассоциацией (IZA) [1], одним из немногих нашедших в настоящее время коммерческое применение является МСМ-22 (структурный тип MWW) поскольку сочетает две независимые пористые системы: двумерные синусоидальные каналы и крупные полости, называемые суперклетками. Такая структура обеспечивает исключительную каталитическую активность во многих реакциях, катализируемых кислотами, например, ацилирование, изомеризация, крекинг, диспропорционирование, ароматизация [2]. Традиционные методы их синтеза являются энергоемкими и связаны с использованием дорогостоящих реагентов, что стимулирует поиск альтернативных, более экономичных подходов. Одним из перспективных направлений является получение цеолитов с использованием в качестве прекурсора природных и синтетических алюмосиликатов. В связи с этим целью данной работы являлась разработка способа синтеза цеолита МСМ-22 с использованием в качестве сырья аморфного алюмосиликата.

В результате проведенных исследований разработан способ синтеза порошкообразного цеолита МСМ-22, который включает следующие стадии: осаждение аморфного алюмосиликата из растворов силиката натрия и сернокислого алюминия, отмывка до нейтральной среды; выдержка при 30 °С в течение 24 часов полученного продукта в присутствии 20% масс.

кристаллической затравки в растворе силиката натрия и темплата при следующем мольном составе реакционной смеси: $2,7\text{Na}_2\text{O} \cdot \text{Al}_2\text{O}_3 \cdot 40\text{SiO}_2 \cdot 1347\text{H}_2\text{O} \cdot 15\text{NH}_4\text{I}$; последующая кристаллизация при 150°C в течение 96 часов. Разработанный способ позволяет синтезировать порошкообразный цеолит МСМ-22 со степенью кристалличности близкой 100% и удельной поверхностью равной $410\text{ м}^2/\text{г}$ и объемом микро – и мезопор 0.17 и $0.14\text{ см}^3/\text{г}$ соответственно.

Литература

1. International Zeolite Association (IZA) [Электронный ресурс]. Режим доступа: <http://www.iza-structure.org/> (дата обращения 25.03.2025).
2. Жирнова Е.Д., Травкина О.С., Кутепов Б.И. Современные способы получения цеолитов структурного типа MWW // Башкирский химический журнал. 2023. Т. 30. № 4. С. 68-72.

© Жирнова Е.Д., Травкина О.С., Косарева А.Е., 2025

УДК 544.723.21: 541.183: 661.183.6

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ СИНТЕЗА НА СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ

ГРАНУЛИРОВАННОГО ЦЕОЛИТА ВЕТА

Зарипов В.И.¹, Исаков А.Р.², Зиянуров Р.И.³,

Воронин О.А.³, Травкина О.С.^{1,3}

¹ *Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

² *Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия*

³ *Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Уфа, Россия*

Цеолит типа ВЕА является одним из самых востребованных цеолитных катализаторов, обладая развитой системой пор с диаметром $0,76 \times 0,64\text{ нм}$ и $0,55 \times 0,55\text{ нм}$, высокой термической устойчивостью и значительной кислотностью [1]. Кроме того, исследование структуры показывает, что цеолит ВЕА представляет собой соединение нескольких различных, но тесно связанных полиморфов, включая хиральный полиморф-А, ахиральный полиморф-В и полиморф-С [2]. Их образование происходит из-за дефектов в каркасе цеолита и нарушения структуры слоёв. Получение чистого полиморфа А является привлекательной целью, однако, попытки его синтезировать за последние 20 лет не увенчались успехом [3-5].

Цель заключалась в исследовании структурных особенностей цеолита типа ВЕА и изучении влияния параметров синтеза на образование полиморфа ВЕА-А.

В данной работе были изучены условия кристаллизации предварительно сформованных алюмосиликатных гранул в растворе силиката натрия при повышенных температурах в цеолиты со степенью кристалличности не

менее 90% и пористой структурой, состоящей не только из микро-, но и мезо- и макропор (иерархическая пористая структура).

Были проведены исследования влияния предварительной низкотемпературной выдержки, продолжительности кристаллизации, влияния природы используемого органического соединения (темплата), и увеличение мольного соотношения $\text{H}_2\text{O}/\text{Al}_2\text{O}_3$ в реакционной смеси.

В результате проведенных экспериментов было установлено, что изменение температуры предварительной выдержки, продолжительности кристаллизации реакционной смеси и природы темплата приводит к образованию в продуктах кристаллизации примесных фаз цеолитов ZSM-5 и морденита, но не влияет на соотношение полиморфов А и В в конечном продукте. Увеличение мольного соотношения $\text{H}_2\text{O}/\text{Al}_2\text{O}_3$ с 650 до 1300 позволило получить чистый в фазовом отношении цеолит Beta и достичь повышения содержания полиморфа А в продукте кристаллизации на 10 %.

Литература

1. R.L. Wadlinger, G.T. Kerr and E.J. Rosinski, US Pat., 3308069, 1967.
2. J. M. Newsam, M. M. J. Treacy, W. T. Koetsier and C. B. Degruyter, Proc. R. Soc. London, Ser. A, 1988, 420, 375–405.
3. Tong, M., Zhang, D., Zhu, L., Xu, J., Deng, F., Xu, R., & Yan, W. (2016). An elaborate structure investigation of the chiral polymorph A-enriched zeolite beta. CrystEngComm, 18(10), 1782–1789.
4. Mingquan Tong, Daliang Zhang, Lingkui Zhu, Jun Xu, Feng Deng, Reng Xu, Wenfu Yan. An elaborate structure investigation of the chiral polymorph A-enriched zeolite beta. CrystEngComm. Issue 10. 2016.
5. R. Xu, W. Pang, J. Yu, Q. Huo and J. Chen, Chemistry of Zeolites and Related Porous Materials: Synthesis and Structure, John Wiley & Sons (Asia) Pte Ltd, Singapore, 2007.

© Зарипов В.И., Исхаков А.Р., Зиянуров Р.И.,
Воронин О.А., Травкина О.С., 2025

УДК 66.081.6-278

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОГРУЖНОГО ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО МОДУЛЯ ДЛЯ РЕГЕНЕРАЦИИ ЭЛЕКТРОЛИТА ТРАВЛЕНИЯ МЕДИ

Краснощеков Р.К., Долженко А., Печенкина Е.С., Артамонова А.Р.

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

Погружной электрохимический модуль (ПЭМ) представляет собой устройство, состоящее из корпуса с интегрированной ионообменной мембраной и внутреннего электрода. Параллельно мембране на расстоянии 20-30 мм от нее навешивают внешний электрод [1]. Используемые в таких ячейках мембраны, должны быть селективными по отношению к пропускаемым ионам. Так например наиболее распространенной является катионообменная мембрана, пропускающая исключительно катионы [2].

Таким образом, данная конструкция позволяет использовать гальваническую ванну как мембранный электролизер, не прибегая к сложным ее модификациям и обеспечивает экономию ресурсов и производственных площадей.

В работе исследовали возможность применения ПЭМ регенерации азотнокислых растворов травления меди с отечественной гетерогенной мембраной МК-40, графитовым анодом и медным катодом с соотношением площадей

1:8 соответственно. Время эксперимента - 1 ч. Исходные концентрации в отработанном травильном растворе составили 28,60 г/л по Cu^{2+} и 6,30 г/л по HNO_3 . В качестве внутреннего раствора ПЭМ использовали 1М Na_2SO_4 . Результаты эксперимента представлены в таблице 1.

Таблица 1

Результаты эксперимента

Плотность тока, А/дм ²	Получаемый выход по току по ионам меди, %
2	81,3
4	83

Согласно полученным результатам, применение ПЭМ является перспективным методом для восстановления работоспособности электролита азотнокислого травления и нуждается в дальнейшем изучении.

Литература

1. Кругликов С.С., Тураев Д.Ю., Бузикова А.М. Регенерация раствора травления меди в производстве печатных плат методом мембранного электролиза //Гальванотехника и обработка поверхности. – 2009. – Т. 17. – № 1. – С. 59-65.
2. Yang K., Qin M. The application of cation exchange membranes in electrochemical systems for ammonia recovery from wastewater //Membranes. – 2021. – Т. 11. – №. 7. – С. 494.

© Краснощекоев Р.К., Долженко А., Печенкина Е.С., Артамонова А.Р., 2025

УДК 54.057:543.42

НОВЫЙ СПОСОБ СИНТЕЗА И ИК-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИВОЛЬФРАМАТА $\text{Pr}_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{81}$

Лесин Д.А., Пестерева Н.Н.

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

Материалы на основе вольфраматов редкоземельных элементов привлекают внимание исследователей благодаря своим уникальным свойствам и структурным многообразием фаз [1] в системах $\text{Ln}_2\text{O}_3 - \text{WO}_3$. Например, фазы $\text{Ln}_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{81}$ ($\text{Ln} - \text{La}, \text{Ce-Sm}$) рассматриваются как матрицы для люминесцентных материалов [2] и в качестве твердых электролитов [3].

В литературе описаны твердофазные [3] и гидротермальные [2] способы синтеза поливольфрамов $\text{Ln}_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{81}$, однако эти методы достаточно времязатратны. В данной работе методом самораспространяющегося высокотемпературного синтеза (СВС) получен вольфрамат $\text{Pr}_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{81}$.

Для синтеза готовили два раствора, составы которых (с учетом точности взвешивания) приведены в таблице 1.

Таблица 1

Составы растворов для синтеза $\text{Pr}_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{81}$

Раствор	Вещество	Масса, г
1	Вода	100
	$\text{Pr}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$	3,9813
	NH_4NO_3	14,50
	Аминокислотная кислота	3,00
	Препарат ЭНА (органические комплексоны)	4,00
	Глицерин	2,00
2	Вода	100
	$(\text{NH}_4)_{10}[\text{H}_2\text{W}_{12}\text{O}_{42}] \cdot 4\text{H}_2\text{O}$	5,0820
	Винная кислота	10,00

Два раствора сливали в высокий стеклянный стакан 2 л, упаривали на плитке до начала интенсивного выделения газов и образованием объемного полупродукта, который отжигали от остатков органического топлива в печи при 600°C в течение 10 часов, получалось вещество бледно-зеленого цвета.

По результатам рентгенофазового анализа (Bruker D8 ADVANCE, $\text{CuK}\alpha$, $2\Theta = 15-80^\circ$, метод обработки Ле Бейля) полученное вещество является однофазным (рис.1б). По значениям полуширины наиболее интенсивных пиков в дифрактограммах $\text{Pr}_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{81}$ (рис.1а), полученного методом СВС и твердофазно (из оксидов Pr_6O_{11} и WO_3), можно предположить, что частицы поливольфрамата имеют меньший размер при синтезе по методу СВС [4].

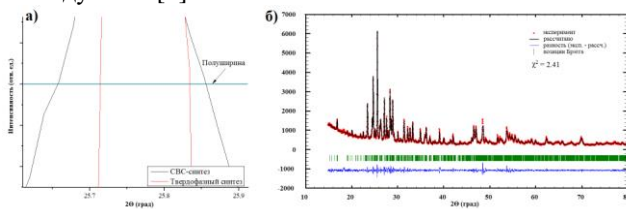


Рис. 1. Сравнение полуширины пиков на дифрактограммах $\text{Pr}_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{81}$, полученного методом СВС и твердофазно (а), дифрактограмма $\text{Pr}_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{81}$ (б)

На записанном ИК-спектре $\text{Pr}_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{81}$ (Nicolet 6700 (ThermoScientific) методом НПВО, $4000\text{--}350\text{ см}^{-1}$) в области валентных колебаний по W-O связям находится несколько сложносоставных полос. Характерной особенностью ИК-спектров $\text{Ln}_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{81}$ является сильная полоса при 580 см^{-1} , которой нет на ИК-спектрах соответствующих вольфрамов $\text{Ln}_2(\text{WO}_4)_3$.

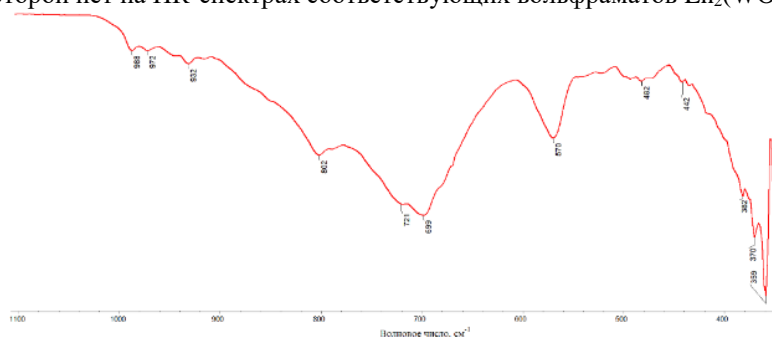


Рис. 2. ИК-спектр $\text{Pr}_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{81}$ в диапазоне $1100\text{--}350\text{ см}^{-1}$

Таким образом в работе предложена методика СВС-синтеза поливольфрамата $\text{Pr}_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{81}$, что может улучшить электрические свойства однокомпонентных и композиционных электролитов на основе данной фазы.

Результаты исследований получены в рамках выполнения государственного задания Министерства науки и высшего образования РФ (номер проекта 123031300049–8) с использованием оборудования УЦКП “Современные нанотехнологии” УрФУ (рег. № 2968).

Литература

1. Ефремов В.А. Особенности кристаллохимии молибдатов и вольфрамов РЗЭ // Успехи химии. – 1990. – Т. 59. – № 7. – С. 1085–1110.
2. Kaczmarek A.M. et al. Green and blue emitting 3D structured Tb: Ce 2 (WO 4) 3 and Tb: Ce 10 W 22 O 81 micromaterials //Dalton Transactions. – 2015. – Т. 44. – №. 22. – С. 10237–10244.
3. Пестерева Н.Н., Гусева А.Ф., Тушкова А.А. Синтез и исследование электротранспортных свойств поливольфрамов РЗЭ $\text{M}_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{81}$ (М – La, Nd) //Электрохимия. – 2025. – Т. 60. – № 3. – С. 11–17.
4. Иверонова В.И., Ревкевич Г.П. Теория рассеяния рентгеновских лучей. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1978. – С. 136.

© Лесин Д.А., Пестерева Н.Н., 2025

КИСЛОТНО-ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА ПОВЕРХНОСТИ
НАНОРАЗМЕРНОГО ФЕРРИТА ЦИНКА, СИНТЕЗИРОВАННОГО
ПО ТАРТРАТНОЙ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ ТЕХНОЛОГИИ

Мокляк М.А., Волик К.К., Муханова Е.А., Баян Е.М.

Южный федеральный университет, Ростов-на-Дону, Россия

В настоящее время ферриты со структурой шпинели применяют в области электроники, энергетических приложениях, медицине, органическом катализе и системах очистки сточных вод. ZnFe_2O_4 является доступным полупроводниковым материалом, проявляющим сорбционные и каталитические свойства. В соответствии с современными представлениями, в адсорбционных и каталитических процессах принимают участие протонные и апротонные центры на поверхности феррита цинка [1]. Также следует отметить, что качественный и количественный состав поверхности твердых веществ зависит от их природы и способа получения [2].

В связи с этим целью данной работы было исследование кислотно-основных характеристик порошка ZnFe_2O_4 , синтезированного золь-гель методом с использованием винной кислоты в качестве топлива.

Наноразмерный феррит цинка синтезировали по золь-гель технологии с применением винной кислоты в качестве топлива. Для получения органических солей железа (III) и цинка (II) использовали 0,01 моль $\text{Zn}(\text{NO}_3)_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$, 0,02 моль $\text{Fe}(\text{NO}_3)_3 \cdot 9\text{H}_2\text{O}$, 0,03 моль $\text{C}_4\text{H}_6\text{O}_6$. К реакционной смеси, содержащей тартраты цинка (II) и железа (III), добавляли раствор $\text{NH}_3 \cdot \text{H}_2\text{O}$ до $\text{pH} = 7$ и нагревали до образования геля. Для получения конечного продукта, ZnFe_2O_4 , проводили поэтапную термическую обработку геля. Сначала гелеобразную реакционную массу высушивали при 75°C , затем нагревали на песчаной бане для удаления органической составляющей смеси. Образовавшийся в результате второго этапа пористый продукт, прокаливали при 900°C в течение 2 ч.

Синтезированный порошок наноразмерного ZnFe_2O_4 был изучен рентгенофазовым анализом (РФА; дифрактометр BRUKER D2 PHASER). По результатам исследования установлено, что образец однофазный и имеет кубическую структуру (рис. 1). Средний размер частиц феррита цинка, рассчитанный по формуле Шеррера, составляет 44 нм.

Кислотно-основные свойства поверхности феррита цинка исследовали индикаторным методом, основанным на селективной адсорбции из водных растворов красителей с $\text{pK}_a = -4,4-12,8$. Анализ поверхностных характеристик проводили по методике, описанной в работе [3]. Оптические плотности растворов индикаторов измеряли на фотоколориметре КФК-2МП. Количество адсорбционных центров (q , мкмоль/г) с данным значением pK_a рассчитывали по формуле:

$$q = \frac{C \cdot V}{A_0} \cdot \left(\left| \frac{A_0 - A_1}{m_1} \pm \frac{A_0 - A_2}{m_2} \right| \right),$$

где C и V – концентрация и объем раствора индикатора; m_1 и m_2 – масса образца при измерении оптических плотностей A_1 и A_2 соответственно, A_0 – оптическая плотность холостого раствора. По результатам расчетов получен спектр распределения поверхностных центров адсорбции в координатах $q = f(pK_a)$.

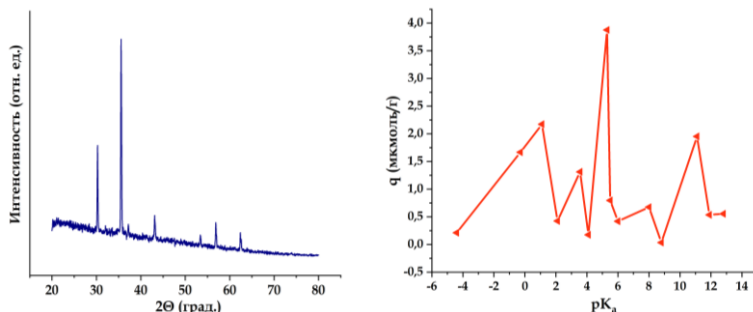


Рис.1. Рентгенограмма синтезированного феррита цинка (слева); распределение центров адсорбции на поверхности ZnFe_2O_4 (справа)

На основании экспериментальных данных установлено, что на поверхности наноразмерного ZnFe_2O_4 присутствуют преимущественно кислотно-основные центры Бренстеда. В области $pK_a = 1,1\text{--}5,5$ на спектре наблюдаются интенсивные пики, соответствующие функциональным группам $\text{M-OH}^{\delta+}$. Максимальное содержание адсорбционных центров $q = 3,9$ $\mu\text{mol/g}$ зафиксировано при $pK_a = 5,3$. В основной области расположены полосы низкой и средней интенсивности с $pK_a = 8,0; 11,1$. Также следует отметить, что для исследованного материала характерно невысокое содержание апротонных центров $\text{MO}^=$ ($pK_a = -4,4; -0,3$).

Литература

1. Akbar A., Lakshmi M.B., Das T.K., Ghosh M. Spinel ferrites in the photocatalytic and adsorptive remediation of dyes and heavy metals: A review // Journal of Water Process Engineering. – 2025. – V. 71. – P. 107259.
2. Карпова С.С. и др. Функциональный состав поверхности и сенсорные свойства ZnO , Fe_2O_3 и ZnFe_2O_4 // Физика и техника полупроводников. – 2013. – Т. 47. – № 3. – С. 369.
3. Нечипоренко А.П. и др. Специализированный практикум по физико-химическим методам анализа // Санкт-Петербург.: Редакционно-издательский отдел Университета ИТМО. – 2016.

© Мокляк М.А., Волик К.К., Муханова Е.А., Баян Е.М., 2025

ПОЛУЧЕНИЕ ГИБРИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ С BODIPY ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В МОЛЕКУЛЯРНОЙ СЕНСОРИКЕ

Молева Н.В., Бобров А.В.

*Ивановский государственный химико-технологический университет,
Иваново, Россия*

Флуоресцентные молекулы широко используются в качестве зондов для изучения физико-химических и биохимических процессов в силу высокой чувствительности метода. Спектральные характеристики флуоресцентных молекул в значительной степени зависят от параметров их микроокружения. Бор-дипириновые комплексы (**Boron-dipyrrins** или BODIPY) являются одними из наиболее исследуемых и востребованных люминофоров для разработки флуоресцентных сенсоров и меток, что обусловлено их высокой фотостабильностью, значительным откликом и высоким квантовым выходом флуоресценции. Благодаря этим характеристикам, BODIPY нашли применение в различных областях науки и техники. Люминофоры на основе BODIPY демонстрируют выраженную чувствительность к изменениям в окружении, что позволяет создавать сенсоры для определения конкретных молекул, например, ацетон, этанол и бензол. Это открывает перспективы для диагностики заболеваний *in vivo* и мониторинга концентрации паров растворителей в воздухе на промышленных объектах и в лабораторных условиях. Тем не менее, значительная часть существующих сенсоров функционирует в жидкой среде, что влечет за собой определенные трудности в использовании. Альтернативным способом решения этой проблемы является иммобилизация молекул сенсоров в состав твердых матриц-носителей. Данная стратегия способствует увеличению стабильности, чувствительности и селективности полученного сенсора.

В данном исследовании представлено получение материалов с мезо-фенил/пиридин/сукцинимид/дибутиламинофенил производными BODIPY, закрепленных в матрицах из этилцеллюлозы, фильтровальной бумаги и полиметилметакрилата (ПММА). Проведено изучение их сенсорных характеристик.

В результате работы были получены разнообразные гибридные материалы с иммобилизованными молекулами BODIPY. Установлено воздействие паров органических растворителей на изменение их флуоресцентных параметров. Обнаружено, что материалы, включающие сукцинимид-BODIPY, могут найти применение для оценки степени свежести продуктов питания, в частности, мяса курицы и рыбы. Показано, что материалы с пиридин-BODIPY проявляют сенсорный отклик на пары сероводорода. Подтверждена перспективность применения гибридных

материалов с фенил-BODIPY люминофором в качестве сенсоров на наличие паров ацетона и бензола, а также рассчитаны их пределы обнаружения.

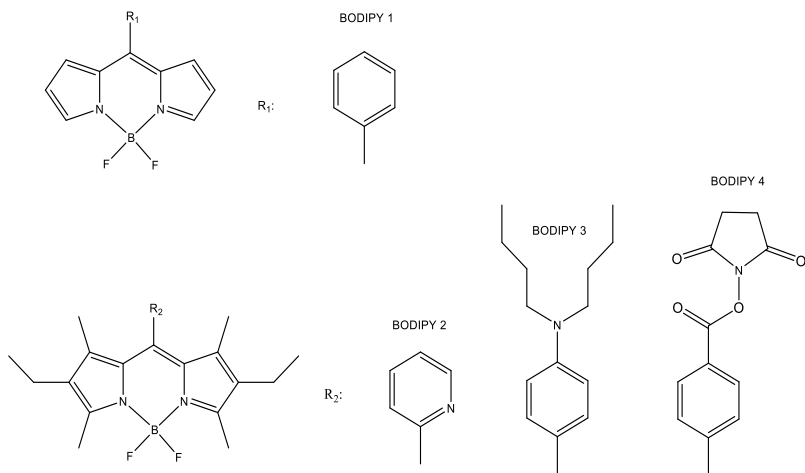


Рис. 1. Структуры используемых красителей BODIPY

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (грант No. 25-23-20244).

© Молева Н.В., Бобров А.В., 2025

УДК 541.64:532.77

ИССЛЕДОВАНИЕ МОРФОЛОГИИ НАНОЧАСТИЦ СЕЛЕНА, СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ КОКАМИДОПРОПИЛАМИНОКСИДОМ Назаретова Е.Д., Рехман З.А., Голик А.Б., Голик Д.Б., Пирогов М.А. Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, Россия

Селен участвует в синтезе 25 селенопротеинов, обладающих антиоксидантными свойствами, что обуславливает его применение в борьбе с заболеваниями, вызванными окислительным стрессом. Наночастицы селена имеют большой научный потенциал по сравнению с его неорганической формой: они обладают большей биодоступностью, меньшей токсичностью, способностью постепенно выводиться из организма, а также большей противораковой активностью.

В данной работе приведены результаты исследования морфологии наночастиц селена, стабилизированных кокамидопропиламинооксидом. Синтез наночастиц проводили методом восстановления в водной среде. Прекурсором выступала селенистая кислота, а восстановителем –

аскорбиновая кислота. Полученные образцы исследовали методом пронизывающей электронной микроскопии. Результаты приведены на рисунке 1 (а и б).

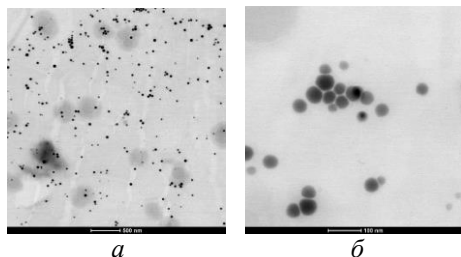


Рис. 1. Результаты сканирующей электронной микроскопии наночастиц селена, стабилизированных кокамидопропиламинооксидом: а – приближение 500 нм, б – приближение 100 нм

В результате проведения просвечивающей микроскопии установлено, что наночастицы селена обладают сферической формой, диаметр варьируется от 10 до 50 нм. Частицы в образце распределены равномерно. Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 23-16-00120, <https://rscf.ru/en/project/23-16-00120/>.

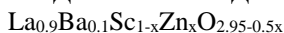
Литература

1. Bisht N., Phalswal P., Khanna P.K. Selenium nanoparticles: A review on synthesis and biomedical applications //Materials Advances. – 2022. – Т. 3. – №. 3. – С. 1415-1431.

© Назаретова Е.Д., Рехман З.А., Голик А.Б., 2025

УДК 541.14:547.551.2

ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ТВЁРДОГО РАСТВОРА



Пачина С.П., Белова К.Г., Корона Д.В., Анимица И.Е.

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

На сегодняшний день сложные оксиды со структурой перовскита являются перспективными для изучения материалами, так как могут быть использованы в качестве протонных проводников способных адаптировать дефицит кислорода и инкорпорировать протоны.

В данной работе были изучены физико-химические характеристики сложных оксидов на основе перовскита LaScO_3 . Перовскит LaScO_3 является широко используемой матрицей для синтеза новых электролитов, обладающих высокой ионной проводимостью и химической стабильностью.

Для осуществления растворного метода синтеза образцов $\text{La}_{0.9}\text{Ba}_{0.1}\text{Sc}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_{2.95-0.5x}$, где $(0.025 - 0.1)$ нами был выбран модифицированный метод Печини. Полученный в ходе растворного синтеза порошок дожигали на воздухе при ступенчатом повышении температуры в интервале $700 - 1400^\circ\text{C}$. Методом РФА было установлено, что полученные перовскиты кристаллизуются в ромбической симметрии с пр. гр. *Pbmm*.

Используя метод электрохимического импеданса, получили температурные зависимости общей электропроводности в интервале температур $250 - 990^\circ\text{C}$ в сухой ($p\text{H}_2\text{O} = 10^{-5}$ атм) и влажной ($p\text{H}_2\text{O} = 2 \cdot 10^{-2}$ атм) атмосферах воздуха и азота. Было установлено, что наибольшими значениями электропроводности обладает состав с содержанием цинка в В-подрешетке $x=0.025$. Также были проведены расчеты парциальных проводимостей и установлены Т- $p\text{O}_2$ интервалы доминирования каждого типа носителя.

© Пачина С.П., Белова К.Г., Корона Д.В., Анимца И.Е., 2025

УДК 577.1

ВЛИЯНИЕ САЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ НА МАССУ И ВЫСОТУ ПШЕНИЦЫ ПРИ ДОБАВЛЕНИИ В СРЕДУ МЕДИ, КАДМИЯ И ЦИНКА Рахматуллина С.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Последствия загрязнения окружающей среды тяжелыми металлами вредоносны. Кадмий, цинк и медь являются важными металлами при изучении проблемы загрязнений, они широко распространены в мире и обладают токсичными свойствами.

Кадмий и цинк обнаружены в сульфидных осадках. Источниками загрязнения почв медью являются горнодобывающая и перерабатывающая промышленность, агропромышленное производство, использующее препараты меди для борьбы с болезнями и вредителями.

Присутствие тяжелых металлов в окружающей среде приводит к различным нарушениям метаболизма растений, что в конечном итоге отражается на их ростовых характеристиках.

Салициловая кислота - эндогенный регулятор роста фенольной природы [1], влияет на рост растений ячменя [2]; рост и продуктивность пшеницы [1].

В ходе работы выявлено, что использование меди, цинка и кадмия угнетало накопление массы пшеницы.

На среде с медью масса побегов и корней снижалась на 16,78% и 17,2%, на среде с цинком масса побегов и корней снижалась на 14,25% и 13,6%, на кадмие масса побегов и корней снижалась на 11,72% и 10,98%.

Салициловая кислота увеличивала накопление массы надземной и подземной частей растений: на меди на 15,13% и 14,03%; на цинке на 11% и 7,8%; на кадмие на 15,15% и 2,7%.

Что касается роста пшеницы в длину, выявлено следующее: на среде с медью снижение роста побегов и корней на 16,78% и 17,2%, на среде с цинком снижение роста побегов и корней на 14,25% и 13,16%, на среде с кадмием снижение роста побегов и корней на 11,72% и 10,98%.

На салициловой кислоте наблюдалось усиление роста пшеницы в длину, как побегов, так и корней.

Салициловая кислота увеличивала накопление массы побегов и корней пшеницы и рост растений в длину.

Литература

1. Pancheva T.V., Popova L.P., Uzunova A.N. Effects of salicylic acid on growth and photosynthesis in barley plants // J. Plant Physiol. 1996. V. 149. P. 57-63.
2. Larque-Saavedra A., Martin-Mex R. Effects of salicylic acid on the bioproductivity of plants // Springer. 2007. P. 15-23.

© Рахматуллина С.Р., 2025

УДК 666.3

ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕРАМИКИ YAG:RU ПРИ ИЗМЕНЕНИИ ТИПА СПЕКАЮЩИХ ДОБАВОК

Супрунчук В.Е., Бедраков Д.П.

Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, Россия

Керамический иттрий-алюминиевый гранат (YAG) выступает как универсальная матрица, позволяющая включать в свою структуру широкий спектр примесных атомов. При этом, по сравнению с матрицей монокристалла YAG, в керамической матрице YAG обеспечивается высокая однородность распределения лигатуры [1]. Введение дополнительных ионов в структуру матрицы YAG позволяют изменять оптические, механические и тепловые свойства граната [2]. На валентное состояние примесных ионов может влиять не только матрица, но и тип применяемых спекающих добавок.

Рутений относится к $5s^1 4d^7$ элементам и проявляет переменную валентность. Наиболее стабильной валентностью в оксидных системах для рутения является IV [3]. В некоторых соединениях рутений может проявлять нестабильную валентность III [4].

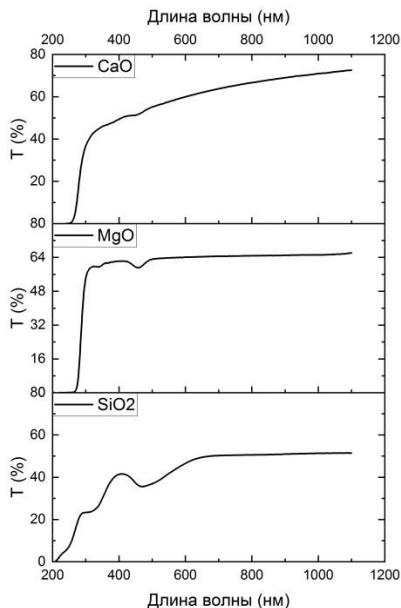


Рис 1. Коэффициент светопропускания керамики YAG:Ru, при варьировании типа спекающих добавок

Для получения прозрачной керамики YAG:Ru в работе были использованы CaO, SiO₂, MgO в качестве спекающих добавок. Были изучены показатели коэффициента светопропускания полученных образцов (рис 1). Спектр светопропускания снимали с помощью спектрофотометра СФ-56. Толщина образцов составила $2 \pm 0,01$ мм. Синтез керамики проводился путем вакуумного спекания керамических порошков при температуре 1850 °С.

В ходе работы определено, что двухвалентные спекающие добавки CaO и MgO улучшали оптические характеристики керамики. При применении SiO₂ коэффициент светопропускания несколько снижался и составил 50.5% на длине волны 1100 нм. Спектр светопропускания образцов с добавкой SiO₂ имеет две полосы поглощения в области 360 и 460 нм. Полученные результаты могут быть применимы для рассмотрения возможности применения YAG:Ru в качестве материала для оптики и имеют важное фундаментальное и промышленное значение.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, проект 24-73-00023, (<https://rscf.ru/project/24-73-00023/>)

Литература

1. Santos J.C.A. et al. Structural, microstructural, and luminescent properties of laser-sintered Eu-doped YAG ceramics // Opt. Mater. – 2019. – Vol. 89. – P. 334-339.
2. Timoshenko A.D. et al. Highly-doped YAG:Sm³⁺ transparent ceramics: Effect of Sm³⁺ ions concentration // Ceram. Int. – 2023. – Vol. 49, № 5. – P. 7524-7533.
3. Zhang L. et al. Peculiar magnetotransport properties in epitaxially stabilized orthorhombic Ru³⁺ perovskite LaRuO₃ and NdRuO₃ // Commun. Mater. – 2024. Vol. 5, № 1. – P. 35.
4. Patel B.K. et al. Hydrothermal synthesis of lanthanide ruthenate single crystals // J. Cryst. Growth. 2023. – Vol. 602. – P. 126979.

© Супрунчук В.Е., Бедраков Д.П., 2025

УДК: 546.72; 546.57

ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО СОСТАВА НАНОКОМПОЗИТА ГЕКСАЦИАНОФЕРРАТА ЖЕЛЕЗА С СЕРЕБРОМ

Татов А.В., Шевченко И.М., Пирогов М.А., Назаретова Е.Д., Серов А.М.
Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, Россия

Гексацианоферрат железа (ГЦФ) является одним из первых известных координационных соединений. Он обладает уникальными электрохимическими, каталитическими и сорбционными свойствами, что делает его перспективным материалом для применения в химических сенсорах [1, 2]. При введении наночастиц (НЧ) серебра в его структуру улучшается электропроводность, стабильность и каталитическая активность соединения. Это позволяет использовать наноконпозиты ГЦФ железа с серебром как основу различных химических сенсоров.

Таким образом, целью данной работы является исследование наноконпозита гексацианоферрата железа с серебром с помощью рентгенофазового анализа.

Для получения наноконпозита использовали следующую методику: в 13,6% этиловый спирт добавляли 0,112 моль поливинилпирролидона (ПВП), параллельно готовился раствор нитрата серебра с концентраций $C_M=0,944$ моль/л, затем полученные растворы смешивали при температуре 50°C с 0,815 моль ГЦФ железа. Полученные золи отмывали методом центрифугирования, отмытые осадки сушили при 100°C на протяжении 10 часов. Порошок наноконпозита исследовали методом порошковой дифрактометрии (рентгенофазовый анализ) на рентгеновском дифрактометре *Empyrean* серии 2. Полученная дифрактограмма представлена на рисунке 1.

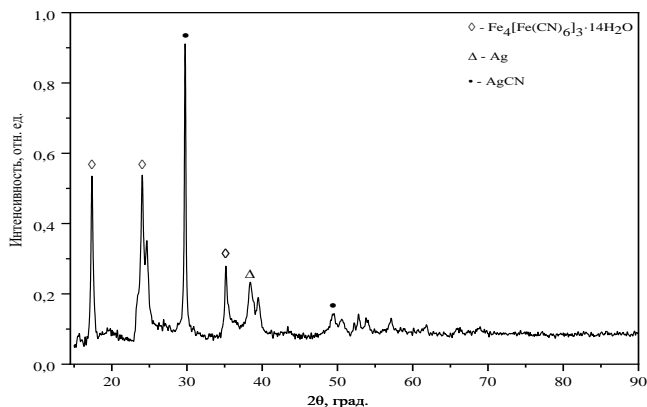


Рис. 1. Дифрактограмма нанокompозита гексацианоферрата железа с серебром

Анализ полученной дифрактограммы показал наличие кристаллических фаз ГЦФ железа в виде кристаллогидрата ($\text{Fe}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]_3 \cdot 14\text{H}_2\text{O}$) с пространственной группой Fm-3m и кубической структурой, а также рефлексы металлического серебра (111) с ГЦК-структурой. Также присутствуют дополнительные фазы (AgCN). Полученные данные подтверждают формирование двухфазного нанокompозита.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-00111, <https://rscf.ru/project/25-23-00111/>

Литература

1. Chen S.M. Preparation, characterization, and electrocatalytic oxidation properties of iron, cobalt, nickel, and indium hexacyanoferrate //Journal of Electroanalytical chemistry. – 2002. – Т. 521. – №. 1-2. – С. 29-52.
2. Widmann A. et al. Structure, insertion electrochemistry, and magnetic properties of a new type of substitutional solid solutions of copper, nickel, and iron hexacyanoferrates/hexacyanocobaltates //Inorganic Chemistry. – 2002. – Т. 41. – №. 22. – С. 5706-5715.

© Татов А.В., Шевченко И.М., Пирогов М.А., Назаретова Е.Д., Серов А.М., 2025

УДК 661.875`022-13

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА СТАБИЛИЗАЦИИ НАНОЧАСТИЦ Cr_2O_3 АЛКИЛДИМЕТИЛБЕНЗИЛАММОНИЯ ХЛОРИДОМ

Филиппов Д.Д., Нагдалян А.А., Серов А.М., Татов А.В., Голик Д.Б.

Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, Россия

Наночастицы оксида хрома (III) (Cr_2O_3) обладают высокой химической стабильностью и термостойкостью, что делает их идеальными для использования в агрессивных средах и при высоких температурах.

Благодаря высокой твердости и устойчивости к истиранию, они широко применяются в качестве абразивных материалов и защитных покрытий [1]. Кроме того, наночастицы Cr_2O_3 демонстрируют отличные каталитические свойства, что позволяет использовать их в различных химических процессах, включая разложение органических загрязнителей и окислительно-восстановительные реакции. Магнитные свойства оксида хрома также делают его перспективным для применения в сенсорах и других диагностических устройствах. Ввиду этих уникальных характеристик наноразмерный оксид хрома нашел широкое применение в катализе, разработке высокопрочных покрытий, производстве абразивных материалов, сенсоров и фотокатализе, что способствует повышению эффективности промышленных процессов и экологической безопасности.

Для улучшения вышеуказанных свойств наночастицы оксида молибдена стабилизируют поверхностно-активными веществами (ПАВ), такими как алкилдиметилбензиламмония хлорид (Катамин АБ). Катамин АБ выполняет роль антибактериального стабилизатора, защищающего системы от микробного загрязнения.

В данной работе синтезирован наноразмерный Cr_2O_3 , стабилизированный Катамином АБ, методом химического осаждения в водной среде и последующего разложения получившегося гидроксида хрома ($Cr(OH)_3$). В качестве прекурсора хрома использовали хром треххлористый 6-водный, в качестве растворителя – дистиллированную воду, в качестве осадителя – карбонат натрия, а в качестве стабилизатора – Катамин АБ. Получено 4 образца с массовой долей (ω) Катамина АБ 0,001 %; 0,01 %; 0,1 % и 1 %.

Полученные образцы исследовали методом инфракрасной (ИК) спектроскопии. Получены ИК-спектры Катамина АБ, образца Cr_2O_3 без стабилизатора и образца Cr_2O_3 , стабилизированного Катамином АБ ($\omega = 1$ %). Анализ полученных спектров показал, что взаимодействие наноразмерного Cr_2O_3 с Катамином АБ происходит через ионизированную аминогруппу NH_2^+ на участке 1653 см^{-1} .

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

Литература

1. Бугров А.Н., Альмяшева О.В. Формирование наночастиц Cr_2O_3 в гидротермальных условиях // Наносистемы: физика, химия, математика. – 2011. – Т. 2. – №. 4. – С. 126-132.

© Филиппов Д.Д., Нагдалян А.А., Серов А.М.,
Татов А.В., Голик Д.Б., 2025

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ КЕРАМИКИ ZrO_2 ,
СТАБИЛИЗИРОВАННОЙ ДОБАВКАМИ РЗЭХорошавцева Н.В.^{1,2}, Денисова Э.И.^{1,3}, Карташов В.В.^{1,3}, Меркулов О.В.²,
Захарова Е.Н.¹¹Уральский федеральный университет им. первого Президента России
Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия²Институт химии твердого тела УрО РАН, Екатеринбург, Россия³Институт металлургии УрО РАН, Россия, Екатеринбург, Россия

Керамические материалы системы ZrO_2 – Y_2O_3 – Sc_2O_3 с кубической структурой привлекают внимание в качестве материалов электролитов твердооксидных топливных элементов, что обусловлено высокой электропроводимостью материала, которую обеспечивает близость ионных радиусов катионов Zr^{4+} и Sc^{3+} , а также способностью иттрия в какой-то мере замедлять деградацию при длительной работе элемента при высоких температурах. Количество допанта в ZrO_2 оказывает ведущее влияние на преобладание кислород-ионной проводимости, на фазовые изменения, деградацию или стабильность материала. Данные, полученные разными исследователями, свидетельствуют о том, что максимум проводимости наблюдается при содержании допанта в ZrO_2 на уровне 8–9 мол. % Y_2O_3 [1]. Поэтому предметом исследований в данной была керамика из диоксида циркония, в которой общее количество допирующих оксидов – Y_2O_3 и Sc_2O_3 тоже составляло 8 мол. %, при этом содержание самих оксидов было разным: ZrO_2 –5 мол. %–3 мол. % Sc_2O_3 (Zr_5Y_3Sc); ZrO_2 –4 мол. % Y_2O_3 –4 мол. % Sc_2O_3 (Zr_4Y_4Sc); ZrO_2 –3 мол. % Y_2O_3 –5 мол. % Sc_2O_3 (Zr_3Y_5Sc).

Порошки для изготовления керамики были получены самостоятельно методом нитрат-органического синтеза. Вследствие того, что температура синтеза не была достаточной для формирования кристаллической структуры диоксида циркония, порошки дополнительно прокаливали при 800° С. Спрессованную керамику обжигали при 1650° С.

Кристаллическая структура всех образцов вне зависимости от их химического состава на 100 % состояла из кубической фазы (рис. 1). В то время как кажущаяся плотность незначительно, но все же уменьшалась по мере уменьшения содержания Y_2O_3 : 5,21 г/см³ у Zr_5Y_3Sc ; 5,19 г/см³ у Zr_4Y_4Sc и 4,85 г/см³ у Zr_3Y_5Sc . Микроструктуру исходных образцов рассматривали на свежих изломах с помощью сканирующего электронного микроскопа (рис. 2).

Образцы предназначены для изучения деградации керамики в условиях длительного (5000 часов) высокотемпературного отжига в печи при 950° С. Измерения электрической проводимости будут проводится после каждой 1000 часов отжига.

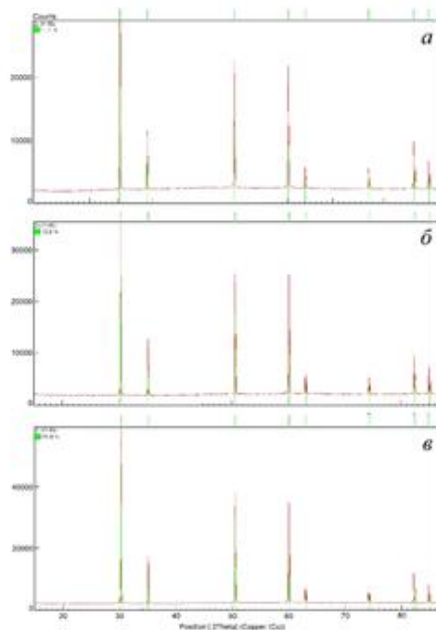


Рис. 1. Дифрактограммы керамических образцов: а – $\text{Zr}_3\text{Y}_5\text{Sc}$, б – $\text{Zr}_4\text{Y}_4\text{Sc}$, в – $\text{Zr}_5\text{Y}_3\text{Sc}$.

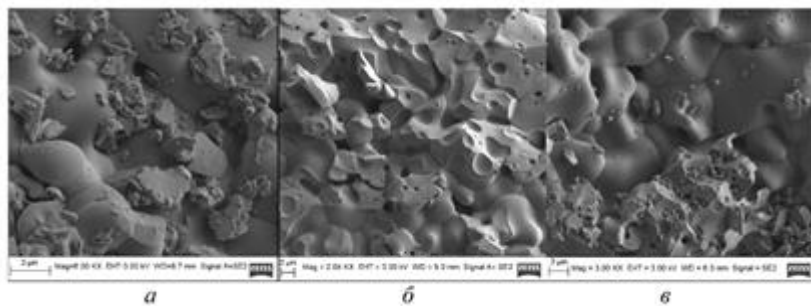


Рис. 2. СЭМ-изображения изломов керамических образцов: а – $\text{Zr}_3\text{Y}_5\text{Sc}$, б – $\text{Zr}_4\text{Y}_4\text{Sc}$, в – $\text{Zr}_5\text{Y}_3\text{Sc}$.

Литература.

1. S. Hull, (2004) Rep. Prog. Phys., 67, 1233–1314.

© Хорошавцева Н.В., Денисова Э.И.,
Карташов В.В., Меркулов О.В., Захарова Е.Н., 2025

ИЗУЧЕНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ ТЕТРАГИДРОФУРАНОЛА-3 И ОКСИМАТЕТРАГИДРОФУРАНОНА-3 С ИОНАМИ Cu(II) И Zn(II)

Худайгулова И.Г., Охиров Ш.М., Гарифуллин М.Ф.,
Берестова Т.В., Латыпова Э.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

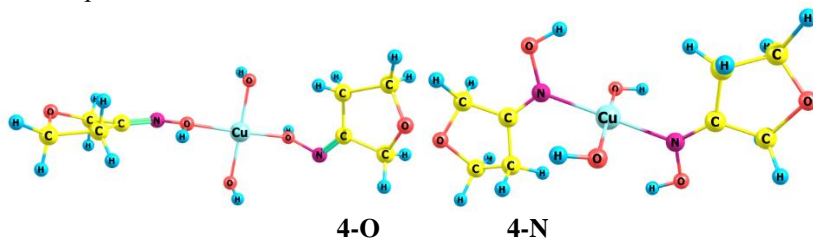
Чаще всего тетрагидрофуранолы и оксимы являются промежуточными звеньями в общих синтезах или субъединицами более крупных соединений. Подобные соединения являются полезными фармацевтическими веществами, которые проявляют биологическую активность и используются в качестве противоопухолевых, противовирусных и антибактериальных средств [1]. Известно, что в ряде случаев, комплексообразование с ионами металлов усиливает биологически активную функцию органических лигандов.

В данной работе мы изучили комплексообразование тетрагидрофуранола-3 (ТГФол-3) (1) и оксима тетрагидрофуранона-3 (оксимТГФона-3) (в виде *син*- и *анти*-изомеров 1:1) (**2a,b**) с ионами Cu(II) и Zn(II).

Было установлено, что в отличие от ТГФола-2 [2] ТГФол-3 (1) практически не участвует в комплексообразовании с ионами Cu(II) и Zn(II), что может быть связано с его необычной химической устойчивостью [3].

Комплексообразование оксимаТГФона-3 (*син*- и *анти*-) с ионами Cu(II) и Zn(II) подтверждено методом ИК-спектроскопии, а также квантовохимическим моделированием. В таблице представлены сравнительные данные теоретических и экспериментальных ИК спектров исходных лигандов и комплексных соединений на их основе. В соответствии с полученными результатами, был сделан вывод о том, что оба изомера оксимаТГФона-3 (**2a,b**) способны образовывать комплексные соединения состава $[Zn(\text{оксимТГФон-3})_2](3)$ и $[Cu(\text{оксимТГФон-3})_2](4)$.

Известно, что в большинстве случаев оксимы координируются через атом азота, однако в литературе описаны комплексы, где координация оксима может осуществляться и через атом кислорода [4]. В этой связи полученные комплексы были изучены с применением квантовохимического моделирования.



Кроме того, комплексообразование в этом случае может протекать с образованием моно- или полиядерных комплексов [5].

Согласно полученным данным, энергия комплексообразования оксимов (**2a,b**) через атом азота 4-N является более выгодной по сравнению с координацией через атом кислорода 4-O. На основании полученных данных был сделан вывод о том, что комплексообразование оксимов (**2a,b**) осуществляется через атом азота.

Сводная таблица ИК характеристик соединений

Соединение	$\nu(\text{CH}_2, \text{CH})$	$\nu(\text{C-O})+\delta(\text{CH}, \text{CH}_2)$	$\nu(\text{C-O-C}_{\text{as}})+\delta(\text{CH}, \text{CH}_2)$	$\nu(\text{C-O-C}_s)+\delta(\text{CH}, \text{CH}_2)$
ТГФол-3 (1) _{теор.}	3028(87) 3014(88) 2989(104)	1386(45) 1316(84) 1279(42) 1253(49)	1134(71) 1104(242)	910(54)
ТГФол-3 (1) _{эксп.}	2980ср. 2954ср. 2880ср.	1308сл. 1275сл. 1230 ср.	1121ср. 1067ср. 1044ср.	999ср. 969ср. 892ср.
оксимТГФона-3 (син)(2a) _{теор.}	3003(102) 2983(46)	1411(81)	1156(134)	961(183) 828(24)
оксимТГФона-3(анти)(2b) _{теор.}	3006(96) 2991(63)	1423(120)	1156(141)	976(155) 966(220)
оксимТГФона-3(2) _{эксп.}	2928сл. 2871ср.уш.	1424ср. 1427ср. 1358ср.уш. 1229ср.	1182ср. 1087с 1052с.	979ср. 955ср. 932с. 912ср.
[Zn(оксимТГФона-3) ₂](3)	2955сл. 2926ср. 2855ср.	1439ср. 1356ср. 1356ср.	1123ср. 1027ср.	983 ср. 969ср., 931ср.
[Cu(оксимТГФона-3) ₂](4)	3000сл. 2914сл.	1435ср. 1420ср. 1406сл. 1318ср.	1138ср. 1022с.	997 сл. 954ср.

Литература

1. Greaney L. Enantioselective chemoenzymatic synthesis of 3-hydroxytetrahydrofurans. PhD Thesis, University College Cork – 2015
2. Halvagar M.R., Tolman W.B. // *Inorg. Chem.* 2013, 52, 15, 8306-8308
3. Хурсан С.Л., Семеско // Вест. БашГУ 2003, 2, 19
4. E. Rundle, C.V. Banks // *J. Phys. Chem.* – 1963 – V.67. – N.2. – p.508-509
5. Р.Р. Низамов, Д.В. Байгозин. Синтез и изучение свойств комплексных соединений переходных металлов с оксимом ацетона // Молодой ученый. – 2021. – № 35 (377). – С. 3-7.

© Худайгулова И.Г., Охиров Ш.М., Гарифуллин М.Ф., Берестова Т.В.,
Латыпова Э.Р., 2025

ПОИСК ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ
ИОНООБМЕННОГО СИНТЕЗА ПОРОШКОВ YAG

Шидловская П.К., Шергин А.В., Белая Е.А.

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Алюмоиттриевый гранат ($Y_3Al_5O_{12}$, YAG) является перспективной неорганической матрицей для ионов редкоземельных элементов (РЗЭ), что придает материалу новые свойства, применяемые в различных технологиях.

Основным недостатком традиционных методов синтеза YAG является необходимость высокотемпературной обработки, приводящей к агрегации частиц, что ухудшает свойства продукта [1]. Снизить температуру формирования фазы YAG позволяет катионообменный синтез, однако оптимальные условия проведения данного метода остаются малоизученными.

Таким образом, целью работы является установление оптимальных условий проведения катионообменного синтеза монофазных образцов алюмоиттриевого граната с максимальным выходом.

Образцы $Y_3Al_5O_{12}$ получали с использованием катионообменного материала, предварительно синтезированного методом гетерогенного сульфирования полистирола 98% раствором H_2SO_4 на песчаной бане при 150 – 200°C. Для этого стехиометрические количества нитратов иттрия и алюминия растворяли в 100 мл дистиллированной воды при непрерывном перемешивании. Далее в полученный раствор вводили катионообменный материал и перемешивали в течение 15 – 60 минут. После завершения ионообменного процесса катионит с адсорбированными катионами отделяли от остатков маточного раствора на воронке Бюхнера и высушивали в сушильном шкафу при 120°C в течение 12 часов. Термическую обработку высушенных образцов проводили в муфельной печи при температурах 800 – 1000°C с выдержкой 3–5 часов.

По данным РФА образцы YAG с максимальным выходом чистого продукта получены при использовании предварительно промытых 10 г катионита без их отделения от маточного раствора после ионного обмена, протекающего в течение 30 мин с последующей термообработкой при 1000°C в течение 3 ч или 850°C в течение 5 ч.

Литература

1. Berends A.C., van de Haar M.A., Krames M.R. YAG: Ce³⁺ phosphor: from micron-sized workhorse for general lighting to a bright future on the nanoscale // Chemical Reviews. – 2020. – Т. 120. – №. 24. – С. 13461–13479.

© Шидловская П.К., Шергин А.В., Белая Е.А., 2025

Коррозией металлов называется окислительно-восстановительный процесс самопроизвольного разрушения металлов в результате их взаимодействия с окружающей средой [1]. Коррозия стали в морской воде является одной из наиболее актуальных проблем в области материаловедения и инженерии. Морская вода представляет собой агрессивную среду, содержащую высокие концентрации хлоридов, сульфатов и других солей, которые ускоряют коррозионные процессы. Сталь, широко используемая в судостроении, морских платформах и прибрежных сооружениях, подвергается значительному воздействию этой среды, что приводит к снижению её прочности и долговечности.

Для проверки влияния морской воды на коррозию хромистых сталей опытным путем, было произведено моделирование условий эксплуатации.

Сталь марки 07Х16Н6 является аустенитно-мартенситной хромистой сталью, высокопрочной коррозионно-стойкой, с содержанием углерода от 0,05 % до 0,09 %, хрома от 15,50 % до 17,50 % и содержанием никеля от 5 % до 8 %. Для испытаний были подготовлены образцы стали 07Х16Н6 длиной 40 мм, шириной 10 мм и высотой 4 мм после шлифовки и полировки.

Температура проведения испытания – 25 °С, давление 2,6 МПа, морская среда воспроизведена путем смешивания в растворе солей NaCl, CaCl₂, MgCl₂. В раствор после проведения всех необходимых приготовлений, вводился сероводород в концентрации 100 %, так как моделируется не только морская среда, но и серосодержащая. Для того, чтобы проследить процесс коррозии во времени, образцы помещали в. Образцы помещали в раствор морской воды на 48, 144 и 240 часов.

Можно утверждать, что с течением времени в стали происходят превращения аустенитной формы в мартенситную. Чем дольше сталь находится под влиянием среды, тем больше становятся кристаллы мартенсита, а значит, меняется балльность структуры.

Анализ микроструктуры показал, что коррозия стали в морской воде, является сложным процессом, зависящим от множества факторов. Наиболее агрессивным фактором является возникновение мартенситного превращения по границам зерен аустенита, за счет которого развивается межкристаллитная коррозия и возникает потеря массы.

Литература

СЕКЦИЯ
«ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

ВОССТАНОВИТЕЛЬНОЕ АМИНИРОВАНИЕ АЗОМЕТИНОВ И
ПРОГНОЗ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ

Акимова Е.С., Султанова Р.М.

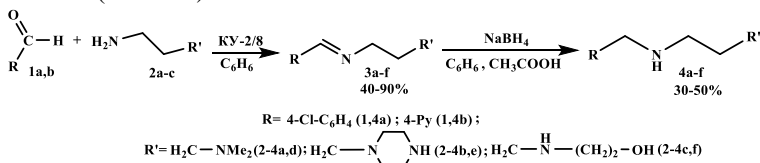
*Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Уфа, Россия*

Реакция карбонильных соединений с аминами, включающими в себя фармакологически значимые фрагменты, приводит к синтезу имино-соединений, имеющих большое значение как в фармацевтике, так и в нефтехимии. Эти имины выступают в роли комплексообразователей, создающих хелатные структуры, которые активно используются в качестве катализаторов в органических реакциях. Производные оснований Шиффа, обладающие биологической активностью, проявляют широкий спектр эффектов: от противоэпилептического и антидепрессивного до противовоспалительного, обезболивающего, антиагрегантного, антибактериального. Биологическую активность демонстрируют и восстановленные варианты иминов.

Конденсацией ароматических альдегидов **1a-b** с замещенными диаминами **2a-c** в бензоле, в присутствии катализатора КУ-2/8 при температуре 80°C были получены имины **3a-f** с выходами 40-90%.

Дальнейшее восстановление полученных иминов **3a-f** в присутствии NaBH_4 в бензоле в ледяной уксусной кислоте осуществлялось при пониженной температуре.

Идентификация и структурное подтверждение образованных соединений **3-4a-f** были выполнены на основе данных ИК- и ЯМР спектроскопии (^1H и ^{13}C).



Прогноз биологической активности в интернет-версии программы PASS, показал, что вторичные амины **4a-f** являются перспективными для лечения фобических и невротических расстройств, могут применяться как активаторы кальциевых каналов и антагонисты никотиновых рецепторов.

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

Литература

1. Senthil Kumar Raju, Archana Settu, Archana Thiyagarajan, Divya Rama, Praveen Sekar, Shridharshini Kumar. // Biol. Pharm. Sci. 21 (3): 203-215. 2022.

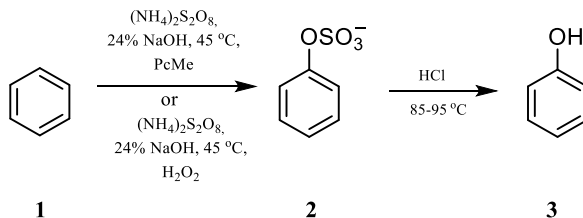
УДК 547.565.2.

ПЕРСУЛЬФАТНОЕ ОКИСЛЕНИЕ БЕНЗОЛА

Акназарова Н.В.¹, Хазимуллина Ю.З.², Гимадиева А.Р.²¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия²Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Персульфатное окисление, известное как реакции Эльбса и Бойленда-Симса, используется для гидроксирования фенолов и ароматических аминов [1]. Реакции представляют собой 2-стадийный процесс с образованием сульфатного эфира на 1 стадии и его последующего кислотного гидролиза. Реакции приложены к большому кругу фенолов и ариламинов различного строения [2]. Персульфатное окисление обычно проводят в мягких условиях, при комнатной температуре, однако выходы целевых продуктов, как правило, невысоки. Нами разработаны 2 модификации условий реакций Эльбса и Бойленда-Симса, заключающиеся в использовании металлофталацианиновых катализаторов либо пероксида водорода, как соокислителя, и позволившие значительно увеличить выходы продуктов [3].

Впервые нами изучена возможность гидроксирования бензола (**1**) в условиях реакции персульфатного окисления. Оказалось, что бензол также подвергается окислению с образованием фенола (**3**). В отсутствие катализаторов/пероксида водорода выход промежуточного фенилсульфата **2** не превышал 27%. При добавлении в реакционную смесь катализаторов выход интермедиата **2** повысился до 58-90%, пероксида водорода – до 57-67%.



Литература

1. Behrman, E.J. // Org. React. – 1988. – V. 35. – P. 421-511.
2. Behrman, E.J. // Mini-Reviews in Organic Chemistry. – 2021. – V. 18. – P. 621-625.
3. Gimadieva A.R., Khazimullina Yu.Z., Gilimkhanova A.A., Mustafin A.G. // Beilstein J. Org. Chem. – 2024. – V. 20. – p. 2599-2607.

© Акназарова Н.В., Хазимуллина Ю.З., Гимадиева А.Р., 2025

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ИНГИБИТОРОВ
ЯНУС-КИНАЗЫ JAK2

Алмазова А.В., Кострюков С.Г.

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

Ингибиторы янус-киназ относятся к группе пероральных таргетных синтетических базисных противовоспалительных препаратов, которые оказывают действие на внутриклеточную систему JAK/STAT, опосредующую эффекты различных цитокинов и других молекул [1].

В своем исследовании методами молекулярного докинга (Schrödinger, Maestro) был оценен потенциал ингибиторной активности новых соединений, сгенерированных методом BREED из структур известных ингибиторов. Для расчетов была использована трехмерная структура JAK2 в комплексе с барицитинибом (код 6VN8 в PDB). В качестве контроля в расчетах использовали энергию связывания для молекулы барицитиниба.

В результате проведенного молекулярного докинга было отобрано 5 соединений-лидеров (рис.1), которые демонстрируют более эффективное связывание с янус-киназой JAK2.

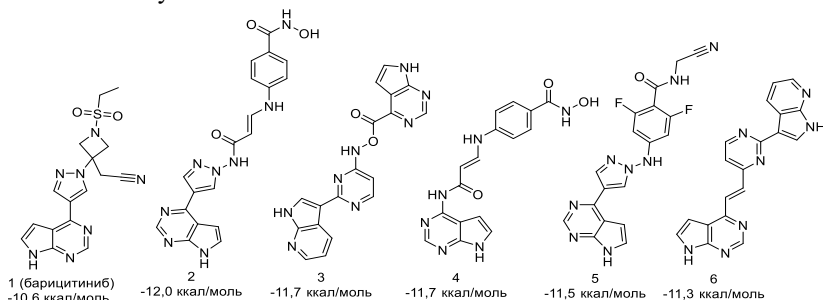


Рис. 1. Структурная формула барицитиниба 1 и соединений-лидеров 2-6 со значениями свободной энергией связывания (Docking score) с янус-киназой JAK2

Следует отметить, что у соединений-лидеров свободная энергия связывания выше, чем у барицитиниба, что обещает высокую ингибирующую активность соединений 2-6 по отношению к янус-киназе JAK2.

Литература

1. Angelini, J. JAK-Inhibitors for the Treatment of Rheumatoid Arthritis: A Focus on the Present and an Outlook on the Future / J. Angelini, R. Talotta, R. Roncato, G. Fornasier, G. Barbiero, L. Dal Cin, S. Brancati, F. Scaglione // Biomolecules. – 2020. – Vol. 10, Issue 7. – P. 1002. – DOI 10.3390/biom10071002.

© Алмазова А.В., Кострюков С.Г., 2025

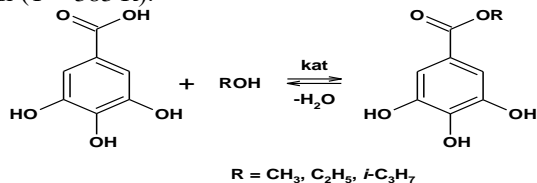
ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ ЭТЕРИФИКАЦИИ ГАЛЛОВОЙ КИСЛОТЫ
С АЛИФАТИЧЕСКИМИ СПИРТАМИ

Андреева Е.А., Сизенко М.А., Карасева И.Н., Попова Ю.В.

Самарский государственный технический университет, Самара, Россия

Производные галловой кислоты встречаются в растениях, фруктах, в пищевых продуктах и лекарственных веществах. Производные галловой кислоты проявляют антиканцерогенные, антимикробные, антимутагенные, антиангиогенные и противовоспалительные свойства [1]. Додецилгаллат [2] проявляет антиоксидантную активность, предотвращая образование супероксидных радикалов ксантиноксидазой, которая способна ингибировать фермент. Существуют работы [3 и др.] по разработке биосорбента на основе лигнина с привитой галловой кислотой для адсорбции ионов свинца.

Данная работа посвящена изучению реакции этерификации галловой кислоты с алифатическими спиртами различного строения, целью которой является увеличение селективности реакции образования алкилгаллатов. Реакцию проводили в среде толуола или диоксана при нагревании в течении 8-12 часов в присутствии различных катализаторов (H_2SO_4 , HCl , *n*-толуолсульфокислота и др.) при разных мольных соотношениях спирта и галловой кислоты ($T = 383\text{ K}$).



Конверсию кислоты в процессе синтеза определяли титриметрически по кислотному числу. Контроль реакции осуществляли методом ГЖХ «Хроматэк -Кристалл-5000» с пламенно-ионизационным детектором. Выявили, что оптимальное мольное соотношение галловой кислоты: алкилспирта = 1:5 с использованием катализатора *n*-толуолсульфокислота.

Литература

1. Kadirova S.O., Yuldasheva M.R., Abdumannopova N.B. Synthesis of methyl esters of gallic acid and its derivatives // Austrian Journal of Technical and Natural Sciences. – 2024. – № 7-8. – P.18-21.
2. Kubo I., Masuoka N., Xiao P., Haraguchi H. Antioxidant activity of dodecyl gallate // Journal of Agricultural and Food Chemistry. – 2002. – V. 50. – Issue12.
3. Zhang X., Jin C., Jiang Y., Liu G. et al. A novel gallic acid-grafted-lignin biosorbent for the selective removal of lead ions from aqueous solutions // BioResources. – 2017. – V.12. № 3. – P. 5343-5357.

© Андреева Е.А., Сизенко М.А., Карасева И.Н., Попова Ю.В., 2025

ИССЛЕДОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ДРЕВЕСИНЫ БЕРЁЗЫ ПОСЛЕ КУЛЬТИВИРОВАНИЯ *LENTINULA EDODES*

Анисимов И.А., Таганбекова З.К.

Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия

Модификация древесины химическим методом является перспективным направлением в создании функциональных материалов. Однако, в последнее время наблюдается растущий интерес к использованию природных процессов для улучшения свойств древесины. В работе изучено влияние предварительной обработки берёзовых опилок мицелием гриба *Lentinula edodes* на упорядоченность их надмолекулярной структуры в течение 1 и 3 месяцев.

Обработка субстрата на основе древесины берёзы грибами *Lentinula edodes* была проведена в течение 1 и 3 месяцев. Изучен химический состав исходного субстрата и после выращивания на нём грибов. Результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1

Результаты анализа древесины берёзы и древесины берёзы, обработанной грибами *Lentinula edodes*

Образец	Зольность, %	Влажность, %	Содержание целлюлозы, %	Содержание лигнина, %
Субстрат на основе древесины берёзы	1,6	5,5	43,5	28,9
Древесина берёзы, обработанная грибами <i>Lentinula edodes</i> в течение 1 месяца	2,6	6,6	39,2	34,8
Древесина берёзы, обработанная грибами <i>Lentinula edodes</i> в течение 3 месяцев	2,1	6,4	34,2	29,4

Как видно из таблицы 1, содержание лигнина в древесине после обработки грибами кажется увеличенным, но на самом деле его абсолютное количество уменьшается. Грибы разрушают в большей степени углеводную часть (целлюлоза и гемицеллюлозы), что приводит к относительному увеличению доли лигнина в навеске сырья.

Идентификация выделенной целлюлозы из древесины березы, обработанной грибами *Lentinula edodes*, проводилась методом ИК-спектроскопии, ИК-спектры приведены на рисунках 1-2.

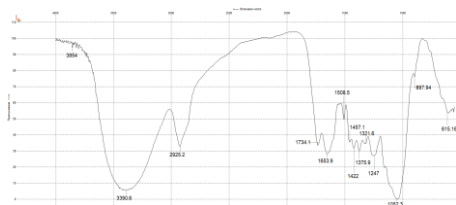


Рис. 1. ИК-спектр древесины березы, обработанной грибами *Lentinula edodes* в течении 1 месяца

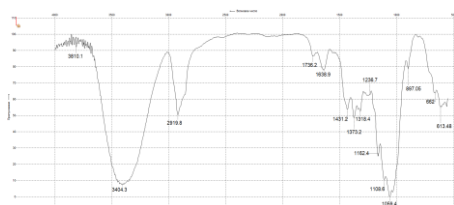


Рис. 2. ИК-спектр продукта делигнифицированной березы, обработанной грибами *Lentinula edodes* в течении 1 месяца

На ИК-спектрах березы, обработанной грибами *Lentinula edodes*, основной максимум полосы поглощения ОН-групп находится в области $3000\text{--}3700\text{ см}^{-1}$. Сигналы в области $1736\text{--}1724\text{ см}^{-1}$ указывают на присутствие лигнина. Уменьшение интенсивности этих сигналов в образцах, обработанных в течение 1 и 3 месяцев (рисунок 2), подтверждает процесс делигнификации и снижение содержания лигнина.

Валентные колебания С-О- и С-С-групп гликозидного кольца проявляются в области $1200\text{--}950\text{ см}^{-1}$. Снижение интенсивности сигнала $1226\text{--}1247\text{ см}^{-1}$ указывает на уменьшение содержания гемицеллюлоз и частичный гидролиз целлюлозы. Индекс упорядоченности целлюлозы, рассчитанный по методу Нельсона и О'Коннора (D_{1372}/D_{2900}), составил 0,37 для обработки в течение 1 месяца и 0,52 для 3 месяцев, что может указывать

на более упорядоченную структуру целлюлозы при длительной обработке. Однако значения занижены из-за остаточного лигнина.

Литература

1. Nelson M.L., O'Connor R.T. Relation of certain infrared bands to cellulose crystallinity and crystal lattice type. Part II. A new infrared ratio for estimation of crystallinity in cellulose I and II // Journal of Applied Polymer Science. 1964. Vol. 8, № 3. Pp. 1325-1341. DOI: 10.1002/app.1964.070080323.

2. Карпова Е.В. Изучение состава и структуры модифицированной древесины осины методом ИК-спектроскопии. дис. канд. хим. наук/ Карпова Е.В. – Красноярск, 2002. – 107 с.

© Анисимов И.А., Таганбекова З.К., 2025

УДК 620.197:547.466

ИССЛЕДОВАНИЕ ИНГИБИРУЮЩИХ СВОЙСТВ ОСНОВАНИЙ ШИФФА ОНО-ТИПА

Асанова Д.Ж., Сериккалиева А.А., Акатьев Н.В.

*Западно-Казахстанский университет им.М.Утемисова,
Уральск, Казахстан*

Основания Шиффа (имины, азометины) интенсивно исследуются в качестве ингибиторов коррозии различных металлов и сплавов. Благодаря наличию в структуре гетероатомов, неспаренных электронов, кратных связей, а также циклических π -систем, они очень часто проявляют хорошие ингибирующие свойства и характеризуются простотой синтеза, возможностью варьирования структуры и экологической безопасностью [1].

В данной работе исследованы ингибирующие свойства двух оснований Шиффа синтезированных конденсацией *o*-аминофенола и *o*-оксиацетофенона (SB1), а также *o*-аминофенола и 3,5-ди-*трет*-бутилсалицилового альдегида (SB2) (Рис. 1):

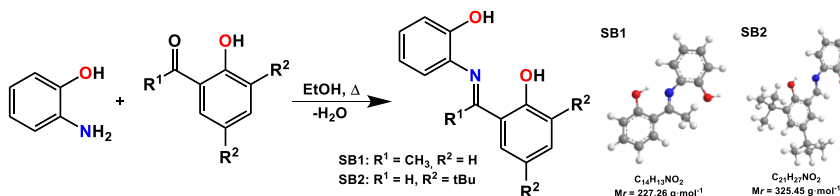


Рис. 1. Синтез оснований Шиффа ОНО-типа.

Результаты исследования ингибирующих свойств полученных соединений в 0,5 моль·дм⁻³ H₂SO₄ относительно углеродистой стали СТЗСП2-П12 (ГОСТ 535-2005, масс% С - 0,22; Мп - 0,65; Si - 0,3; P - 0,04; S - 0,05; Cr - 0,3; Ni

- 0,3; Cu - 0,3; N – 0,01; As – 0,08; остальное - Fe.) при 298 и 313К при 24-часовой экспозиции представлены в таблице 1.

Таблица 1

Параметры коррозионного процесса для углеродистой стали СТЗСП2-ГП2 в 0,5 моль·дм⁻³ H₂SO₄ в присутствии оснований Шиффа ОНО-типа.

Основание Шиффа	298К			313К		
	η, %	K _{адс}	ΔG _{адс} , кДж·моль ⁻¹	η, %	K _{адс}	ΔG _{адс} , кДж·моль ⁻¹
SB1	75,03	24,88	-17,9	86,55	24,69	-19,7
SB2	54,46	22,73	-17,7	56,05	35,71	-18,8

Результаты показали, что SB1 обладает наилучшим защитным эффектом, особенно при повышенной температуре (86.55%). Отрицательные значения свободной энергии Гиббса (ΔG_{адс} > -20 кДж/моль) свидетельствуют о самопроизвольном протекании адсорбционного процесса за счёт электростатических взаимодействий между молекулами ингибитора и поверхностью металла (физисорбция) [2]. Соответствие адсорбции ингибиторов модели Ленгмюра указывает на образование монослоя и отсутствии взаимодействия между адсорбированными молекулами на поверхности металла [3]. Более слабые ингибирующие свойства SB2 обусловлены стерическим влиянием двух объёмных *трет*-бутильных заместителей, препятствующих эффективной адсорбции ингибитора на поверхности стальной пластинки.

Литература

- 1.Shetty P. Schiff bases: an overview of their corrosion inhibition activity in acid media against mild steel //Chemical Engineering Communications. – 2020. – Т. 207. – № 7. – С. 985-1029.
- 2.Kenzhegalieva, R., Khapiyeva, M., Uzakbay, G., Talapova, A., Vardanyan, R., & Akatyev, N. (2025). A new potential of sodium anthraquinone-2-sulfonate as a corrosion inhibitor for carbon steel in 0.5 M H₂SO₄: Original scientific paper. *Journal of Electrochemical Science and Engineering*, 15(2), 2512.
- 3.Seilova, T., Kunasheva, Z., Kubasheva, R., & Akatyev, N. (2024). Development of new three-component BNP-inhibitor for carbon steel in 0.5 mol dm⁻³ HCl solution, Thermodynamic, adsorption and electrochemical studies. *The International Journal of Corrosion and Scale Inhibition*, 13, 1268-1291.

© Асанова Д.Ж., Сериккалиева А.А., Акатъев Н.В., 2025

УДК 661.71

МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ЭПОКСИДИРОВАНИЯ ПРОПИЛЕНА ГИДРОПЕРОКСИДОМ ИЗОПРОПИЛБЕНЗОЛА

Багавеев И.М., Улитин Н.В., Бочков М.А., Харлампики Х.Э.,
Терещенко К.А.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия*

Окись пропилена используется в производстве широкого спектра продукции, среди которой наиболее важными являются пенополиуретан для автомобильной и строительной отраслей, полиэфирные смолы для текстильной и строительной отраслей, а также пропиленгликоль, который используется в фармацевтической и косметической промышленности и в качестве добавки в теплоносители и гидравлические жидкости [1]. Спрос на окись пропилена (ГОСТ 23001-88 Пропилен окись техническая) постоянно растет (до 6-8 % ежегодно) [1].

Построенные в 21 веке предприятия, производящие окись пропилена гидропероксидным методом, используют в качестве эпоксидирующего агента гидропероксид изопропилбензола [1]. В открытых источниках приведены данные исследований процесса эпоксидирования пропилена гидропероксидом изопропилбензола в присутствии молибденовых катализаторов на модельных олефинах и с применением очищенного гидропероксида изопропилбензола и осушенных растворителей [2].

Для совершенствования промышленной технологии эпоксидирования пропилена гидропероксидом изопропилбензола (в составе реакционной смеси окисления изопропилбензола) необходимо обоснование закономерностей этого процесса с помощью кинетического моделирования. Для достижения данной цели решались следующие задачи: 1) получение экспериментальных кинетических данных; 2) составление кинетической схемы процесса; 3) создание кинетической модели процесса на основе кинетической схемы.

Для решения 1 задачи синтезировали молибденсодержащий катализатор путем растворения порошка металлического молибдена в смеси изопропилового спирта и 27%-ного раствора гидропероксида изопропилбензола в изопропилбензоле. Эпоксидирование пропилена гидропероксидом изопропилбензола (в составе реакционной смеси окисления изопропилбензола) проводили в стальном реакторе при давлении 20 атм и температурах 50-90°C. Состав реакционной смеси анализировали хроматографически.

На основании анализа состава реакционной смеси процесса эпоксидирования пропилена гидропероксидом изопропилбензола при температурах 50-90°C и литературных данных [3] составили кинетическую

схему процесса. На основании данной схемы и закона действующих масс записали кинетическую модель. В результате решения обратной кинетической задачи методом прямого поиска нулевого порядка определили параметры температурных аррениусовских зависимостей констант скоростей реакций (предэкспоненциальные множители и энергии активации). Кинетическая модель удовлетворительно воспроизводит экспериментальные временные зависимости накопления окиси пропилена и побочных продуктов. С целью верификации модели провели вычислительный эксперимент на модели при температуре процесса 115°C. Сопоставление результатов вычислительного и реального экспериментов приведено на рисунке 1.

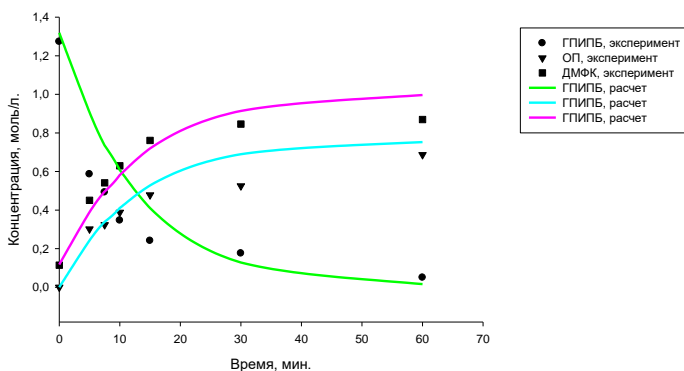


Рис. 1. Кинетика накопления окиси пропилена (ОП) и диметил – фенилкарбинола (ДМФК), расходования гидропероксида изопропилбензола (ГПИПБ); точки – эксперимент, линии – расчет по модели

Литература

1. Samanta, C. C3-based petrochemicals: recent advances in processes and catalysts / C. Samanta, R.K. Das // *Catalysis for Clean Energy and Environmental Sustainability: Petrochemicals and Refining Processes* – 2021. – V. 2. – P. 149-204.
2. Дахнави, Э.М. Кинетический анализ процесса эпексидирования октена-1 гидропероксидом кумола / Э.М. Дахнави, О.В. Соловьева, И.Г. Разяпов, Х.Э. Харлампи // *Вестник Казанского технологического университета*. – 2010. – №1. – С. 250-257.
3. Das, S. La/Zn bimetallic oxide catalyst for epoxidation of styrene by cumene hydroperoxide: kinetics and reaction engineering aspects / S. Das, A. Gupta, D. Singh, S. Mahajani // *Industrial & Engineering Chemistry Research*. – 2019. – V. 58, №18. – P. 7448-7460.

© Багавесв И.М., Улитин Н.В., Бочков М.А., Харлампи Х.Э., Терещенко К.А., 2025

ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ГИДРОГЕЛЕЙ
НА ОСНОВЕ КРАХМАЛА И РАЗЛИЧНЫХ СШИВАЮЩИХ АГЕНТОВ

Балинт Д.А., Таганбекова З.К., Маркин В.И.

Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия

Гидрогели на основе полисахаридов становятся предметом повышенного интереса в сфере разработки биоматериалов, имеющим определенные управляемые свойства. Гидрофильные гидрогели на основе крахмала (Кр) и его производных играют важную роль благодаря способности поглощать воду, биосовместимости и биоразлагаемости [1].

Для создания трехмерной сетчатой структуры гидрогелей используются различные сшивающие агенты (СА), которые позволяют улучшать свойства полимера. В работе изучено влияние молочной кислоты (МК), малеинового ангидрида (МА) и фталевого ангидрида (ФА) на свойства гидрогелей на основе крахмала.

Для синтеза гидрогелей крахмал желатинизировали, а затем при постоянном перемешивании добавляли сшивающие агенты: молочную кислоту (МК), малеиновый ангидрид (МА) и фталевый ангидрид (ФА). Синтез проводился при температуре 50 °С в течение 2 или 4 часов. Продукт дегидратировали безводным этанолом. Обезвоженный образец сушили на открытом воздухе [2]. В полученных образцах изучена водопоглощающая способность путем взвешивания полученных образцов до и после набухания в дистиллированной воде через 24 ч при 25 °С. Результаты представлены в таблице 1.

На основании полученных данных, увеличение времени синтеза почти не улучшает водопоглощающую способность, в то время как уменьшение времени синтеза до 2 часов повышает сорбционные свойства некоторых образцов. Уменьшение концентрации крахмала при сшивании молочной кислотой (МК) и малеиновым ангидридом (МА) увеличивает водопоглощение (КрМК2(3-0,6) – 172%, КрМА2(3-0,3) – 188%). При сшивании фталевым ангидридом (ФА) более высокая концентрация крахмала улучшает сорбционные свойства (КрФА2(5-0,25) – 165%).

Повышение концентрации сшивающего агента снижает водопоглощение при сшивании МА и ФА, но незначительно увеличивает его при сшивании МК. Оптимальные соотношения реагентов для производства с точки зрения экономии времени и ресурсов: крахмал: МК – 3 : 1 (172%), крахмал: МА – 6 : 1 (188%), крахмал: ФА – 18 : 1 (165%). Малеиновый ангидрид оказался наиболее эффективным сшивающим агентом, за ним следует молочная кислота, а фталевый ангидрид – наименее эффективный.

Таблица 1

Водопоглощающая способность отверждённых образцов на основе крахмала при различных концентрациях полисахарида и сшивающих агентов, а также при разном времени синтеза в 100 мл воды при 50 °С

Название образца	Название сшивающего агента	Соотношение крахмал : СА, моль	Время синтеза, ч	Водопоглощение (24 ч), %
КрМК2(5-0,25)	Молочная кислота	11 : 1	2	175
КрМК4(5-0,25)		11 : 1	4	160
КрМК2(3-0,3)		6 : 1	2	160
КрМК4(3-0,3)		6 : 1	4	151
КрМК2(3-0,6)		3 : 1	2	172
КрМА2(5-0,25)	Малеиновый ангидрид	12 : 1	2	124
КрМА4(5-0,25)		12 : 1	4	132
КрМА2(3-0,3)		6 : 1	2	188
КрМА4(3-0,3)		6 : 1	4	146
КрМА2(3-0,6)		3 : 1	2	168
КрФА2(5-0,25)	Фталевый ангидрид	18 : 1	2	165
КрФА4(5-0,25)		18 : 1	4	143
КрФА2(3-0,3)		10 : 1	2	137
КрФА4(3-0,3)		10 : 1	4	144
КрФА2(3-0,6)		5 : 1	2	114

Результаты могут быть использованы для разработки биоразлагаемых материалов с управляемыми свойствами.

В заключение результаты данного исследования подчеркивают важность выбора сшивающего агента и соотношения компонентов для оптимизации свойств гидрогелей на основе крахмала. Полученные данные могут быть полезны для дальнейших разработок в области биоматериалов, особенно в контексте создания экологически чистых и функциональных продуктов. Перспективы применения таких гидрогелей включают использование в сельском хозяйстве. Таким образом, гидрогели на основе

полисахаридов представляют собой многообещающую область для инновационных решений в биоматериаловедении.

Литература

1. Posocco Bianca, Dreussi Eva, Jacopo de Santa, Polysaccharides for the Delivery of Antitumor Drugs // Materials. – 2015. – Vol. 8. – P. 2569 - 2615.
2. Холназаров Б.А., Тураев Х.Х., Ахатов А.А. Синтез и характеристика биоразлагаемых гидрогелей на основе крахмала и лимонной кислоты // Universum: химия и биология. – 2020. – No 10. – С. 37- 40.

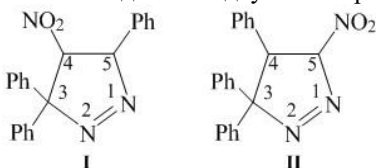
© Балинт Д.А., Таганбекова З.К., Маркин В.И., 2025

УДК 547.771

О РЕГИОСЕЛЕКТИВНОСТИ РЕАКЦИИ 1,3-ДИПОЛЯРНОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ ДИФЕНИЛЦИАЗОМЕТАНА К НИТРОСТИРОЛУ

Безрукова Е.В., Черноторова А.О., Калязин В.А.
ФГБОУ ВО «МГУ им. Н.П. Огарёва», Саранск, Россия

В литературе известны примеры синтеза 3*H*-пиразолов на основе Δ^1 - и Δ^2 - пиразолинов [1,2], полученных по реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения замещенных диазометанов к этиленовым диполярофилам. Однако для реакции дифенилдиазометана (ДФДМ) региоселективность процесса описана неоднозначно [3]. Очевидно, что процесс протекает образованием одного из двух Δ^1 - пиразолинов (**I** или **II**).



Мы решили более детально исследовать данное соединение с использованием методов корреляционной ЯМР-спектроскопии ($^1\text{H} - ^1\text{H}$ COSY, $^1\text{H} - ^{13}\text{C}$ HMQC, $^1\text{H} - ^{13}\text{C}$ HMBC).

Исходя из $^1\text{H} - ^1\text{H}$ COSY корреляции проводили анализ протонного спектра. Можно выделить три спиновые системы – два дублета протонов пиразолинового остова, обособленный фенил (сигналы *орто*-протонов в слабом поле) и два фенильных радикала с наложением (сигналы *орто*-протонов в сильнополевой части диапазона ароматики поле).

Ключевыми для определения региоселективности процесса циклоприсоединения является метод $^1\text{H} - ^{13}\text{C}$ HMBC, где наблюдаются корреляции второго и третьего порядка между атомами углерода и протонами (Рисунок 1). Для двух групп *орто*-протонов трех фенильных заместителей наблюдается наличие кросс-пиков **a** и **b** с C^3 пиразолинового остова, что позволяет сделать вывод о том, что протонные сигналы одного

из фенилов в положении 3 видны обособленно, в то время, как для сигналов второго заместителя в положении 3 и фенила в положении 5 наблюдается наложение сигналов. Дублет с химическим сдвигом 5,67 м.д. соответствует H^4 , что определяется по наличию для него группы кросс-пиков *e* с узловыми атомами каждого из трех фенильных заместителей (корреляции третьего порядка для изомера **I**, и второго и третьего - для изомера **II**). Иные варианты предполагают наличие корреляций четвертого и пятого порядков, что маловероятно. Вывод о строении региоизомера можно сделать на основе наличия корреляций третьего (*d*) и второго (*c*) порядка для H^5 и орто и узлового углерода одной из фенильных групп. Иной вариант требует взаимодействия четвертого порядка для возникновения кросс-пика *d*. В пользу соединения **I** говорит близкая интенсивность группы кросс-пиков *e*. Поскольку интенсивность коррелирует с величиной КССВ можно предположить, что данная группа сигналов возникла при взаимодействии одного порядка (третьего), что возможно только для региоизомера **I**.

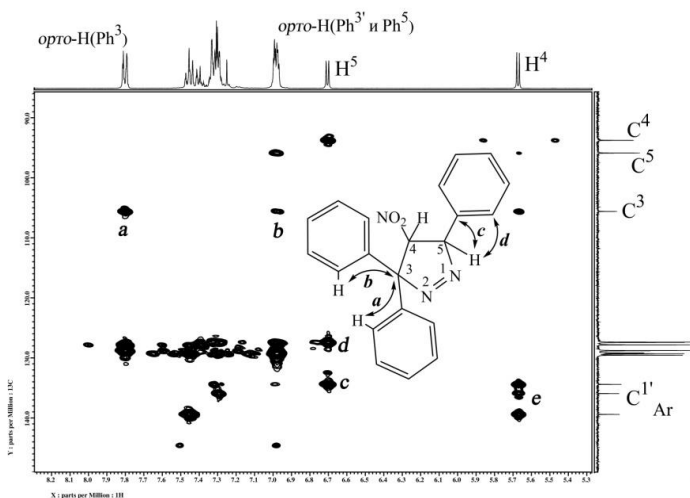


Рис. 1. Фрагмент $^1H - ^{13}C$ HMBC спектра соединения **I**

Следует отметить, что в отличие от Δ^1 -пиразолинов, полученных из сульфозамещенных алкенов с противоположной региоселективностью, данное соединение не испытывает перегруппировки в Δ^2 -пиразолин. Это тоже может быть связано с отсутствием акцепторного заместителя в положении 5 пиразолинового цикла, что также согласуется с предложенной структурой.

Литература

1. Franck-Neumann M. Synthèse de diméthyl-5,5 pyrazolénines, précurseurs de vinylcarbènes isoprénoïdes, par oxydation directe de Δ^2 -pyrazolines // Tetrahedron. 1983. V. 39. P. 1247 – 1254.
2. Franck-Neumann M. Nitrovinylcarbenes: photolysis of the 3H-pyrazole precursors, intramolecular evolution and intermolecular reactivity // Tetrahedron Lett. 2009. V. 25. P. 2909 – 2912.
3. Parcham W.E., Serres C., O'Connor Jr. Reaction of diazocompounds with nitroolefines. V. The orientation of addition of disubstituted diazocompounds to nitroolefins // J.Am. Chem. Soc. 1958. Vol. 80, № 5. P. 588.

© Безрукова Е.В., Черноярова А.О., Калязин В.А., 2025

УДК 547.572.3

ПРОИЗВОДНЫЕ СТИРОЛА КАК ДИПОЛЯРОФИЛЫ В РЕАКЦИЯХ 1,3-ДИПОЛЯРНОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ

Бережная Е.В., Степаков А.В.

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

Производные пирролизидина являются важным классом органических соединений, так как обладают широким спектром биологической активности. Среди методов получения пирролизидинов особое место занимают реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения с участием азометин-илидов.

В ранних исследованиях стабильный азометин-илид **1**, полученный на основе нингидрина и L-пролина, зарекомендовал себя как эффективная ловушка для различных циклопропенов, в том числе газообразных и нестабильных [1].

В данной работе в качестве диполярофилов были использованы производные стирола **2a-n**. Спироциклические аддукты **3a-n**, полученные в ходе синтеза, дали высокие выходы (до 95 %) и высокую регио- и стереоселективность (см. рисунок):

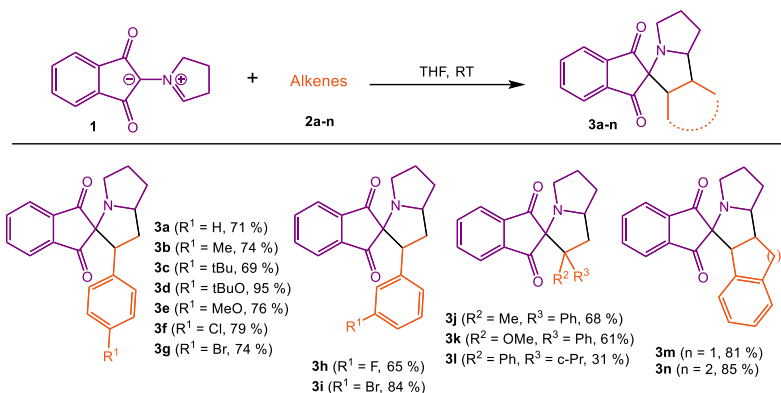


Рис. 1. Синтез циклоаддуктов **3a-n**

Литература

1. Filatov A.S., Boitsov V.M., Stepakov A.V. et al. // J. Org. Chem. 2019. Vol. 84. P. 7017-7036. DOI: 10.1021/acs.joc.9b00753.

© Бережная Е.В., Степаков А.В., 2025

УДК 547.841

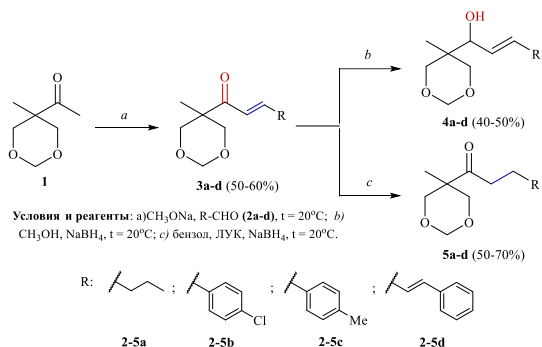
СИНТЕЗ И СЕЛЕКТИВНОЕ ВОССТАНОВЛЕНИЕ α , β -НЕПРЕДЕЛЬНЫХ КЕТОНОВ, СОДЕРЖАЩИХ ЦИКЛОАЦЕТАЛЬНЫЙ ФРАГМЕНТ

Бережная Я.С., Султанова Р.М.

Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Уфа, Россия

В настоящей работе, изучено селективное восстановление α , β -непредельных кетонов, содержащих 1,3-диоксанный фрагмент. Конденсация 5-ацил-5-метил-1,3-диоксана с альдегидами **2a-d** в присутствии метилата натрия при комнатной температуре приводит к образованию соответствующих α , β -ненасыщенных кетонов **3a-d** с выходами 50-60%. Последующее восстановление полученных кетонов $NaBH_4$ в метаноле протекает с восстановлением карбонильной группы, непредельные спирты **4a-d** выделены с выходами 40-50%, а использование системы $NaBH_4-CH_3COOH$ в бензоле позволило получить соответствующие насыщенные кетоны **5a-d** с выходами 50-70%.

При проведении предварительной оценки биологической активности (in vitro) полученных гибридных соединений обнаружена ветрогонная, противоэксмаотозная, агонист целостности мембран, субстрат CYP2J и др.



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. Султанова Р.М., Борисова Ю.Г., Хуснутдинова Н.С., Раскильдина Г.З., Злотский С.С. // 1,3-Диоксацикланы: синтез на основе продуктов нефтехимии, химические превращения и применение. Изв. АН Сер. хим. 2023. Т.72. № 10. С. 2297-2318. DOI: 10.1007/s11172-023-4027
2. <http://www.pharmaexpert.ru/passonline/>

© Березняк Я.С., Султанова Р.М., 2025

УДК: 547.787.1:547.792:547.772.1: 547.796.1:547.56:547.563.13: 547.581.2

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ

АРИЛ- И ГЕТАРИЛГИДРАЗОНОВ ОКСАЗОЛ-5(4H)-ОНА

Биккулова Э.Р.¹, Скляр А.Е.¹, Евстигнеева С.С.^{1, 2}, Гринёв В.С.^{1, 2}

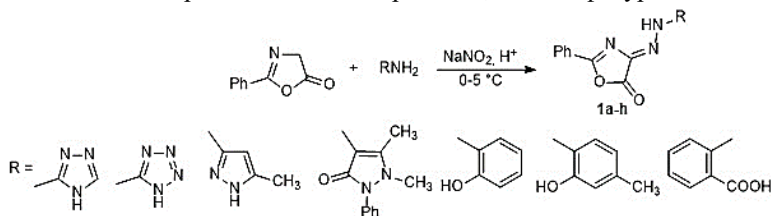
¹ ФГБОУ ВО «Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского»,

Саратов, Россия

² Институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов, Федеральный исследовательский центр «Саратовский научный центр РАН», Саратов, Россия

Синтез соединений с люминесцентными свойствами в настоящее время является одной из наиболее актуальных задач современной химии благодаря применению их в качестве биосовместимых меток. (Гет)арилгидразоны оксазол-5(4H)-она с ярко выраженной флуоресценцией – перспективные кандидаты в биологически активные или биоортогональные красители.

Ранее нами синтезирован ряд карбоциклических арилгидразонов оксазол-5(4*H*)-она и исследованы их электронные спектры поглощения и антибактериальная активность¹. В продолжение этих работ синтезированы первые представители гетарилгидразонов оксазол-5(4*H*)-она (1а-н). Спектральный и РСА показали, что соединения 1а-н находятся, аналогично карбоциклическим ароматическим гидразонам, в *Z*-конфигурации



В спектрах флуоресценции полученных соединений наблюдаются достаточно большие Стоксовы сдвиги (Рис 1)

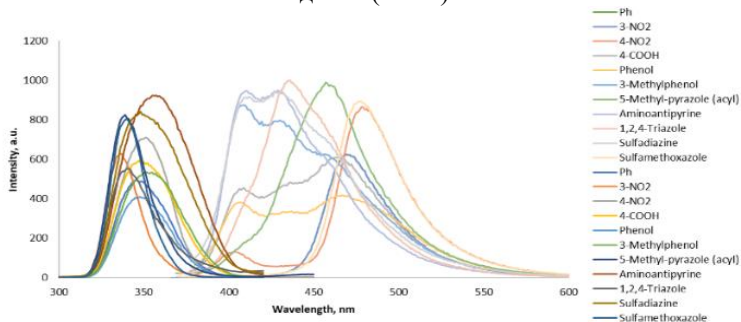


Рис. 2. Спектры возбуждения и испускания представителей арил и гетарилгидразонов оксазол-5(4*H*)-она

Высокая интенсивность полос поглощения для гетарилзамещенных красителей несколько превосходит таковые для карбоциклических аналогов.

Таким образом, нами расширен ряд арил(гетарил)гидразонов и исследованы их спектры флуоресценции. Полученные красители за счёт ярко выраженной эмиссии имеют возможность модификации посредством реакций комплексообразования с металлами и комплексообразователями по типу BF_3 позволит тонко «подстраивать» максимум испускания и ширину Стоксова сдвига, получая тем самым красители одного химического типа с разным цветом свечения для сложных и комбинированных задач биоимиджинга.

Литература

1. Гринёв В.С. и др. Известия академии наук. Серия химическая. – 2023. – т. 72. – №. 7. – с. 1654-1660.

© Биккулова Э.Р., Скляр А.Е., Евстигнеева С.С., Гринёв В.С., 2025

ТЕРМИЧЕСКАЯ «АВТОМЕРИЗАЦИЯ» ПИРРОЛА,
ФУРАНА И ТИОФЕНА

Богатова С.И., Саттаров Р.И., Томилин О.Б., Фомина Л.В.
 Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева,
 Саранск, Россия

Термические молекулярные перегруппировки занимают важное место в органической химии. Особым видом молекулярных перегруппировок являются вырожденные внутримолекулярные перегруппировки, называемые также «автомеризацией». Вырожденные перегруппировки характеризуются «перестановкой» атомов без изменения структуры молекулы. «Автомеризация» может осуществляться даже в таких устойчивых системах как бензол и его производные [1-2]. Известно, что реализация π -электронного сопряжения в ароматических системах увеличивает термодинамическую стабильность и снижает реакционную способность молекул. Однако, в условиях термоллиза или фотолиза высокие значения энергий активации реакций, приводящих к структурной перестройке ароматических циклов, могут быть превышены, а указанные реакции – осуществимы.

В настоящей работе методами квантовой химии изучалась возможность и механизм реакций «автомеризации» пиррола, фурана и тиюфена. С этой целью были проведены исследования поверхности потенциальной энергии (ППЭ) гетероциклических систем общей формулы C_4H_4X , $X = NH, O, S$. Расчеты основных и переходных состояний рассмотренных систем проводились методом DFT / B3LYP / 6-31G (d). Для всех переходных состояний методом IRC (intrinsic reaction coordinate) были рассчитаны пути реакции на ППЭ.

Применение процедуры IRC позволило установить механизмы «автомеризации» пиррола (рис.1 а), фурана (рис.1 б) и тиюфена (рис.1 а), согласующиеся с экспериментальными данными [3].

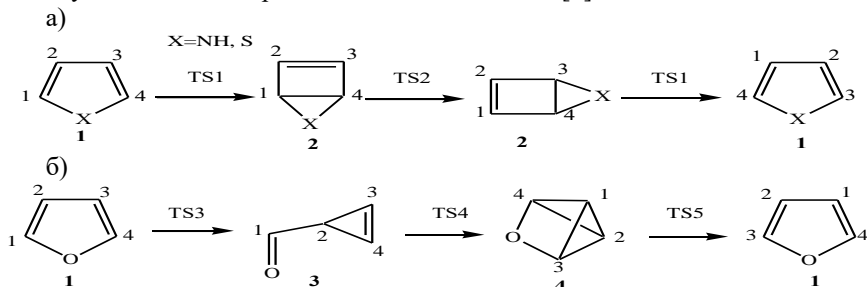


Рис.1. Схемы термической «автомеризации» пиррола (а), фурана (б) и тиюфена (а)

Возможность практической реализации представленных на рис.1 реакций можно оценить на основании анализа величин потенциальных барьеров ΔE . Потенциальные барьеры одностадийных процессов скелетной перестройки изомеров **1** – **4** через переходные состояния TS1 – TS5 (рис.1) определяются разностью полных энергий переходных состояний TS_m (m = 1–5) и полных энергий реагентов **1-4**. Рассчитанные величины ΔE приведены в таблице 1.

Таблица 1.

Величины потенциальных барьеров ΔE процессов термической «автомеризации» пиррола, фурана и тиюфена

Вещество	Пиррол			Фуран			Тиюфен		
Стадия	1 → 2	2 → 2	2 → 1	1 → 3	3 → 4	4 → 1	1 → 2	2 → 2	2 → 1
ΔE , кДж/моль	480,93	96,58	158,68	466,00	310,48	187,01	452,00	69,97	220,72

Как показано на рис. 1а, процессы термической «автомеризации» молекул пиррола и тиюфена **1**, осуществляются в три стадии с образованием изомерных бициклических соединений **2**, структура которых аналогична структуре бензола Дьюара. Термическая «автомеризация» фурана **1** протекает с образованием циклопропенкарбальдегида **3** и фувалена **4** – трициклического соединения, соответствующего структурному типу бензвалена. (рис. 1б).

Как следует из данных таблицы 1, процессы скелетной перестройки молекул пиррола, фурана и тиюфена характеризуются высокими потенциальными барьерами (452,00 – 480,93 кДж/моль) и требуют для своего осуществления жесткого температурного режима.

Литература

1. Родионова Е.В., Томилин О.Б., Фомина Л.В. Моделирование возможных пространственных структур переходных состояний ароматических углеводородов. ЖОрХ. – 2022. – № 58. – с. 392 - 405.
2. Scott L.T. Thermal rearrangements of aromatic compounds. Acc. Chem. Res.– 1982.– 15(2). – с. 52 – 58.
3. Rendall W.A., Torres M., Lown E.M., Strausz O.P. Photoisomerization of furan, pyrrole and thiophene: The intermediate formation of their Dewar and ring contracted forms. Rev. Chem. Intermed. – 1986.– Vol. 6. – P. 335- 364.

© Богатова С.И., Саттаров Р.И., Томилин О.Б., Фомина Л.В., 2025

ПОСЛЕСВЕЧЕНИЕ β -ДИКЕТОНАТОВ ДИФТОРИДА БОРА
В НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНОЙ МАТРИЦЕ БЕНЗОФЕНОНАБодык Р.Е.¹, Федоренко Е.В.²¹Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия²Институт химии Дальневосточного отделения Российской академии наук,
Владивосток, Россия

Органические красители класса β -дикетонатов дифторида бора вызывают активный интерес научного сообщества благодаря своим уникальным фотофизическим свойствам. В сочетании с жесткими низкомолекулярными матрицами, такими как бензофенон, данные люминофоры способны формировать системы, демонстрирующие послесвечение при комнатной температуре. Такие системы находят широкое применение в кислородном зондировании, высококонтрастной биовизуализации, шифровании данных, защите от подделок и создании оптоэлектронных устройств [1-3].

Композиции послесвечения получены путем растворения люминофора в расплаве низкомолекулярной матрицы с последующей кристаллизацией образцов при комнатной температуре. В качестве люминофоров использовали красители класса β -дикетонатов дифторида бора (рис. 1), материалом низкомолекулярной матрицы выступал бензофенон ($T_{пл} = 48,5^\circ\text{C}$). Содержание люминофора в композициях составило 0,5 % от массы матрицы. Были зарегистрированы стационарные спектры возбуждения люминесценции, люминесценции и фосфоресценции с помощью спектрофлуориметра СМ2203 (ЗАО «СОЛАР», Беларусь).

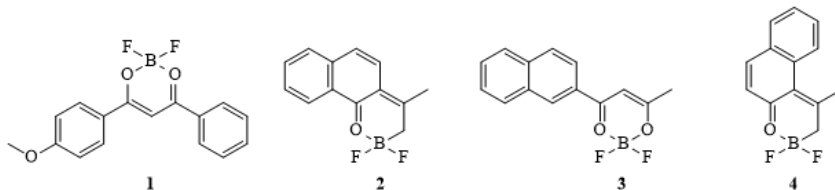


Рис. 1. Структурные формулы β -дикетонатов дифторида бора

Полученные композиции демонстрировали интенсивное послесвечение длительностью до 2,2 с (краситель **3**). Относительно стационарных спектров люминесценции спектры послесвечения сдвинуты батохромно (рис. 2а), что может указывать на фосфоресценцию при комнатной температуре.

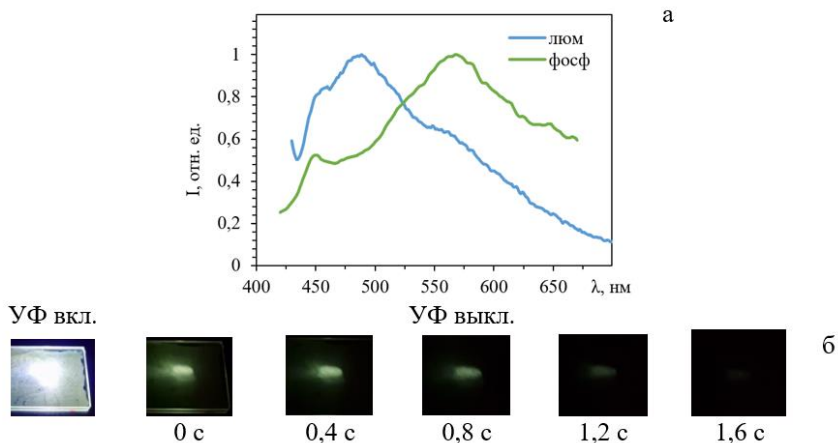


Рис. 2. Спектры люминесценции и фосфоресценции ($\lambda_{\text{возб}} = 365 \text{ нм}$) образца бензофенона, допированного **2** и фотографии данного образца (б) под облучением ультрафиолетового лазера ($\lambda = 405 \text{ нм}$) и после удаления облучения

Влияние на фосфоресценцию исследуемых образцов в матрице бензофенона оказывал концентрационный эффект, связанный с образованием агрегатов красителя. Возникновение π - π стекнинг взаимодействия между молекулами красителя в агрегатах способствует интеркомбинационной конверсии, уменьшает вероятность нерадиационного распада и увеличивает время фосфоресценции. Кроме того, полярность матрицы также способствовала возникновению послесвечения за счет диполь-дипольного взаимодействия между молекулами бензофенона и красителя. Данный механизм способствует снижению уровня $S_1 \rightarrow S_1'$ при незначительном влиянии на уровень T_1 , в результате чего уменьшается разница энергий между S_1' и T_1 (ΔE_{ST}) и скорость интеркомбинационной конверсии растет.

Литература

1. Zhao W. Room-temperature phosphorescence from organic aggregates. – Nature Reviews Materials, 2020. – Vol. 5. – № 12. – P. 869-885.
2. Ultralong Phosphorescence of Water-Soluble Organic Nanoparticles for In Vivo Afterglow Imaging / X. Zhen, Y. Tao, Z. An [et al.]. – Advanced Materials, 2017. – Vol. 29. – № 33.
3. Boron-based thermally activated delayed fluorescence host materials as universal hosts for blue phosphorescent organic light-emitting diodes / J. Park, S. Han, U. Jo [et al.]. – Materials Today, 2024. – Vol. 75. – № June. – P. 27-36.

© Бодык Р.Е., Федоренко Е.В., 2025

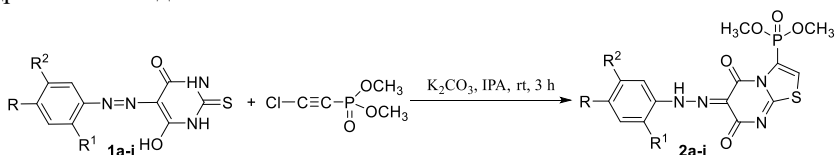
ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ ФОСФОНИЛИРОВАННЫХ
АЗОТИБАРБИТУРОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ

Булгакова Е.В., Егоров Д.М.

*Санкт-Петербургский Государственный Технологический Институт
(Технический Университет), Санкт Петербург, Россия*

Известно, что гетероциклические азокрасители с тиобарбитуровым фрагментом обладают высоким потенциалом для фармацевтической химии ввиду их противораковой, антибактериальной и противовоспалительной активности. Модификация азосоединений тиобарбитуровой кислоты может расширить их биологическую активность.

В настоящей работе нами был синтезирован ряд фосфонилированных азокрасителей на основе тиобарбитуровой кислоты. Реакция проводилась в изопропиловом спирте с помощью диметилхлорэтилнлфосфоната. Контроль за протеканием реакции осуществлялся с помощью ЯМР спектроскопии на ядрах ^{31}P . Выход составил 50-60%.



- a) R=H, R¹=H, R²=H; b) R=Cl, R¹=H, R²=H; c) R=CH₃, R¹=H, R²=H; d) R=OCH₃, R¹=H, R²=H;
e) R=NO₂, R¹=H, R²=H; f) R=H, R¹=Cl, R²=Cl; g) R=H, R¹=CH₃, R²=H; h) R=H, R¹=NO₂, R²=H; i) R=H, R¹=H, R²=NO₂

Структура полученных соединений определялась с помощью ЯМР спектроскопии на ядрах ^1H , ^{13}C . В спектре на ядрах ^1H продукта 2e можно увидеть сигналы протонов ароматического кольца при δ 7.72 м.д. и δ 8.20 м.д., тиазольного цикла при δ 7.68 м.д. и эфирных групп при δ 3.79 м.д. Для более точного представления о структуре полученных соединений была проведена гетероядерная корреляционная ЯМР спектроскопия. Данные, полученные методом HSQC ^1H - ^{13}C для соединения 2e, позволили определить величины химических сдвигов связанных атомов водорода и углерода тиазольного фрагмента. Данные, полученные методом HMBC ^1H - ^{13}C для соединения 2e, позволили установить нахождение вещества в форме гидразо таутомера. Данное утверждение мы делаем на основании наличия совокупности взаимодействий протона в слабом поле с *ipso*-углеродом ароматического кольца и углеродом C₅ барбитурового фрагмента при отсутствии кросс-пика этого атома водорода с атомом углерода C₅ в спектральных данных, полученных методом HSQC ^1H - ^{13}C .

Работа выполнена в рамках госзадания Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (FSEN-2023-0002).

© Булгакова Е.В., Егоров Д.М., 2025.

ОСОБЕННОСТИ СТАБИЛИЗАЦИИ ПЕРЕХОДНЫХ СОСТОЯНИЙ
РЕАКЦИИ ПРИНСА В КЛАСТЕРАХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Вакулин И.В., Рахманов Д.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Нами было показано [1,2], что концепция «селективности по форме переходного состояния (TS)» на основе методов молекулярной механики может быть успешно использована для разработки теоретического метода прогнозирования влияния пористых материалов на селективность реакций. Задействование полуэмпирических методов при вычислении энергии взаимодействия TS с цеолитами или углеродными нанотрубками (CNTs) существенно расширяет возможности этого подхода [3].

Ранее мы рассматривали CNTs как единичные объекты, однако в реальности мы, скорее всего, имеем дело с кластерами CNTs. Поэтому для уточнения модели мы рассмотрели не только влияние соседних пустых CNTs, но и CNTs, содержащих внутри субстраты или интермедиаты, на энергию стабилизации TS внутри нанотрубки. При этом TS размещалось в центральной CNT (Рис. 1).

Кластеры CNTs(7,7) были построены в Accelrys Materials Studio 8.0. Свободные валентности CNTs были с обеих сторон закрыты водородом. Длина полученных CNTs составила 17.22 Å, а диаметр 9.49 Å. В качестве TS было взято TS образования 1,3-диоксана по реакции Принса из пропена и протонированного димера формальдегида [4]. Затем в этой же программе с помощью модуля Adsorption Locator была вычислена энергия стабилизации TS в зависимости от числа молекул реагента (Рис. 2).

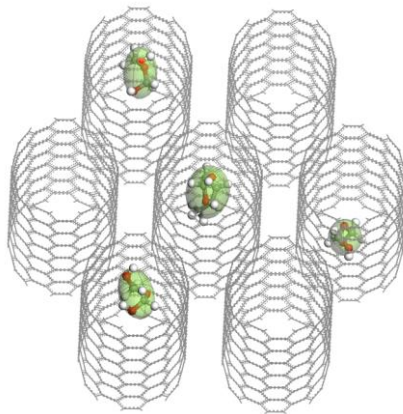


Рис. 1. TS и реагенты (на примере 3 молекул нейтрального димера), адсорбированные внутри кластера CNTs.

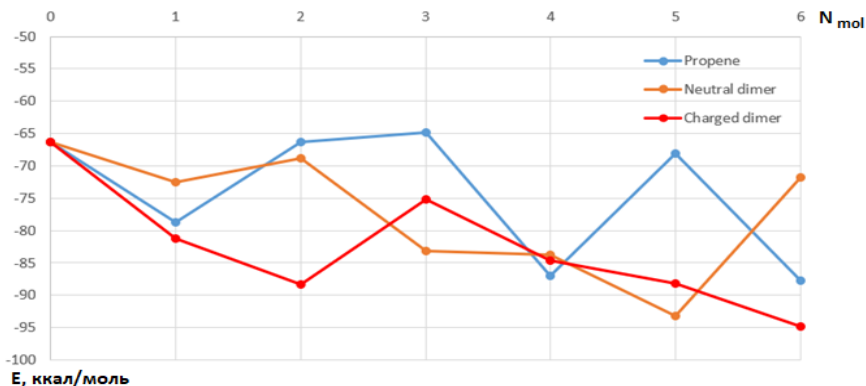


Рис. 2. Энергия стабилизации TS (MM/UFF, ккал/моль) в зависимости от числа молекул реагентов для разных реагентов.

Исходя из полученных данных, видно, что добавление молекул реагентов в соседние CNTs может существенно усилить стабилизацию TS. Видно, что все 3 реагента (пропен, протонированный и нейтральный димер формальдегида) имеют уникальные кривые зависимости энергии стабилизации TS от числа их молекул. Лишь точки с $N = 1$ и 4 имеют схожие значения для всех реагентов. Для пропена и для заряженного димера наиболее стабильным вариантом является $N=6$, а для нейтрального димера $N=5$, из чего можно сделать вывод, что использование избытка реагента может существенно ускорить реакцию.

Литература

1. Vakulin I.V., Pasko P.A., Talipov R.F., Talipova G.R., Kupova O.Yu. Influence of the pore diameter in zeolites on the activation energy of formation of 4-alkyl-1,3-dioxanes in the Prins reaction // *Kinetics and Catalysis*. – 2019. – V. 60. – №. 3. – P. 320-324.
2. Vakulin I.V., Talipov R.F., Pasko P.A., Talipova G.R., Kupova O.Yu. Features of formation transition states of 1,3-dioxanes by Prins reaction in the pores of synthetic zeolites A and carbon nanotubes // *Microporous and Mesoporous Materials*. – 2018. – V. 270. – P. 30-33.
3. Vakulin I.V., Rakhmanov D., Talipov R.F., Talipova G.R. Improvement of Theoretical Algorithm for Prediction of Carbon Nanotubes Catalytical Activity, Based on Quantum Chemical Semi-Empirical Approaches // *Catalysis Letters*. – 2023. <https://doi.org/10.1007/s10562-023-04465-1>
4. Kupova O.Yu., Vakulin I.V., Talipov R.F., Morozkin N.D., Talipova G.R. Theoretical investigation of the role of formaldehyde dimers in the Prins reaction // *Reac. Kinet. Mech. Cat.* – 2013.

© Вакулин И.В., Рахманов Д.А., 2025

УДК 547.814.5

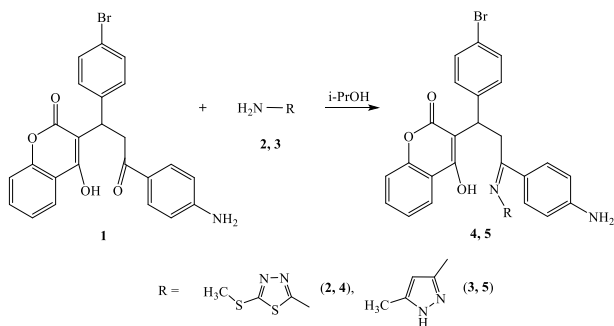
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ 4-ГИДРОКСИ-3-(3-ОКСО-1-(4-БРОМФЕНИЛ)-3-(4-АМИНОФЕНИЛ)ПРОПИЛ)-2H-ХРОМЕН-2-ОНА
С АЗАНУКЛЕОФИЛАМИ

Вахрушина В.А., Седышев С.А., Ибрагимова Д.Н.

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

В современном мире большую популярность имеет химия кислородсодержащих гетероциклических соединений в связи с их широким спектром биологической активности, представителем которых является 4-гидроксикумарин.

Нами были осуществлены реакции 4-гидрокси-3-(3-оксо-1-(4-бромфенил)-3-(4-аминофенил)пропил)-2H-хромен-2-она (**1**) с 2-амино-5-(метилтио)-1,3,4-тиадиазолом (**2**) и 3-амино-5-метилпиразолом (**3**) при кипячении в изопропиловом спирте, в результате которых получены 3-(3-(4-аминофенил)-1-(4-бромфенил)-3-((5-(метилтио)-1,3,4-тиадиазол-2-ил)имино)пропил)-4-гидрокси-2H-хромен-2-он (**4**) и 3-(3-(4-аминофенил)-1-(4-бромфенил)-3-((5-(метил-1H-пиразол-3-ин)имино)пропил)-4-гидрокси-2H-хромен-2-он (**5**) – продукты нуклеофильной атаки реагентов по оксогруппе нециклического фрагмента субстрата с выходом 45% и 59% соответственно.



Строение полученных соединений **4**, **5** установлено на основании данных ИК- и ЯМР ^1H и ^{13}C спектроскопии, гетероядерной корреляции HSQC, HMBC.

Прогнозирование биологической активности продуктов проводилось с помощью программы PASS Online.

Исследуемые соединения **4**, **5** потенциально могут оказывать антигипертензивное, спазмолитическое и противовирусное действие.

© Вахрушина В.А., Седышев С.А., Ибрагимова Д.Н., 2025

КОМБИНИРОВАННЫЙ СПОСОБ ОЧИСТКИ ЛАКТИДА
ДО СТЕПЕНИ ЧИСТОТЫ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В МЕДИЦИНЕ
Вишнева А.М., Ерохина Ю.С., Алиев Г.Ш., Томс Р.В., Гервальд А.Ю.
*МИРЭА – Российский Технологический Университет,
Институт тонких химических технологий им. М.В. Ломоносова,
Москва, Россия*

Лактид представляет собой циклический мономер, который используют для синтеза биосовместимых и биodeградируемых полимеров. Наиболее перспективным среди таких полимеров является полилактид. Применение биополимеров в медицине определяет повышенные требования не только к чистоте самого полимера, но и к чистоте исходного мономера. Требуемую степень чистоты лактида для медицинского применения достигают в результате многократных перекристаллизаций из органических растворителей таких, как ацетон, этанол и бутилацетат.

Однако, использование органических растворителей не отвечает основным принципам «зеленой химии», в связи с чем в работе был предложен комбинированный более экологичный способ очистки лактида, позволяющий сократить расход органических растворителей за счет введения стадии гидролитической очистки. Известно, что мезо-лактид имеет большую скорость гидролитического разложения при комнатной температуре по сравнению с D- и L-формами лактида [1].

На первом этапе работы проводили перекристаллизацию лактида-сырца из бутилацетата при массовом соотношении 1:1, выход лактида составил 66 %. На втором этапе работы лактид-сырец и воду, взятые в массовом соотношении 1:1, подвергали гидролизу в течение 60 минут при температуре 20 °С с целью удаления мезо-лактида. После чего проводили перекристаллизацию из изобутилового спирта, выход лактида составил 60 %. Полученные результаты показывают эффективность метода гидролитической очистки лактида-сырца без существенной потери целевого продукта. Анализ очищенного лактида методом ядерного магнитного резонанса показал значительное снижение интенсивности сигналов протонов, принадлежащих мезо-форме.

Обычно для достижения требуемой степени чистоты лактида необходимо несколько циклов перекристаллизации (от 4 до 5). Однако, в случае комбинированного способа очистки, включающего стадию гидролитической очистки с последующей перекристаллизацией из растворителя, можно сократить количество циклов до 3, что существенно уменьшает расход органических растворителей.

Литература

1. Cunha B.L.C., Bahu J.O., Xavier L.F., [et al.] Lactide: Production Routes, Properties, and Applications // Bioengineering – 2022. – V. 4. – №. 9. – P. 164-185.

© Вишнева А.М., Ерохина Ю.С., Алиев Г.Ш. 2025

УДК 542.97: 547-314

ОКИСЛИТЕЛЬНАЯ ЦИКЛИЗАЦИЯ (1Z,5Z)-ДИЕНОВЫХ СВЯЗЕЙ В СИНТЕЗЕ НОВЫХ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАКРОДИОЛИДОВ

Гайсин И.В., Исламов И.И.

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Полифункциональные макроциклические соединения, содержащие в структуре гетероциклические фрагменты, представляют особый интерес для исследователей, занимающихся поиском и разработкой лекарственных препаратов. Среди разнообразных *O*- гетероциклических фрагментов, в частности, тетрагидрофураны (ТГФ) являются важными структурными компонентами и занимают исключительное положение среди макролидов для фармацевтики [1].

В настоящей работе впервые приводятся данные о направленном синтезе полифункционального макролактона **6** с фармакофорным 2,5-дизамещенным тетрагидрофурановым фрагментом в структуре, полученного окислительной циклизацией изомерно-чистых (1Z,5Z)-диеновых связей макродиолида **5** (Схема 1) [1]. Непредельный макродиолид **5** получен межмолекулярной циклоконденсацией 2,2'-(1,4-фенилен)диуксусной кислоты **4** и (9Z,13Z)-докоза-9,13-диен-1,22-диола **3**, синтезированного на основе стереоселективной реакции каталитического *гомо*-цикломагнирования 2-(ундека-9,10-диен-1-илокси)тетрагидро-2H-пирана **1** (Схема 1) [2].

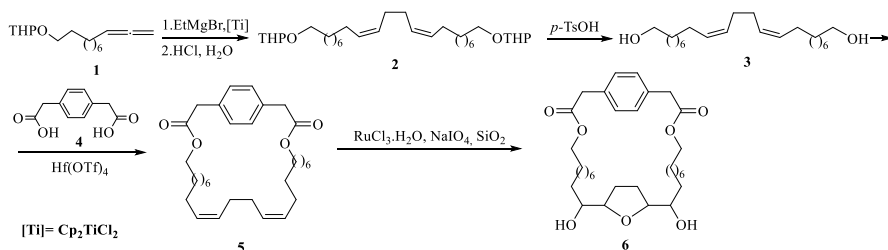


Схема 1

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

Литература

1. Макаров А.А, Ишбулатов И.В., Макарова Э.Х., Джемилев У.М., Дьяконов В.А. // *Изв. АН. Сер. хим.* 2023. 72(3). с. 689-696.
2. Dzhemileva L.U., Islamov I.I, et al. // *Bioorg. Chem.* 2020, 99. p. 103832.

© Гайсин И.В., Исламов И.И., 2025

УДК 544.122.2

СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ ХЕЛАТНЫХ БИС-*L*-ТРИПТОФАНАТОВ Cu(II)

Галимов М.Н., Берестова Т.В.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Двухвалентные катионы переходных металлов играют важную роль в функционировании ферментов, белков и других биомакромолекул [1]. Ионы Cu(II) являются эссенциальными как для организма человека, так как входят в состав многих ферментов [2-3]. *L*-триптофан играет важную роль в развитии детей младенческого возраста, поддержании азотистого баланса у взрослых [1], а также в биосинтезе серотонина и ниацина [4].

Нами был синтезирован и изучен комплекс Cu(II) с *L*-триптофаном.

С целью установления изомерного состава полученного комплекса было проведено квантовохимическое моделирование структуры комплекса. Согласно проведенным квантовохимическим расчетам (метод M06, базисный набор 6-311+G(d)) из шести возможных конфигураций/изомеров комплекса [Cu(*L*-Trp)₂] (*цис*-[Cu(SA-Trp)₂], *цис*-[Cu(SA-Trp)(SE-Trp)], *цис*-[Cu(SE-Trp)₂]; *транс*-[Cu(SA-Trp)₂], *транс*-[Cu(SA-Trp)(SE-Trp)], *транс*-[Cu(SE-Trp)₂]) наименьшую энергию имеет *цис*-изомер с формулой [Cu(SA-Trp)(SE-Trp)] (рисунок 1). По данным рентгенофазового анализа, ИК-спектроскопии и др. методам анализа установлено, что в ходе синтеза, вероятно, реализуется *цис*-изомер комплекса Cu(II) с *L*-триптофаном.

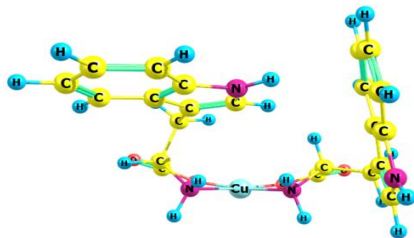


Рис. 1. Структура комплекса *цис*-[Cu(SA-Trp)(SE-Trp)]

Возможность реализации в ходе синтеза *цис*-изомера для бис-триптофанатов Cu(II) может являться некоторым исключением, так как для

подобных комплексов бис-фенилаланинатов Cu(II) более энергетически выгодными являются *транс*-изомеры [5-7].

По-видимому, тенденция образования *цис*-изомера в случае бис-триптофановых комплексов Cu(II) может заключаться в природе выбранного лиганда, а также в том, что пиррольные фрагменты индольного кольца находятся в непосредственной близости относительно друг друга и являются меньшими по размеру по сравнению с фенильными фрагментами фенилаланина для бис-фенилаланинатовых комплексов Cu(II) (рисунок 2).

Выяснение деталей большей устойчивости *цис*-изомеров комплексов Cu(II) с L-триптофаном является целью дальнейших исследований.

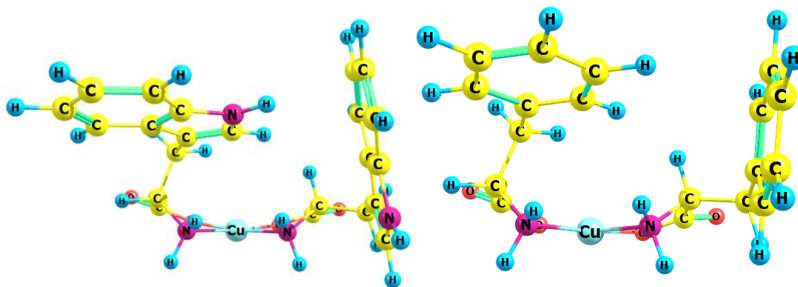


Рис. 2. Структура комплексов *цис*-[Cu(SA-Trp)(SE-Trp)] и *цис*-[Cu(SA-Phe)(SE-Phe)]

Литература

1. Remko M. et al. Effect of metal Ions (Ni 2+, Cu 2+ and Zn 2+) and water coordination on the structure of L-phenylalanine, L-tyrosine, L-tryptophan and their zwitterionic forms //Journal of Molecular Modeling. – 2011. – Т. 17. – С. 3117-3128.
2. Deschamps P. et al. The saga of copper (II)–l-histidine //Coordination chemistry reviews. – 2005. – Т. 249. – №. 9-10. – С. 895-909.
3. Тищенко К.И. Новые производные 2-тиоксо-тетрагидро-4Н-имидазол-4-онов и их медьсодержащие комплексы: – Диссертация на соискание ученой степени кандидата химических наук, Москва, 2017.
4. Altun Ö., Bilcen S. Spectroscopic characterization of Cu (II) complex of l-phenylalanine and d, l-tryptophan //Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. – 2010. – Т. 75. – №. 2. – С. 789-793.
5. Berestova, T.V., Khursan, S.L., Mustafin, A.G. Experimental and theoretical substantiation of differences of geometric isomers of copper(II) α -amino acid chelates in ATR-FTIR spectra // J. Spectrochim. Acta, Part A. – 2020. – 229. - 117950.
6. Berestova, T.V., Gizatov, R.R., Galimov, M.N., Mustafin, A.G. Influence of the absolute configuration of the ligand's chiral center on the structure of planar-square phenyl-containing bis-(N,O)copper(II) chelates // J. Mol. Struct. – 2021. – 1236. - 130303.

7. Zilberg, R.A., Berestova, T.V., Gizatov, R.R., Teres, Y.B., Galimov, M.N., Bulysheva, E.O. Chiral Selectors in Voltammetric Sensors Based on Mixed Phenylalanine/Alanine Cu(II) and Zn(II) Complexes // Inorganics. – 2022. – 10(8). – 117 p.

© Галимов М.Н., Берестова Т.В. 2025

УДК 547.78: 547.304.2

СИНТЕЗ ФУНКЦИОНАЛЬНОЗАМЕЩЕННОГО ЕНАМИНА

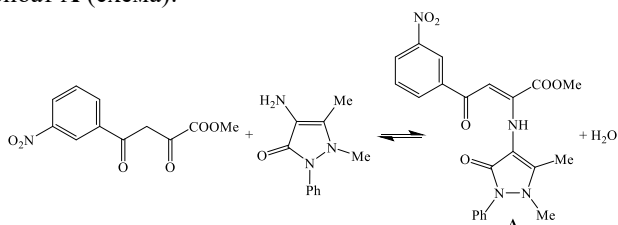
Галянин М.В., Скрипченко Е.Г., Лядов В.А.

*Пермский национальный исследовательский политехнический университет,
Пермь, Россия*

В настоящее время необходимо разрабатывать и изучать структуры органических соединений, с целью исследования их биологической активности. Существуют структурные фрагменты, которые присутствуют в формулах различных биологически активных веществ. Это привлекает интерес к данным соединениям и помогает исследовать новые вещества на их основе.

В данной работе было получено новое органическое соединение **A**, в структуре которого присутствует антипирильный заместитель. Соединения с данным фрагментом, как известно, обладают противовоспалительными и анальгетическими свойствами, например, анальгин и аминафеназон [1].

Ранее уже была предложена методика синтеза аналогичных веществ [2]. При взаимодействии метил-4-(3-нитрофенил)-2,4-диоксобутаноата с 4-аминоантипирином в среде безводного метанола и дальнейшем кипячении в течение 15 минут образуется метил-2-антипириламино-4-(3-нитрофенил)-4-оксобут-2-еноат **A** (схема):



Енамин **A** (т.пл. 168-169 °С) представляет собой высокоплавкое кристаллическое вещество оранжевого цвета, легко растворимое в метаноле, толуоле, хлороформе, ДХЭ и ДХМ, нерастворимое в алканах. В ИК-спектрах присутствуют полосы валентных колебаний в области 1659 см⁻¹ (Ar-CO-C=C); 1522 см⁻¹ и 857 см⁻¹ (Ar-NO₂); 1587 см⁻¹ (NH); 1347 см⁻¹ (Ar-N, Ant).

Литература

1. Машковский М.Д. Лекарственные средства. – М.: Новая волна, 2007. – 1206 с.
2. Лядов, В.А. Новый способ синтеза метил-4-арил-2-(1,5-диметил-3-оксо-2-фенил-2,3-дигидро-1*H*-пиразол-4-иламино)-4-оксо-2-бутеноатов / В.А. Лядов, Е.С. Денисламова // Вестник Пермского национального исследовательского политехнического университета. Химическая технология и биотехнология. – 2020. – № 4. – С. 109-120.

© Галянин М.В., Скрипченко Е.Г., Лядов В.А., 2025

УДК 547.8+542.97

СИНТЕЗ N-ЗАМЕЩЕННЫХ ТЕТРА(ГЕКСА)ОКСАЗАСПИРОАЛКАНОВ С УЧАСТИЕМ АМИНОХИНОЛИНОВ

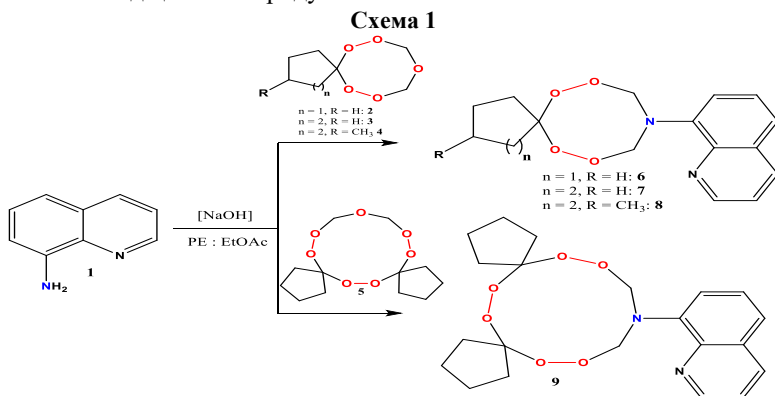
Ишмухаметова И.Р.¹, Гарипова Л.А.²,
Хайруллина А.А.², Махмудиярова Н.Н.¹

¹Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Среди множества пероксидных соединений гетероатомсодержащие циклические пероксиды занимают лидирующую позицию по распространенности в молекулах природных и лекарственных веществ [1, 2].

В рамках исследования был разработан эффективный метод синтеза *N*-хинолинзамещенных тетра(гекса)оксазаспироалканов с использованием аминохинолинов и различных катализаторов (схема 1). Было установлено, что использование катализаторов $\text{Sm}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ и NaOH значительно повышает выход целевых продуктов.



Литература

1. Coghi P., Yaremenko I.A., Prommana P., Wu J.N., Zhang R.L., Ng J.P.L., Belyakova Yu.Yu., Law B.Y.K., Radulov P.S., Uthaipibull C., Wong V.K.W. and

Terent'ev A.O. Antimalarial and Anticancer Activity Evaluation of Bridged Ozonides, Aminoperoxides, and Tetraoxanes // ChemMedChem. – 2022. – V. e202200328. – Pp. 1-9.

2. Bu M., Yang B.B., Hu L. Natural Endoperoxides as Drug Lead Compounds // Curr. Med. Chem. – 2016. – V. 23. – Pp. 383.

© Ишмухаметова И.Р., Гарипова Л.А., Хайруллина А.А.,
Махмудиярова Н.Н., 2025

УДК 547.732.6:547.778.3

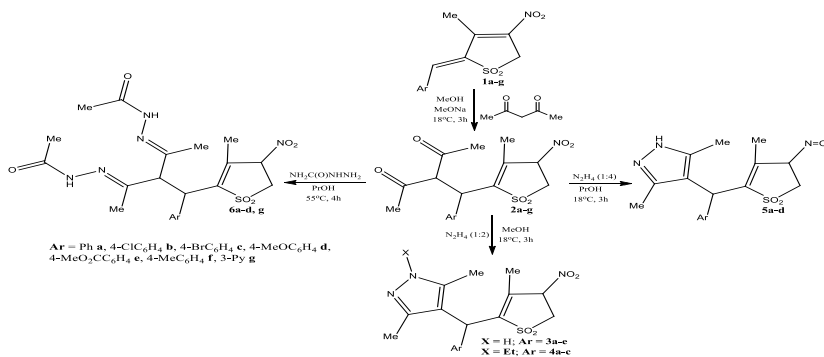
ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ДИГИДРО-ТИОФЕН-1,1-ДИОКСИДА

Герасимов Д.Р., Ефремова И.Е.

*Российский государственный педагогический университет
им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия*

Производные пиразола – это важные составляющие в структуре биологически активных веществ и лекарств [1]. Особенно интересны с точки зрения фармакологической химии неконденсированные полициклические производные сульфолана или гидротиофендиоксида [2].

Исследованная нами схема синтеза целевых структур основана на включении в молекулу нитросульфодиенов **1a-g** β-дикарбонильного фрагмента путём 1,4-присоединения ацетилаcetона в мягких условиях (MeOH, 18°C). Полученные аддукты Михаэля **2a-g** вводились в реакцию с гидразингидратом и его производными: этилгидразином и семикарбазидом. В зависимости от условий и основности бинуклеофила данные процессы завершались синтезом пиразолсодержащих производных нитросульфолонов **3a-e**, **4a-c** и нитрозосульфолонов **5a-d**, а также бис-гидразонов **6a-d**, g.



Литература

1. Иванова А.Е., Бургарт Я.В., Салоутин В.И., Оршанская Я.Р., Зарубаев В.В. β -d-Рибофуранозил замещенные полифторалкилпиразолы и их активность в отношении вируса гриппа. – *Mendeleev Commun.*, 2018. – 52 с.
2. Патент N 1433788, Int. Cl. C07D 413/14, A61K31/4155. Пиразолпроизводные как ингибиторы фактора Ха : N 02028915.3 : зарегистрирован 23.12.2002 : опубликован 30.06.2004 / URL: <https://patents.google.com/patent/EP1433788A1/en/> (последний доступ: 21.03.2025).

© Герасимов Д.Р., Ефремова И.Е., 2025

УДК 54.058

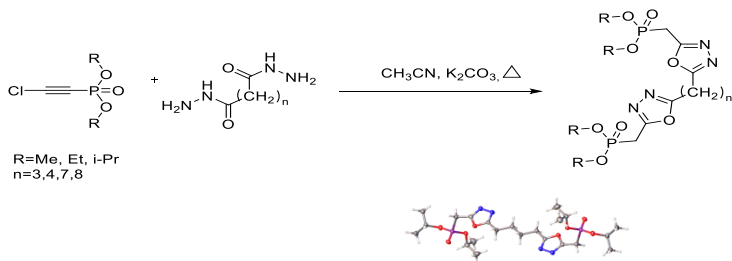
СИНТЕЗ БИС-1,3,4-ОКСАДИАЗОЛОВ НА БАЗЕ АЦЕТИЛЕНОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ

Герасимова Е.А., Рак Р.Д., Егоров Д.М.

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

Ввиду того, что 1,3,4-оксадиазолы являются эффективными фармакофорными фрагментами, входящими в состав различных лекарственных препаратов, и обусловлен высокий интерес к разработке новых подходов к синтезу последних. На базе молекул, имеющих в своем составе оксадиазольные фрагменты, могут быть получены препараты разнонаправленного медицинского воздействия: **антибактериального, противогрибкового, противоопухолевого, а также** потенциальные терапевтические агенты для лечения **нейродегенеративных заболеваний** [1].

Данная работа посвящена новому одностадийный методу синтеза бис-1,3,4-Оксадиазолов реакцией диалкилхлорэтинилфосфонатов с бис-гидразидами карбоновых кислот алифатического ряда. Реакция протекает в мягких условиях, хемо- и региоселективно и приводит к образованию фосфонилированных бис-1,3,4-оксадиазолов, выходы которых варьировались в диапазоне 85-90 %.



Строение полученных бис-1,3,4-Оксадиазолов доказано по данным

спектроскопии ЯМР на ядрах ^1H , ^{13}C , ^{31}P (химические сдвиги δ_r представлены в характерной области ~ 20 м.д.), а также методом рентгеноструктурного анализа.

Литература

1. Chawla G. 1,2,4-Oxadiazole as a Privileged Scaffold for Anti-inflammatory and Analgesic Activities: A Review. *Mini Rev. Med. Chem.*, 2018, 18, 1536-1547

© Герасимова Е.А., Рак Р.Д., Егоров Д.М., 2025

УДК 547.1

РЕАКЦИИ ЦИКЛИЧЕСКИХ АЦЕТАЛЕЙ С ЭЛЕМЕНТОРГАНИЧЕСКИМИ СОЕДИНЕНИЯМИ (ИЗ ИСТОРИИ НАУЧНЫХ ШКОЛ УГНТУ)

Гимаев Р.А.¹, Михайлова Н.Н.^{1, 2}, Шавшукова С.Ю.¹

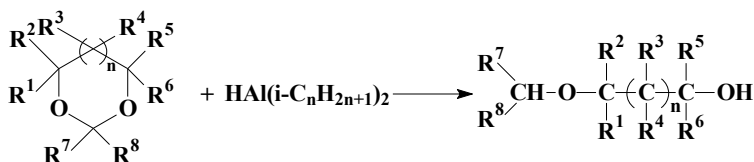
¹Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Уфа, Россия

²Академия наук Республики Башкортостан, Уфа, Россия

Академик АН РБ Д.Л. Рахманкулов являлся создателем научной школы по химии циклических ацеталей. Одним из направлений научной школы были исследования в области металлоорганической химии циклических ацеталей. В данной работе представлены основные результаты изучения превращений замещенных 1,3-диоксациклоалканов и их гетероаналогов с Al-, Si-органическими соединениями, которые проводились Д.Л. Рахманкуловым и его учениками в 1985-2005 гг.

В результате исследований Д.Л. Рахманкуловым с сотр. установлено, что диалкилалюминийгидриды с высоким выходом восстанавливают циклические ацетали и кетали до соответствующих моноэфиров гликолей [1,2].

Схема 1.



Здесь и далее: $\text{R}^1 - \text{R}^8 = \text{H}$, алкил, арил; $n = 0, 1$.

Лучшие результаты были достигнуты при использовании диизобутил- и диэтилпроизводных. Обнаружено, что в спироацеталих пентозэритрита возможно разрушение одного цикла с образованием важных в практическом отношении 5-оксиметил-1,3-диоксанов [3].

Особый интерес представляли результаты С-алкилирования циклических ацеталей триэтилалюминием. В лучших условиях выход соответствующих моноэфиров достигал 80–90 % [5].

$$\text{R}^1 \text{---} \text{C}(\text{O}) \text{---} \text{CH}_2 \text{---} \text{C}(\text{O}) \text{---} \text{R}^2 + \text{Al}(\text{C}_2\text{H}_5)_3 \longrightarrow \text{R}^1 \text{---} \text{C}(\text{OCH}_2 \text{---} (\text{CH}_2)_n \text{---} \text{CH}_2\text{OH}) \text{---} \text{C}(\text{OCH}_2\text{C}_2\text{H}_5) \text{---} \text{R}^2$$

Схема 3.

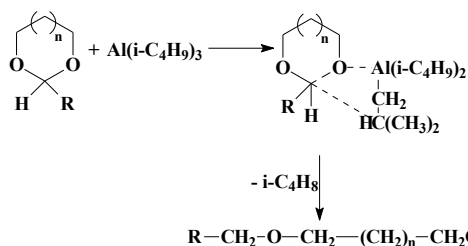
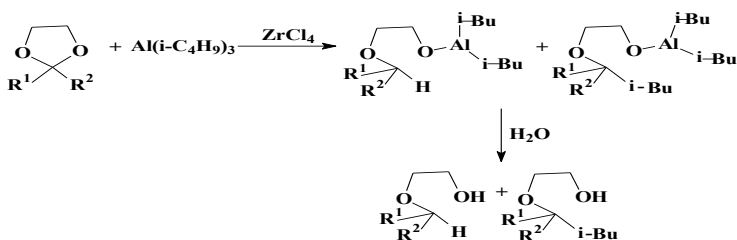
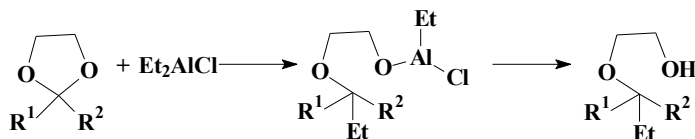


Схема 4.



В ходе исследований было установлено, что алкилалюминий хлориды энергично разрушают циклические ацетали с образованием моноэфиров [8,9].

Схема 5.



В присутствии кислот Льюиса триэтилсиланы разрушают циклические формали с образованием соединений, содержащих Et_3Si -группу [10].

Схема 6.



В результате изучения реакций циклоалканов с металлоорганическими соединениями были найдены новые способы синтеза синтезамонэфиров, гликолей и их аналогов.

Литература

1. Волков А.А., Кравец Э.Х., Злотский С.С., Рахманкулов Д.Л. Превращение 1,3-диоксациклоалканов под действием диэтилалюминийгидрида и триэтилалюминия // Журнал прикладной химии – 1985. – Т. 58, № 7. – С. 1547-1549.
2. Киладзе Т.К., Мельницкий И. А., Глухова О.Ф., Кантор Е.А. Рахманкулов Д.Л., Паушкин Я.М. Расщепление ацеталей формальдегида алюминийорганическими соединениями // Доклады Академии наук СССР – 1987. – Т. 293, № 5. – С. 1133-1137.
3. Волков А.А., Злотский С.С., Кравец Э.Х., Рахманкулов Д.Л. Действие алюминийорганических соединений на ортоформиаты // Журнал общей химии – 1986. – Т. 56, № 12. – С. 2711-2714.
4. Волков А.А., Злотский С.С., Кравец Э.Х., Рахманкулов Д.Л. Синтез моноэфиров гликолей // Доклады Академии наук СССР. – 1985. – Т. 283, № 5. – С. 1194-1196.
5. Волков А.А., Злотский С.С., Кравец Э.Х., Рахманкулов Д.Л. Относительная активность алюминийорганических соединений в реакциях с циклическими ацеталами // Известия ВУЗов. Серия химия и химическая технология – 1987. – Т. 30, № 6. – С. 110-111.
6. Гафарова Ю.Т., Вострикова О.С., Злотский С.С., Докичев В.А. Катализируемое ZrCl_4 расщепление этиленацеталей алюминийорганическими соединениями. // Известия Академии наук СССР. Отделение Химия – 1999. – № 8. – С. 1550-1556.

7. Гафарова Ю.Т., Вострикова О.С., Злотский С.С., Докичев В.А. Необычное расщепление этиленацеталей диэтилалюминийхлоридом // Доклады Академии наук СССР. – 1999. – Т. 368, № 2. – С. 201-203.
8. Гафарова Ю.Т., Вострикова О.С., Злотский С.С., Докичев В.А. Расщепление 1,3-диоксацикланов алюминийорганическими соединениями // Башкирский химический журнал – 2000. – Т. 7. № 6 – С. 3-6.
9. Гафарова Ю.Т. Реакции расщепления циклических ацеталей под действием алюминийорганических соединений и высокотемпературного газофазного пиролиза. Автореферат к диссертации на соискание степени кандидата химических наук. – Уфа, 2001. – 23 с.
10. Миронов И.В., Мельницкий И.А., Сираева И.Н., Киладзе Т.К., Кантор Е.А., Рахманкулов Д.Л. Взаимодействие 4-R-1,3-диоксациклоалканов с триэтилсианом // Журнал общей химии. – 1982. – Т. 52, № 10. – С. 2284-2288.

© Гимаев Р.А., Михайлова Н.Н., Шавшукова С.Ю., 2025

УДК 547.834.22:547.869.53

НЕКОТОРЫЕ РЕАКЦИИ N-(ХЛОРАЦЕТИЛ)ФЕНОТИАЗИНА С S-НУКЛЕОФИЛАМИ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКОГО РЯДА

Глузмин Н.О., Цымбал Т.Л., Даус Е.С., Косенко Д.Д., Киндоп В.К.,
Бурый Д.С., Доценко В.В.

ФГБОУ ВО Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия

В последнее время в дизайне лекарственных средств получила развитие концепция молекулярной гибридизации как способ преодоления определенных недостатков традиционных лекарственных препаратов. Концепция молекулярной гибридизации базируется на предположении, что одна «гибридная» молекула проявляет структурные особенности двух (в случае гетеродимерных молекул) или нескольких «родительских» фармакофорных молекул, которые независимо, но селективно действуют на две различные фармакологические мишени. Молекулярные гибриды представляют значительный интерес вследствие расширенного фармакологического потенциала. Наличие двух или более фармакофорных субъединиц в одной молекуле часто приводит к синергическому действию, превышающему сумму эффектов отдельных соединений. Фармакофорные субъединицы могут действовать и независимо друг от друга, через сродство разных фрагментов к разным мишеням, либо наоборот, одновременно через разные участки белка-мишени.

N-(хлорацетил)фенотиазин является удобной молекулярной платформой для синтеза молекулярных гибридов со структурным фрагментом фенотиазина. В свою очередь, такие гетеродимеры фенотиазинового ряда проявляют противогрибковые, противораковые, противовоспалительные, антибактериальные, противомалярийные, анальгетические и восстанавливающие свойства [1]. С другой стороны,

известен класс биологически активных соединений ряда никотинонитрила (3-цианопиридина) и тиено[2,3-*b*]пиридина [2]. Такие соединения также представляют заметный фармакологический интерес. Целью работы было получение новых гетеродимерных молекул, сочетающих в своей структуре фармакофорные фрагменты соответствующего серосодержащего азина и фенотиазина. Для этого нами предварительно был синтезирован N-(хлорацетил)фенотиазин **1** (схема 1) через реакцию хлорацетилирования фенотиазина.

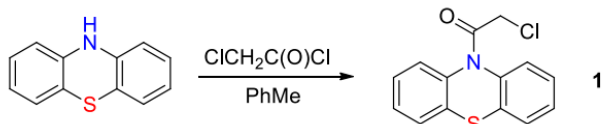


Схема 1. Синтез замещенных фенотиазинов **3** и **4**

Далее нами был получен ряд S-нуклеофильных реагентов гетероциклического ряда **5**. Реакция последних с N-(хлорацетил)фенотиазином **1** приводит к ожидаемым гетеродимерам **6** (Схема 2).

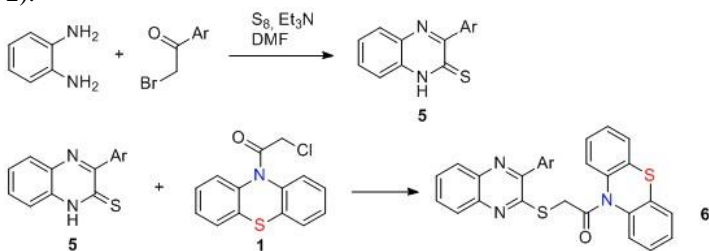


Схема 2. Синтез 2-тиоксохиноксалинов **5** и их реакция с N-(хлорацетил)фенотиазином **1**

Ранее описанным способом [3] нами также были синтезированы некоторые 1,4-дигидропиридин-2-тиолаты – например, 6-метил-5-фенилкарбамоил-4-(2-фурил)-3-циано-1,4-дигидропиридин-2-тиолат N-метилморфолина **7** (Схема 3). На основе тиолатов **7** получены новые гетеродимеры. Строение всех новых соединений подтверждено данными спектральных исследований (ИК, ЯМР). Свойства и фармакологический потенциал полученных гетеродимерных продуктов подлежат дальнейшему изучению.

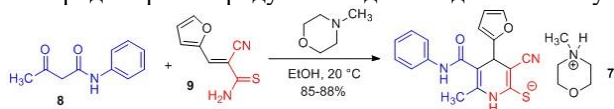


Схема 3. Синтез 1,4-дигидропиридин-2-тиолата N-метилморфолина **7**

Исследование выполнено при финансовой поддержке Кубанского научного фонда в рамках научного проекта № Н-24.1/30 «Гетеродимерные молекулы на основе фенотиазина: синтез, свойства и оценка фармакологического потенциала»

Литература

1. Posso, M. C. Development of phenothiazine hybrids with potential medicinal interest: a review / M.C. Posso, F.C. Domingues, S. Ferreira, S. Silvestre // *Molecules*. – 2022. – Vol. 27. – Paper 276. – DOI: 10.3390/molecules27010276.
2. Dotsenko, V. V. Recent advances in the chemistry of thieno[2,3-b]pyridines. Part 1. Methods of synthesis of thieno[2,3-b]pyridines // V.V. Dotsenko, D.S. Buryi, D.Yu. Lukina, S.G. Krivokolysko // *Russ. Chem. Bull.* – 2020. – Vol. 69, N 10. – P. 1829-1858. – DOI: 10.1007/s11172-020-2969-2.
3. Dyachenko, V. D. Synthesis and properties of *N*-methylmorpholinium 6-methyl-5-phenylcarbomoyl-4-(2-furyl)-3-cyano-1,4-dihydropyridine-2-thiolates and -selenolates / V. D Dyachenko, S. G. Krivokolysko, V. P. Litvinov // *Russ. J. Org. Chem.* – 1998. – Vol. 34. – P. 876-881.

© Глузмин Н.О., Цымбал Т.Л., Даус Е.С., Косенко Д.Д., Киндоп В.К., Бурый Д.С., Доценко В.В., 2025

УДК 547.233

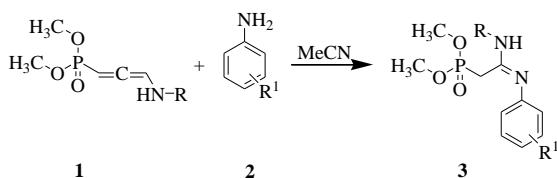
СИНТЕЗ НЕСИММЕТРИЧНЫХ АМИДИНОВ НА ОСНОВЕ РЕАКЦИИ ДИМЕТИЛ-2-(N-АДАМАНТ-1-ИЛ)трет- БУТИЛУИМИНОЭТЕНИЛФОСФОНАТОВ С НИТРОАНИЛИНАМИ Головка А.И., Свиницкая Н.И.

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

В современной органической химии кетенимины занимают важное место благодаря широкому синтетическому потенциалу. Особое внимание исследователей привлекают реакции кетениминов с аминами, открывающие путь к получению амидинов. Амидины, полученные на основе фосфонат-модифицированных кетениминов, представляют интерес как потенциальные биологически активные соединения, которые могут быть использованы для разработки новых фармакологических агентов. Амидиновая группа, широко встречающаяся в природных и синтетических лекарственных соединениях, в сочетании с фосфонатной группой предоставляет уникальные возможности для создания биоактивных молекул. Введение нитрогруппы в ароматическое кольцо оказывает существенное влияние на электронную плотность ароматического ядра, понижая основность аминов. Однако наличие нитрогруппы позволяет варьировать некоторые физико-химические параметры. Так, увеличение полярности приводит к усилению связывания с биомолекулами, содержащими нуклеофильные участки, такими как ферменты и рецепторы, благодаря увеличению числа водородных связей и диполь-дипольных взаимодействий. Это также способствует повышению

водорастворимости соединений, улучшая их биодоступность при системном введении. Введение нитрогруппы также может снижать липофильность полученных амидинов, что уменьшает их склонность к связыванию с липидными мембранами и снижает потенциальную токсичность. В ряде случаев наблюдается повышение антибактериальной и противоопухолевой активности по сравнению с аналогами.

В ходе исследований реакцией стабильных стерически затруднённых диметил-2-(N-адамант-1-ил/*tert*-бутил)иминоэтиленфосфонатов **1** с моонитрозамещёнными ароматическими аминами **2** в ацетонитриле при нагревании получен ряд новых несимметричных фосфоацетамидинов **3**, выход которых варьировался в диапазоне 61–70%.



R = Ad, *t*-Bu

R¹ = 2-NO₂, 3-NO₂, 4-NO₂

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

© Головки А.И., Свиницкая Н.И., 2025

УДК 547.92:542.9:54.057

ТРАНСФОРМАЦИИ ПРОПИНИЛЬНОГО ЭФИРА ФУЗИДОВОЙ КИСЛОТЫ

Головнина Д.А.¹, Латыпова А.Ф.¹, Салимова Е.В.², Парфенова Л.В.²

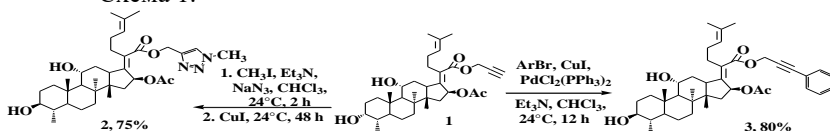
¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Фузидовая кислота (ФК) – природная тритерпеновая молекула, выделенная из грибовой культуры *Fusidium coccineum*, используется в клинической практике для лечения стафилококковых инфекций, устойчивых к пенициллину [1]. Однако видоспецифичное действие ФК в отношении *S. aureus* обуславливает синтетический поиск новых производных с целью расширения спектра ее фармакологической активности [2]. В продолжение исследований по синтетическим трансформациям ФК нами проведена функционализация терминальной тройной связи пропинильного эфира **1** посредством реакций, катализируемых солями меди (I). Эфир **1** вовлекали в реакцию 1,3-диполярного циклоприсоединения с NaN₃ и йодметаном в

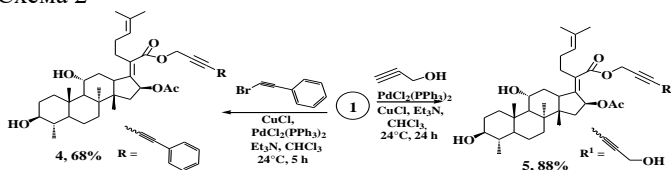
присутствии Et_3N и CuI в качестве катализатора, в результате которой образовывалось производное **2**. Реакцию Сонгаширы осуществляли взаимодействием алкина **1** с бромбензолом в присутствии Et_3N и комбинированной каталитической системы $\text{CuI}/\text{PdCl}_2(\text{PPh}_3)_2$. В результате кросс-сочетания получено ацетиленовое производное **3** (схема 1).

Схема 1.



По реакции Кадио-Ходкевича были получены замещенные диацетиленовые аналоги **4** и **5** путем взаимодействия соединения **1** с бромэтинилбензолом или пропаргиловым спиртом в присутствии Et_3N и каталитической системы $\text{CuCl}/\text{PdCl}_2(\text{PPh}_3)_2$ (схема 2).

Схема 2



Таким образом, нами изучены реакции, характерные для тройной связи и получены триазольные и замещенные моно- и диацетиленовые производные ФК, представляющие интерес в качестве потенциальных антимикробных агентов.

Литература

1. J.D. Romano, N.P. Tatonetti, Front Genet., 2019, 10, 368-393; DOI: 10.3389/fgene.2019.00368.
2. M. Zhao, T. Gödecke, J. Gunn, J.A. Duan, C.T. Che, Molecules, 2013, 18, 4054-4080; DOI:10.3390/molecules18044054.

Работа выполнена в рамках государственного задания № FMRS-2025-0033.

© Головнина Д.А., Латыпова А.Ф., Салимова Е.В., Парфенова Л.В., 2025

УДК 547.814.1

СОВРЕМЕННЫЕ ПОДХОДЫ К СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНОМУ СИНТЕЗУ И РЕАКЦИЯМ ПЕРЕАМИНИРОВАНИЯ 3-

((ДИМЕТИЛАМИНО)МЕТИЛЕН)(ТИО)ОКСОХРОМЕНОНОВ

Гребенникова В.А, Мажукина А.О.

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

Аминометиленхромен-2-оны представляют собой интересный класс соединений, обладающих уникальными химическими свойствами и структурной гибкостью. Их использование в качестве синтонов для

создания гибридных структур открывает новые горизонты в области органической химии и материаловедения.

Многие производные хромен-2-онов уже используются в медицине в качестве противовоспалительных, антиоксидантных, антимикробных, противоопухолевых и кардиопротекторных средств[1-3]. Исследование аминотилированных аналогов может привести к открытию новых лекарственных средств, например, для лечения онкологических, инфекционных или нейродегенеративных заболеваний.

В ходе настоящей работы нами было изучено поведение 3-диметиламинотимен-4-оксохромен-2-она и его тиоксо- аналога в реакции переаминирования под действием 1,2,4-триазол-3-амина. Синтез исходного соединения (1) был осуществлен взаимодействием 4-гидрокси-2Н-хромен-2-она с диметилформамид диметилацеталем в реакторе герметических сосудов Monowave 50 Anton Paar при 105⁰С и давлении 2 бар, с выходом 0,11г (27%). 3-Диметиламинотимен-4-тиоксохромен-2-он (2) был получен при воздействии реагента Лавессона на субстрат (1) при постоянном перемешивании (температура проведения реакции 25⁰С) с выходом 0,02г (30%).

Согласно результатам спектральных исследований (¹H, ¹³C, HSQC, HMBC) показано, что соединение 1 существует в Е-конфигурации, о чем свидетельствует наличие в HMBC корреляции протона =CH группы с атомом углерода лактонного карбонила (8.4/178.32). Аналогично, тиоксосоединение (2) находится в Z- конфигурации.

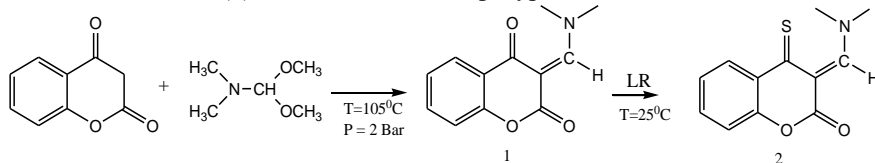


Схема 1. Синтез 3-((диметиламино)метил)-3,4-дигидро-4-(тио)оксохромен-2-онов (1,2)

Обнаружено, что кипячение аминотименхромен-2-онов (1,2) с аминотриазолом в изопропиловом спирте в отсутствие катализатора, является подходящими условиями для проведения переаминирования. Вероятно, реакция протекает по Михаэлю как первичная атака аминогруппы амина с последующим элиминированием молекулы диметиламина с образованием 3-((4Н-1,2,4-триазол-3-иламино)метил)-3,4-дигидро-4-(тио)оксохромен-2-онов (3,4) в виде двух геометрических изомеров с выходом 30-50%.

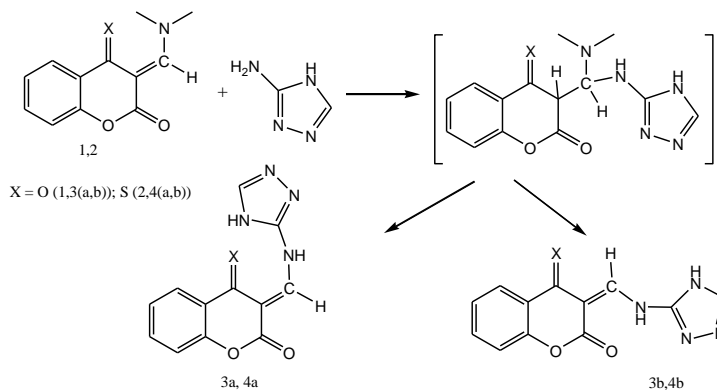


Схема 2. Синтез 3-((4H-1,2,4-триазол-3-иламино)метил)-3,4-дигидро-4-(тио)оксохромен-2-онов (3,4)

Литература

1. Zhe Zhang ,Kang Li, Guang-Yu,Zhang, You-Zhi Tang, Zhen Jin. Design, synthesis and biological activities of novel pleuromutilin derivatives with a substituted triazole moiety as potent antibacterial agents,European Journal of Medicinal Chemistry(2020), Volume 204 P112604
2. Hepworth, J.D.; Gabbutt, C.D.; Heron, B.M., In Comprehensive Heterocyclic Chemistry II, Katritzky, A.R.; Rees, C.W.; Scriven, E.F. V., Eds.; Elsevier: Oxford, (1996); Vol. 5, p 301.
3. 3. Prakash O, Kumar R, Prakash V (2008) Synthesis and antifungal activity of some new 3-hydroxy -2-(1-phenyl-3-aryl-4-pyrazolyl) chromones. Eur J Med Chem 43:435–440

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

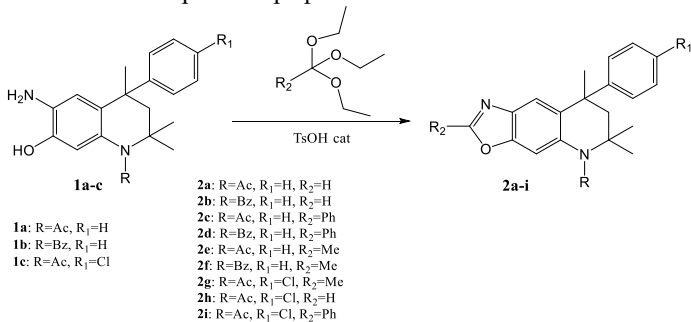
АННЕЛИРОВАНИЕ ОКСАЗОЛЬНОГО ЦИКЛА К N-ЗАМЕЩЕННЫМ
6-АМИНО-4-АРИЛ-7-ГИДРОКСИ-2,2,4-ТРИМЕТИЛ-1,2,3,4-
ТЕТРАГИДРОХИНОЛИНАМ

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

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

Оксазолы и их производные нашли широкое применение во многих областях науки и техники, благодаря обширному спектру полезных свойств, таких как антибактериальная, противогрибковая активности и др.[1-3] Их ценность подтверждается активным использованием в фармацевтике, сельском хозяйстве, в изготовлении красителей и в целом ряде других ключевых отраслей. В связи с этим, создание эффективных синтетических подходов к получению производных оксазолов и конструирование на их основе гетероциклических систем представляет собой важное и перспективное направление.

В данной работе было установлено, что взаимодействие N-замещенных-4-арил-6-амино-7-гидрокси-2,2,4-триметил-1,2,3,4-тетрагидрохинолинов **1a-c** с различными ортоэфирами, приводит к образованию новых, потенциально биологически активных N-ацил-8-арил-6,6,8-триметил-7,8-дигидрооксазоло[4,5-g]хинолинов **2a-i**. Реакцию проводили при кипячении смеси реагентов в присутствии п-толуолсульфокислоты в качестве катализатора. За ходом реакции следили с помощью тонкослойной хроматографии.



Литература

1. Joshi S. Systematic scientific study of 1, 3-oxazole derivatives as a useful lead for pharmaceuticals: a review / S. Joshi, AS. Bisht, D. Juyal // Pharm Innov J. – 2017. – V. 6, № 1– P. 109–117.
2. Synthesis and antibacterial activity of novel and potent DNA gyrase inhibitors with azole ring / A. Tanitame, Y. Oyamada, K. Ofuji [et al.] // Bioorgan Med Chem. – 2004. – V. 12, № 21. – P. 5515–5524.

УДК 547

КОМПЬЮТЕРНОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ N-ЗАМЕЩЕННЫХ АМИНОФЕНОЛОВ

Григорьева Н.Ю.¹, Клименко Д.И.²

(руководители: Краснов К.А.¹)

¹ФГБУ НКЦТ им. С.Н. Голикова ФМБА, Санкт-Петербург, России

²ФГБОУ ВО «СЗГМУ им. И.И. Мечникова», Санкт-Петербург, Россия

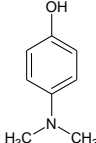
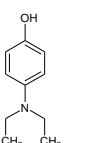
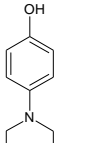
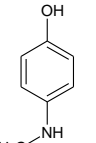
Сегодня аминфенолы широко используются в химической и фармацевтической промышленности [1]. Первое соединение анилинового ряда, вошедшее в медицину является N-(4-этоксифенил)ацетамид «фенацетин» с обезболивающим действием на организм. В результате клинического наблюдения стало ясно, что фенацетин оказывает токсические эффекты на организм [2]. Сейчас зарегистрирован препарат являющийся метаболитом фенацетина N-(4-гидроксифенил)ацетамид - «парацетамол». Их применение может сопровождаться образованием метгемоглобина [3, 4]. Другое производное – 4-диметиламинофенол (1) используется как антидот при отравлениях цианидами [5]. Антидотный эффект Антициана обусловлен его метгемоглобинообразованием.

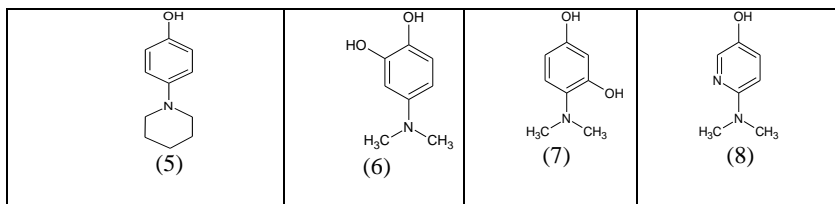
Поэтому оценка *in silico* фармакокинетических параметров серии N-алкилзамещенных аминфенолов с помощью веб-сервисов ADMETlab 2.0 актуальна, что и было проведено в данной работе.

В таблице 1 представлены структурные формулы веществ, для которых прогнозировались фармакокинетические параметры.

Таблица 1

Структурные формулы N-замещенных аминфенолов

 <p>Антициан (1)</p>	 <p>(2)</p>	 <p>(3)</p>	 <p>(4)</p>
---	--	--	--



Прогноз осуществляли по следующим параметрам: BBB – проникновение через гематоэнцефалический барьер (ГЭБ); PPB – связывание с белками плазмы крови; Pgp-substrate – способность выводиться из клеток посредством активного транспорта; CYP3A4, CYP1A2, CYP2C19 и CYP2D6 – ингибирование изоферментов. Результаты представлены в таблице 3.

Таблица 2

Результаты прогнозирования фармакокинетических параметров
производных 1-8

Соединение	BBB	PPB, %	Pgp-substrate	CYP3A4 inhibitor	CYP1A2 inhibitor	CYP2C19 inhibitor	CYP2D6 inhibitor
1.	++	55	++	--	++	-	--
2.	--	74	++	---	+++	+	--
3.	-	70	---	---	+++	++	-
4.	-	61	---	--	+	--	---
5.	-	82	---	--	+++	++	+
6.	--	70	+	--	-	--	--
7.	--	65	++	--	-	--	--
8.	+++	56	--	---	++	--	---

В результате виртуального скрининга предсказан высокий уровень связывания с белками плазмы крови и низкая ингибирующая активность в отношении цитохрома P450, что положительно характеризует данные соединения с фармакологической точки зрения, также проникновение через ГЭБ выявлено у соединений **1** и **9**. Полученные нами результаты указывают на целесообразность дальнейшего изучения производных аминифенола в качестве основы для фармацевтических разработок.

Литература:

1. Mitchell S.C., Cormichael P., Waring R. Kirk – Othmer Encyclopedia of Chemical Technology: Aminophenols - New York: John Wiley & Sons, 2003. – p. 652 - 678.
2. Cochran A.J., Lawson D.H., Linton A.L. – Renal papillary necrosis following phenacetin excess. – Scott Med J., 1967, Jul; 12(7): 246-50. DOI: 10.1177/003693306701200702. PMID: 6036245.
3. Sahu K.K., George S.V., Siddiqui A.D. – Systematic Review of Methemoglobinemia in Acetaminophen Poisoning. – QJM., 2020, May 19: HCAA174. DOI: 10.1093/qjmed/hcaa174. PMID: 32428237.

4. Rianprakaisang T., Blumenberg A., Hendrickson R.G. – Methemoglobinemia associated with massive acetaminophen ingestion: a case series. – Clin Toxicol (Phila), 2020 Jun; 58(6): 495-497. DOI: 10.1080/15563650.2019.1657883. Epub 2019 Aug 26. PMID: 31446806.

5. Куценко С.А. – Военная токсикология, радиобиология и медицинская защита. – СПб.: Фолиант, 2004. – 528 с. ISBN 5-93929-082-5.

© Григорьева Н.Ю., Клименко Д.И., 2025

УДК 547.727:547.728

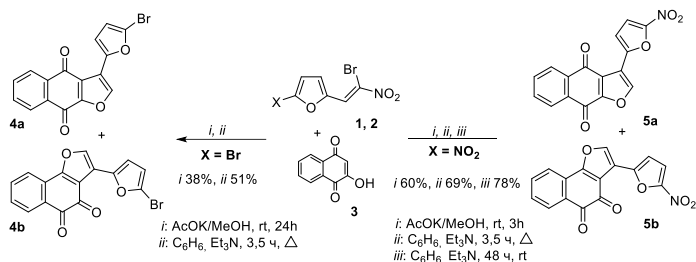
СИНТЕЗ ФУРАНСОДЕРЖАЩИХ ФУРОНАФТОХИНОНОВ НА ОСНОВЕ ГЕМ-БРОМНИТРОЭТЕНОВ

Демчук З.А., Минаева В.Ю., Озерова О.Ю., Макаренко С.В.

*Российский государственный педагогический университет
им. А.И. Герцена, Санкт-Петербург, Россия*

Фурановый фрагменты входят в состав многих лекарственных препаратов: анальгетиков, антисептиков и противомикробных средств. Среди них в современной медицине особое внимание привлекают конденсированные производные фурана – фуронафтохиноны, которые демонстрируют широкий спектр биологической активности. Например, фуронафтохинон (авицехинон-В), выделенный из коры стебля *Avicennia alba*, проявил умеренную цитотоксическую активность к клеткам гепатомы крысы [1]. Таким образом синтез и изучение подобных структур является актуальным с точки зрения не только теоретической органической химии, но и прикладного аспекта.

Нами изучено взаимодействие 1-бром-1-нитро-2-(5-бром(нитро)фурил)этен **1**, **2** с 2-гидрокси-1,4-нафтохиноном **3**. Реакции успешно протекают в безводном бензоле или метаноле в присутствии триэтиламина или ацетата калия (плавленного), соответственно и приводят к образованию фурансодержащих фуронафтохинонов **4**, **5**, выделяемых в виде смеси двух изомеров, которые разделяются методом дробной перекристаллизации. На примере реакции 1-бром-1-нитро-2-(5-бромфурил)этена **1** с 2-гидрокси-1,4-нафтохиноном **3** в безводном метаноле с ацетатом калия показана возможность образованию индивидуального изомера **4a**.



Строение всех синтезированных соединений охарактеризовано данными спектроскопии ЯМР с использованием двумерных экспериментов, а также подтверждено результатами рентгеноструктурного анализа.

Литература

1. Ch. Wu, R.K. Johnson, M.R. Mattern, J.C. Wong, D.G.I. Kingston. Synthesis of furanonaphthoquinones with hydroxyamino side chains // J. Nat. Prod. – 1999. – Vol. 62. – P. 963-968.

© Демчук З.А., Минаева В.Ю., Озерова О.Ю., Макаренко С.В., 2025

УДК 547.458.61

ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ КРАХМАЛА И ЛИМОННОЙ КИСЛОТЫ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ СВОЙСТВ

Динер Е.Ю., Таганбекова З.К., Маркин В.И.

Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия.

В последние годы наблюдается рост интереса к полисахаридным гидрогелям как перспективным биоматериалам с регулируемыми свойствами. Особое внимание уделяется системам на базе модифицированного крахмала, которые сочетают гидрофильность с экологической безопасностью. Современные методы синтеза предполагают использование кросс-линкеров, которые обеспечивают: ускоренное формирование трёхмерных полимерных сеток, повышенную стабильность конечного продукта, что приводит к более высокой водопоглощающей способности.

Современные исследования в области биоматериалов демонстрируют перспективность применения экологичных кросс-линкеров для создания функциональных гидрогелей. Лимонная кислота, выступая альтернативой традиционным реагентам, обеспечивает формирование стабильных трёхмерных структур в крахмалсодержащих системах. При взаимодействии карбоксильных групп лимонной кислоты с гидроксилами полимерных цепей крахмала происходит: образование сложноэфирных связей с гидроксильными группами крахмала, увеличение плотности полимерной сети, уменьшение размера пор полимерной сети, оптимизация абсорбционных характеристик

Использование лимонной кислоты позволяет исключить токсичные побочные продукты синтеза, регулировать кинетику деградации материала *in vivo*, сохранять биосовместимость при медицинском применении.

Разрабатываемые системы демонстрируют потенциал для:

- ▶ Создания умных сельскохозяйственных покрытий с контролем влажности
- ▶ Производства раневых покрытий с пролонгированным высвобождением антисептиков и многое другое.

Гидрогели на основе крахмала, сшитые лимонной кислотой (ЛК), демонстрируют перспективные свойства для использования их в сельском хозяйстве [1]. Получены гидрогели на основе крахмала, сшитые лимонной кислотой в реакции этерификации.

Для синтеза крахмал желатинизировали. Затем, в полученный полимерный раствор добавляли 0,3% или 5% (относительно массы крахмала) кросс-линкер – лимонную кислоту (ЛК), путем перемешивания при температуре 50 °С в течение 1-5 ч [2]. Продукт дегидратировали безводным этанолом. Обезвоженный образец сушили на открытом воздухе.

Для определения водопоглощающей способности образцы взвешивали до и после набухания в дистиллированной воде через 24 ч при 25°С. Результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1

Водопоглощающая способность отвержденных образцов на основе крахмала и лимонной кислоты при разном времени синтеза и соотношении реагентов в 100 мл воды

Название образца	Соотношение крахмал : лимонная кислота, моль	Время синтеза, ч	Водопоглощение (24ч), %
КрЛк ₁ (2-0,006)	400 : 1	1	171
КрЛк ₂ (2-0,006)	400 : 1	2	171
КрЛк ₂ (5-0,25)	24 : 1	2	144
КрЛк ₃ (2-0,006)	400 : 1	3	163
КрЛк ₄ (2-0,006)	400 : 1	4	182
КрЛк ₅ (2-0,006)	400 : 1	5	178

Как можно увидеть в таблице 1, что наибольшую влагопоглощающую способность имеют образцы с соотношением крахмал : лимонная кислота 400 : 1 и при условии 4 и 5 ч синтеза -182% и 178% соответственно. Однако, удлинение процесса синтеза приводит к незначительному приросту свойств, поэтому оптимальное время получения продуктов в данных условиях составляет 1-2 ч, что позволяет оптимизировать производство с точки зрения экономии времени и ресурсов, при сохранении желаемых свойств

гидрогелей. Также при времени синтеза 2 ч, установлено, что оптимальное соотношение крахмал : лимонная кислота 400 : 1 (171%) вместо 24 : 1 (144%), что позволяет повысить сорбирующую способность полимера при снижении расходов реагентов.

Таким образом, полученные гидрогели обладают потенциалом для применения в агротехнологиях, включая сохранение влаги в почве, улучшение её структуры, контролируемое высвобождение удобрений, предотвращение эрозии, а также в процессах посева семян и ландшафтного дизайна.

Литература

1. Green V.S., Stott D.E. Polyacrylamide: a review of the use, effectiveness, and cost of a soil erosion control amendment. In: Sustaining the global farm. D.E. Stott, R.H. Mohtar, G.C. Steinhardt (eds.). USA, West Lafayette, 2001.

2. Холназаров Б.А., Тураев Х.Х., Ахатов А.А. Синтез и характеристика биоразлагаемых гидрогелей на основе крахмала и лимонной кислоты // *Universum: химия и биология*. – 2020. – № 10. – С. 37-40.

© Динер Е.Ю., Таганбекова З.К., Маркин В.И., 2025

УДК 547.816.8

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ДИЦИАНОВИНИЛЬНОГО ФРАГМЕНТА НА ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СПИРОПИРАНОВ ИНДОЛИНОВОГО РЯДА

Дмитриев В.С.¹, Пугачев А.Д.¹, Бардасов И.Н.², Иевлев М.Ю.²,
Прончатов И.С.¹, Козленко А.С.¹, Смагина М.И.¹, Ожогин И.В.¹

¹ Научно-исследовательский институт физической и органической химии
Южного Федерального Университета, Ростов-на-Дону, Россия

² Чувашский Государственный Университет им. И.Н. Ульянова,
Чебоксары, Россия

Спиропираны представляют собой важный класс фотохромных соединений, способных обратимо менять структуру под действием света и других внешних стимулов [1]. Данная трансформация сопровождается резким изменением дипольного момента молекулы и ее оптических свойств, таких как положение максимумов поглощения и флуоресценции [2]. Благодаря такой способности спиропираны активно используются в качестве молекулярных сенсоров, оптических переключателей, а также фотоуправляемых сенсibilizаторов в DSSC-устройствах.

В рамках данного исследования осуществлен синтез и изучены фотоэлектрические характеристики спиропирановых производных – 1,3,3,8'-тетраметил-6'-винилдикарбонитрил-[индолин-2,2'-2Н-хромена] и 1,3,3,8'-тетраметил-6'-формил-[индолин-2,2'-2Н-хромена]. Синтезированные спиропираны были исследованы в качестве фотоуправляемых солнечных

элементов. Установлено, что введение дициановинильного фрагмента увеличило эффективность преобразования энергии (PCE) с 0,04% до 0,06% без УФ-активации и с 0,17% до 0,31% после облучения УФ светом (365 нм) в течение 10 минут. Значительный рост продемонстрировали и фотоэлектрические параметры: плотность тока короткого замыкания (J_{sc}) увеличилась с 0,131 до 0,203 $\text{мА} \cdot \text{см}^{-2}$ (до облучения) и с 0,419 до 0,712 $\text{мА} \cdot \text{см}^{-2}$ (после облучения). Полученные результаты открывают перспективу создания саморегулируемых сенсibilизированных красителем солнечных элементов (DSSC), способных адаптироваться к изменяющимся внешним условиям, что особенно важно для разработки энергоэффективных и «умных» фотоэлектрических систем.

Литература

1. Klajn R. Spiropyran-based dynamic materials. – Chemical Society Reviews. – 2014. – Т. 43. – №. 1. – 148-184 с.
2. Kozlenko A.S., Ozhogin I.V., Pugachev A.D., Lukyanova M.B., El-Sewify I.M., Lukyanov B.S. A modern look at spiropyrans: From single molecules to smart materials. – Topics in Current Chemistry. – 2023. – Т. 381. – №. 1. – 8 с.

© Дмитриев В.С., Пугачев А.Д., Бардасов И.Н., Иевлев М.Ю., Прончатов И.С., Козленко А.С., Смагина М.И., Ожогин И.В., 2025

УДК 547.774.2:547.781.1

3-(БЕНЗОИМИДАЗОЛ-2-ИЛ)-1-АРИЛПРОПАН-1-ОНЫ В РЕАКЦИЯХ ДЕГИДРАТАЦИИ

Егорова А.В.¹, Цимбаленко В.Д.¹, Скляр А.Е.¹, Гринёв В.С.^{1,2}

¹ *Саратовский национальный исследовательский государственный университет им. Н.Г. Чернышевского, Институт химии, Саратов, Россия*

² *Институт биохимии и физиологии растений и микроорганизмов, Федеральный исследовательский центр «Саратовский научный центр РАН», Саратов, Россия*

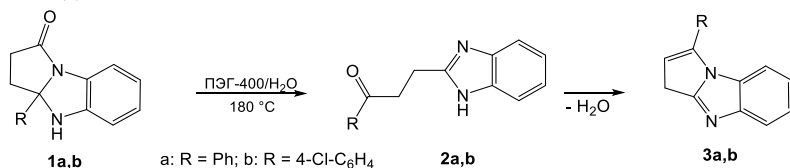
Производные бензимидазола обладают широким спектром биологической активности, в том числе ростостимулирующей по отношению к растениям. Помимо этого, бензимидазол является важным фармакофором и привилегированной структурой в медицинской химии, поскольку его производные часто обладают выраженными фармакологическими свойствами, включая противомикробные, противовирусные и противовоспалительные эффекты.

Изучение взаимосвязи «структура-свойство» (SAR) в ряду производных бензимидазола является важным для разработки новых эффективных регуляторов роста растений. Дизайн новых эффективных регуляторов роста растений на основе данных производных является

важным научным направлением, поскольку оно актуально для развития сельского хозяйства с учетом современных жестких экологических требований.

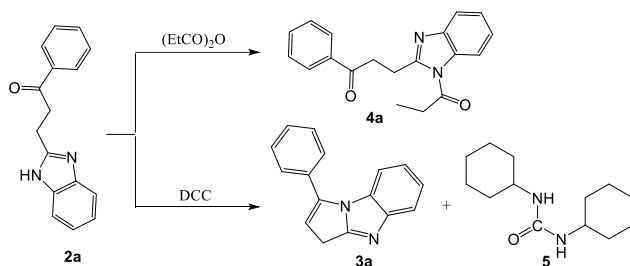
Несмотря на наличие ряда методов синтеза производных бензимидазола, разработка новых подходов к их модификации остается актуальной задачей. Традиционные методы модификации часто приводят к образованию нежелательных побочных продуктов и требуют использования токсичных реагентов, что усложняет процесс очистки и уменьшает выход целевого продукта. Использование мягких условий, а также новых способов активации молекул в формируемом синтетическом подходе может улучшить эффективность реакции, делая метод более доступным и гибким в применении различных модификаций структуры бензимидазола.

Синтез 3а-арил-2,3,3а,4-тетрагидро-1*H*-бензо[*d*]пирроло[1,2-*a*]имидазол-1-оны (**1a,b**) в условиях ПЭГ-400/ H_2O в реакторе герметичных сосудов Monowave 50 при 180 °С приводит к образованию 3-(1*H*-бензо[*d*]имидазол-2-ил)-1-арилпропан-1-онов (**2a,b**) с выходами 58-61%.



Соединения **2a,b** могут служить удобным субстратом для получения арилзамещённых 3*H*-бензо[*d*]пирроло[1,2-*a*]имидазолов (**3a,b**) путём внутримолекулярной гетероциклизации в среде растворителей, способных к дегидратации. Нами были использованы два подхода для синтеза целевых соединений **2a,b**: реакция в среде пропионового ангидрида и взаимодействие с *N,N'*-дициклогексилкарбодиимидом (DCC).

Нагревание **2a** в пропионовом ангидриде не приводит к желаемому **3a**. В изученных условиях происходит ацилирование по атому азота бензимидазольного фрагмента с образованием 1-фенил-3-(1-пропионил-1*H*-бензо[*d*]имидазол-2-ил)пропан-1-она **4a**.



Взаимодействие соединения **2a** с DCC в безводном ацетоне приводит, помимо целевого 1-фенил-3*H*-бензо[*d*]пирроло[1,2-*a*]имидазола **3a**, по-видимому, к появлению продуктов конкурирующих реакций образующейся в ходе дегидратации дициклогексилмочевины **5**, выступающей в качестве нуклеофила, что наблюдалось ранее для гиппуровой кислоты [1].

Структура полученных продуктов в настоящее время устанавливается с помощью совокупности физико-химических и спектральных методов.

Литература

1. Sheikh, M.C., Takagi, S., Yoshimura T., et al. Mechanistic studies of DCC/HOBt-mediated reaction of 3-phenylpropionic acid with benzyl alcohol and studies on the reactivities of 'active ester' and the related derivatives with nucleophiles // *Tetrahedron*. – 2010. – Vol. 66. – No. 36. – P. 7272-7278.
2. Grinev V.S., Egorova A.Y. 3a-Phenyl-2,3,3a,4-tetrahydro-1*H*-benzo[*d*]pyrrolo[1,2-*a*]imidazol-1-one, a potential plant-growth regulator // *Acta Crystallographica Section C: Crystal Structure Communications*. – 2013. – Vol. 69. – Iss. 8. – P. 880-883.

© Егорова А.В., Цимбаленко В.Д., Склад А.Е., Гринёв В.С., 2025

УДК 535.37

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ СОПОЛИМЕРОВ КУРКУМИНОИДА ДИФТОРИДА БОРА С МЕТИЛМЕТАКРИЛАТОМ

Заводянский М.А.¹, Щёлоков А.И.^{1, 2}

¹Институт химии ДВО РАН, Владивосток, Россия

²Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия

β-Дикетонаты дифторида бора и полимерные люминесцентные композиции на их основе в последнее время привлекают внимание исследователей. Это связано с уникальными люминесцентными характеристиками таких полимерных материалов, которые позволяет

использовать их для разработки хемосенсоров [1] OLEDs, нелинейной оптики [2].

Целью данной работы является получение новых люминесцентных полимерных материалов, путем проведения блочной сополимеризации куркуминоида дифторида бора – **K1.1** (рисунок 1) и метилметакрилата.

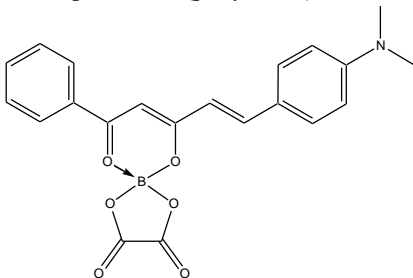


Рис. 1. Структурная формула куркуминоида дифторида бора **K1.1**, используемого в качестве мономера при сополимеризации

Для проверки каталитических свойств куркуминоида реакция полимеризации проводилась в присутствии перекиси бензоила и без нее. Было установлено, что в присутствии красителя реакция проходит значительно быстрее. При отсутствии перекиси реакция также проходит, пусть и значительно медленнее.

В ходе работы было получено четыре полимерных материала – при 85 и 90 градусах в присутствии перекиси и без нее. Спектры люминесценции и возбуждения люминесценции полученных полимерных материалов представлены на рисунке 2. Оба полимера, полученные в присутствии перекиси, а также полимер, полученный при 90 градусах, показывают максимумы спектров возбуждения люминесценции при 450 нм, а максимумы спектров люминесценции при 525 нм. Для полимера, полученного при 85 градусах в отсутствии перекиси, наблюдается максимум спектра возбуждения люминесценции при 325 нм, а максимумы спектра люминесценции – 375 нм и 425 нм.

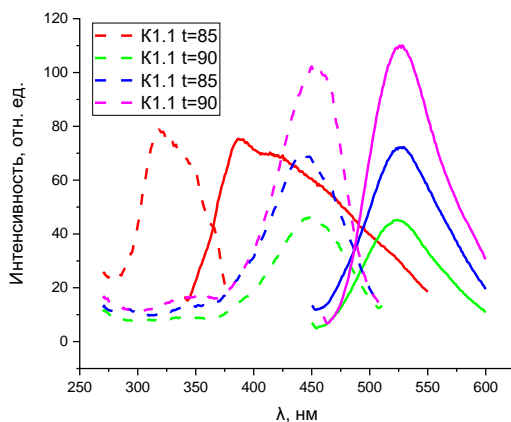


Рис. 2. Спектры люминесценции (сплошная линия) и возбуждения люминесценции (пунктирная линия) сополимеров **K1.1** с метилметакрилатом. Синий и фиолетовый цвет соответствуют сополимерам, полученным в присутствии перекиси бензоила, красный и зеленый – без.

Анализ полученных данных показывает, что проведение реакции полимеризации при различных условиях оказывает значительное влияние на люминесцентные свойства полимерного материала. Так, при использовании во время полимеризации перекиси бензоила, увеличивается интенсивность люминесценции, если при этом увеличивать еще и температуру, то интенсивность люминесценции дополнительно возрастает. Это можно объяснить увеличением количества свободных радикалов в реакционной смеси. В то же время, проведение медленной полимеризации при пониженной температуре в отсутствие перекиси (K1.1.85) позволяет получить материал с преобладающей мономерной флуоресценцией.

Литература

1. Shen Z. Development and application of a novel β -diketone difluoroboron-derivatized fluorescent probe for sensitively detecting H₂S / Shen Z., Gao Y., Li M. // Spectrochim. Acta A. – 2022. – Vol. 281. – P. 1216
2. Alexander A.I. Photonics and molecular design of dye-doped polymers for modern light-sensitive materials / A.I. Alexander. - DOI: 10.1351/pac200880071525 // Pure and Applied Chemistry. – 2008. – Vol. 80. – Iss. 7. – P. 1525

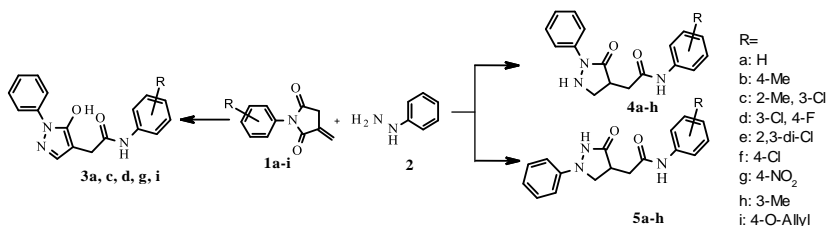
© Заводянский М.А., Щёлоков А.И., 2025

ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЦИКЛИЗАЦИЙ N-АРИЛИТАКОНИМИДОВ
ФЕНИЛГИДРАЗИНОМ В РАЗЛИЧНЫХ УСЛОВИЯХ

Зотова И.С., Ковыгин Ю.А., Шихалиев Х.С.

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

N-Арилитаконимид **1** при взаимодействии с различными бинуклеофилами способен рециклизоваться, что позволяет использовать его в качестве предшественника замещённых гетероциклических систем. Нами исследовано взаимодействие N-арилитаконимидов с фенилгидразином в различных условиях. Установлено, что продуктами взаимодействия являются производные пиразола **3**, **4**, **5**. Структура полученных соединений установлена с помощью ^1H , ^{13}C ЯМР – спектроскопии, NOESY-спектроскопии, ВЭЖХ-МС.



При проведении реакции N-арилитаконимидов с фенилгидразином в уксусной кислоте при комнатной температуре основными продуктами являются 2-(5-гидрокси-1-фенил-пиразол-4-ил)-N-арилацетамиды **3a, c, d, g, i**.

Однако взаимодействие N-арилитаконимидов с фенилгидразином в отсутствие кислотного катализа протекает без ароматизации и приводит к образованию пары региоизомерных продуктов: 2-(5-оксо-1-фенилпиразолидин-4-ил)-N-арилацетанилидов **3a-h** и 2-(3-оксо-1-фенилпиразолидин-4-ил)-N-арилацетанилидов **4a-h**, разделяемых с помощью флэш-хроматографии. Нами была предпринята попытка поиска условий селективного проведения процесса. Для этого реакционные массы в различных растворителях были исследованы методом ВЭЖХ-МС. Установлено, что в слабополярных апротонных растворителях конверсия реагентов незначительна. В то же время при кипячении N-арилитаконимидов с фенилгидразином в спиртовой среде мы наблюдаем почти полную конверсию исходных соединений в продукты реакции. Наиболее удобным растворителем для проведения синтеза является метанол. Увеличение селективности при варьировании растворителей и температурного режима не достигается. Соотношение изомеров **3c** и **4c** во всех исследуемых растворителях близко к 2:1.

© Зотова И.С., Ковыгин Ю.А., Шихалиев Х.С., 2025

ФОСФОЛАКТОНОВАЯ АКТИВАЦИЯ КАРБОНОВОЙ ФУНКЦИИ В МОЛЕКУЛЕ ПСЕВДОДИПЕПТИДА

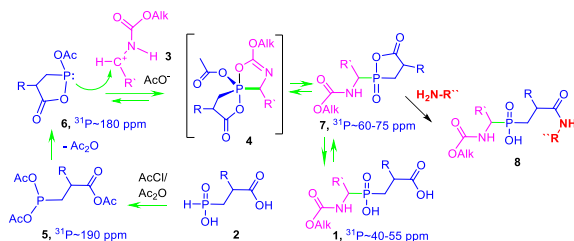
Иванов Д.Е., Дмитриев М.Э., Рагулин В.В.

ИФАВ РАН ФИЦ проблем химической физики и медицинской химии РАН,
Черноголовка Московской обл., Россия

Фосфиновые пептиды **1**, содержащие Zn-хелатирующий негидролизуемый метилен-фосфорильный фрагмент, который связывает две аминокислотные компоненты дипептида, являются ингибиторами Zn-металлопротеиназ, вовлеченных в разнообразные биологические процессы [1]. Изучение механизма образования фосфор-углеродной связи в процессе амидоалкилирования фосфонистых карбоновых кислот **2** (схема), содержащих структурный изостер соответствующей аминокислоты и с использованием альдегидов и карбаматов, образующих иминиевый катион **3**, позволило предположить образование нестабильных спирофосфоранов **4** и объяснить значительную реакционную способность карбоновых кислот **2** в сравнении с их эфирами [1,2].

Фосфолактоновый структурный мотив сохраняется в течении всех превращений начиная от фосфолактона P^{III} (с 3-координированным атомом фосфора) **6** к образованию фосфолактона P^V (спирофосфорана) **4**. Фосфолактон с 4-координированным фосфором **7** является последним интермедиатом этой реакции, который представляет собой смешанный фосфо-карбоновый ангидрид с активированной карбоновой функцией (схема).

Данная работа посвящена изучению реакционной способности генерируемого *in situ* фосфинового лактона **7** и возможности развития метода последующего образования классической пептидной связи.



Результаты исследования подтверждают электрофильную реакционную способность фосфинового лактона **7** по отношению к алкиламинам и эфирам аминокислот. Получены фосфоизостеры **8** трипептидного характера.

Литература

1. M.Dmitriev, S.Golovash, A.Borodachev, V.Ragulin, *J. Org. Chem.* **2021**. 86, 593-600.

УДК 661.183.123.6

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ
ГУМИНОВЫХ КИСЛОТ ТРОСТНИКОВОГО ТОРФА,
ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ДРОБНОГО ОСАЖДЕНИЯ**
Каледин Ю.В., Герцен М.М., Александров Н.С., Михайлова С.В.,
Переломов Л.В.

*Тульский государственный педагогический университет
им. Л.Н. Толстого, Тула, Россия*

Гуминовые кислоты (ГК) – сложные органические соединения, оказывающие положительное влияние на физико-химические свойства почвы, рост растений и агрономические показатели. Основные источники ГК – бурый уголь, почвы, торф и продукты разложения органического вещества [1]. В сельскохозяйственной практике широко применяются препараты, содержащие гуминовые кислоты, что способствует повышению устойчивости сельскохозяйственного производства [2].

Гуминовые кислоты выделяли по стандартной методике ГОСТ – методом водно-щелочной экстракции [3]. Выход гуминовых кислот рассчитывали на общую массу навески. Выход ГК составил $14,1 \pm 1$ %. Фракционирование гуминовых кислот после предварительной очистки проводили согласно методике [3]. В результате фракционирования получено 3 фракции гуминовых кислот (ТНТ). Результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1

Фракционирование гуминовых кислот сульфатом натрия

рН	№ фракции	Выход
1	I	13,5
2	II	12,8
3	III	12,1

Элементный состав (содержание основных элементов: С, Н, О, N) гуминовых кислот (таблица 2) определяли на CHN-анализаторе Sundy SDCHN636 («Hunan Sundy Science and Technology Co», Чанша, КНР).

Таблица 2

Элементный состав гуминовых кислот и фракций, % (масс)

Гуминовые кислоты	С [%]	N [%]	Н [%]	О [%]
<i>Тростниковый низинный торф</i>				
ГК	51,18	2,41	4,08	42,33

Фракция I	57,71	4,43	5,01	32,85
Фракция II	57,60	5,66	4,18	32,56
Фракция III	56,15	5,40	4,13	34,32

Наиболее информативное представление о строении молекул дают атомные соотношения (таблица 3), показывающие степень ароматичности, развитость периферической части гуминовых веществ и содержание гетероциклического азота.

Таблица 3

Атомные отношения гуминовых кислот и фракций

Гуминовые вещества	H/C	O/C	N/C
<i>Тростниковый низинный торф</i>			
ГК	0,96	0,62	0,04
Фракция I	1,04	0,43	0,07
Фракция II	0,87	0,42	0,08
Фракция III	0,88	0,46	0,08

Содержание углерода в гуминовых кислотах, выделенных фракционированием, в 1,13 раз больше, чем для гуминовых кислот ТНТ, что подтверждает низкую степень разложения сфагнового переходного торфа и меньшую степень ароматичности гуминовых кислот. Высокое содержание азота в гуминовых кислотах, выделенных фракционированием, свидетельствует о значительном содержании amino-амидных групп и гетероциклического азота. Соотношение азота к углероду характеризует содержание азота в образцах. Для всех образцов значения N/C сопоставимы (таблица 3). Важным показателем для характеристик сложных объектов является атомное, характеризующее степень ароматичности [4]. Отношение H/C в ГК фракции I выше, чем в остальных гуминовых кислотах, поэтому они имеют меньшую степень ароматичности.

Статья подготовлена в рамках гранта автономной некоммерческой организации "Научно-образовательный центр мирового уровня" ТулаТЕХ" на основании Соглашения о целевом финансировании, направленном на создание и развитие студенческих конструкторских бюро на базе образовательных организаций высшего образования - участников научно-образовательного центра мирового уровня "ТулаТЕХ" N 8 от 28.11.2023г.

Литература

1. Орлов Д.С. Химия почв: учебное пособие. – МГУ, 1985.
2. Попов А.И. Гуминовые вещества: свойства, строение, образование. – 2004
3. Молекулярно-массовое распределение гуминовых веществ и гиматомелановых кислот торфов различного генезиса Тульской области / Дмитриева Е.Д., Леонтьева М.М., Сюндюкова К.В. // Химия растительного сырья. – 2017. – № 4. – С. 187-194

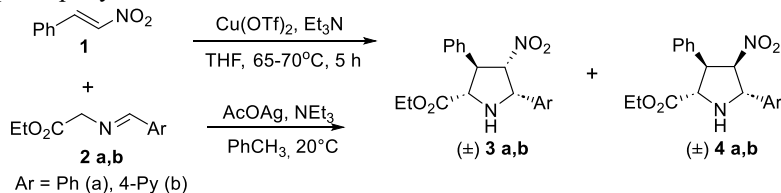
УДК 547.747

О РЕАКЦИЯХ 1,3-ДИПОЛЯРНОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ АРИЛАЛЬДИМИНОВ ЭТИЛОВОГО ЭФИРА ГЛИЦИНА К НИТРОСТИРОЛУ

Алмазова А.В., Калязин В.А., Кострюков С.Г.

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

Нитроалкены интересны в качестве субстратов 1,3-диполярного циклоприсоединения. Синтез тетразамещенных пирролидинов представляет интересной задачей в связи с тем, что пирролидины являются структурными аналогами природной аминокислоты пролина и встречаются в виде структурных компонентов в составе природных соединений или синтетических фармпрепаратов. В данной работе проведено исследование регио- и стереоселективности реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения ариальдиминов этилового эфира глицина к нитростиролу.



Взаимодействие нитростирола 1 с эквимольным количеством ариальдиминов 2a,b проводилось в двух вариантах: в толуоле в инертной атмосфере аргона, без доступа света, при добавлении ацетата серебра и полуторакратного избытка триэтиламина (см. [1]) и в запаянной ампуле в растворе ТГФ при добавлении трифлата меди (II) и двухкратного избытка триэтиламина при нагревании (см. [2]). В качестве продуктов получили тетразамещенные пирролидины 3 a,b и 4 a,b, которые были выделены в индивидуальном состоянии с помощью флеш-хроматографии (элюент – легкий петролейный эфир–МТБЭ) и охарактеризованы методами ИК, ЯМР ¹H и ¹³C спектроскопии. Строение изомеров устанавливали методами корреляционной ЯМР-спектроскопии.

Литература

1. Кострюков С.Г., Калязин В.А., Петров П.С., Безрукова Е.В. О взаимодействии арилальдиминов этилового эфира глицина с галогензамещенными арилиденацетонами // Журнал общей химии. – 2023. – Т. 93, № 6. – С. 823-834.
2. Motornov V., Tabolin A., Nelyubina Y., Nenajdenko V., Ioffe S. (2021). Copper-catalyzed [3+2]-cycloaddition of α -halonitroalkenes with azomethine ylides: facile synthesis of multisubstituted pyrrolidines and pyrroles // Organic & Biomolecular Chemistry. – 2021. – Vol. 19. – P. 3413-3427.

© Алмазова А.В., Калязин В.А., Кострюков С.Г., 2025

УДК 547.792.9

ФОРМИЛИРОВАНИЕ 2-АЛКИЛ-4,5-ДИМЕТИЛ- [1,2,4]ТРИАЗОЛО[1,5-*a*]ПИРИМИДИН-7(4*H*)-ОНОВ

Карелина К.О., Потапов А.Ю.

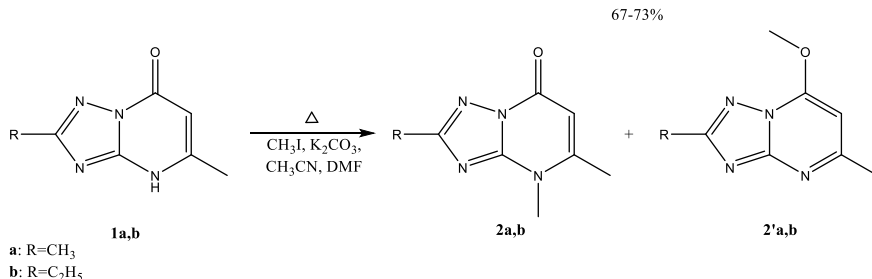
Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

[1,2,4]Триазоло[1,5-*a*]пиримидины представляют собой важный класс гетероциклических соединений, обладающих широким спектром биологической активности [1-3]. Помимо медицинской и фармацевтической химии, производные [1,2,4]триазоло[1,5-*a*]пиримидина находят применение в агрохимии [2] и активно изучаются в качестве антикоррозионных агентов [4-6]. Целью настоящей работы являлась разработка способа формилирования 2-алкил-4,5-диметил-[1,2,4]триазоло[1,5-*a*]пиримидин-7(4*H*)-онов на основе реакции Вильсмайера-Хаака.

Алкилирование 2-алкил-5-метил-[1,2,4]триазоло[1,5-*a*]пиримидин-7(4*H*)-онов **1a,b** проводили йодистым метилом в присутствии поташа (схема 1). Взаимодействие проводил в системе ацетонитрил-диметилформамид в соотношении 10:1. Введение диметилформамида является необходимым условием для полного растворения исходных [1,2,4]триазоло[1,5-*a*]пиримидин-7(4*H*)-онов **1a,b**.

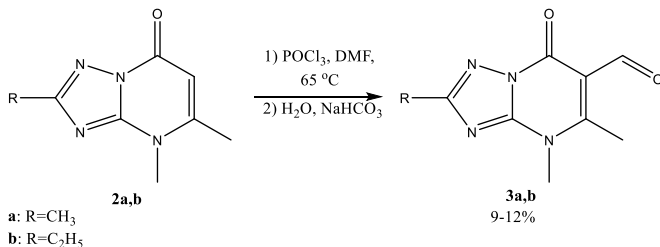
По данным ВЭЖХ-МС и ЯМР ^1H -спектроскопии установлено, что в результате алкилирования йодистым метилом 2-алкил-5-метил-[1,2,4]триазоло[1,5-*a*]пиримидин-7(4*H*)-онов **1a,b** были получены смеси 2-алкил-4,5-диметил-[1,2,4]триазоло[1,5-*a*]пиримидин-7(4*H*)-онов **2a,b** и 2-алкил-5-метил-7-метокси-[1,2,4]триазоло[1,5-*a*]пиримидинов **2'a,b**. Общие выходы полученных смесей составили 67-73%. Соотношение продуктов N- и O-алкилирования **2a,b** и **2'a,b** составило 1:4. Разделить полученные смеси не удалось.

Схема 1



Несмотря на то, что индивидуализировать **2a,b** и **2'a,b** не удалось, была проведена дальнейшая обработка смеси продуктов N- и O-алкилирования избытком хлорокиси фосфора в среде диметилформамида по методу Вильсмайера-Хаака. Установлено, что в результате этого взаимодействия образуются многокомпонентные смеси, из которых удалось выделить 2-алкил-4,5-диметил-7-оксо-4,7-дигидро-[1,2,4]триазоло[1,5-*a*]пиримидин-6-карбальдегиды **3a,b** (схема 2). Выходы целевых альдегидов **3a,b** составили 9-12%.

Схема 2



Состав и строение полученных соединений доказаны методами ВЭЖХ-МС и ЯМР ¹H-спектроскопии.

Литература

1. 1,2,4-Triazolo[1,5-*a*]pyrimidines in drug design / K. Oukoloff, B. Lucero, K.R. Francisco [et. al] // European Journal of Medicinal Chemistry. – 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 // Organic Preparations and Procedures International. – 2021. – Vol. 53, № 3. – P. 211-239.
3. Biological activities of [1,2,4]triazolo[1,5-*a*]pyrimidines and analogs / S. Pinheiro, E.M.C. Pinheiro, E.M.F. Muri [et. al] // Medicinal Chemistry Research. – 2020. – Vol. 29. – P. 1751-1776.
4. New copper corrosion inhibitors in chloride environments based on [1,2,4]triazolo[1,5-*a*]pyrimidine-6-carboxylates / A.A. Kruzhilin, V.A. Polikarchyuk, O.A. Kozaderov [et. al] // International Journal of Corrosion and Scale Inhibition. – 2021. – Vol. 10, № 2. – P. 732-748.

5. Novel inhibitory compositions based on 4,5,6,7-tetrahydro- [1,2,4]triazolo [1,5-*a*]pyrimidin-7-ol derivatives for steel acid corrosion protection / A.A. Kruzhilin, D.S. Shevtsov, A.Yu. Potapov [et. al]// International Journal of Corrosion and Scale Inhibition. – 2022. – Vol. 11, № 2. – P. 774-795.

6. New [1,2,4]triazolo[1,5-*a*]pyrimidine-7-one corrosion inhibitors for copper in chloride environments / A.A. Kruzhilin, D.V. Lyapun, D.S. Shevtsov [et. al] // International Journal of Corrosion and Scale Inhibition – 2021. – Vol. 10, № 4. – P. 1474-1492.

© Карелина К.О., Потапов А.Ю., 2025

УДК 547.834.22

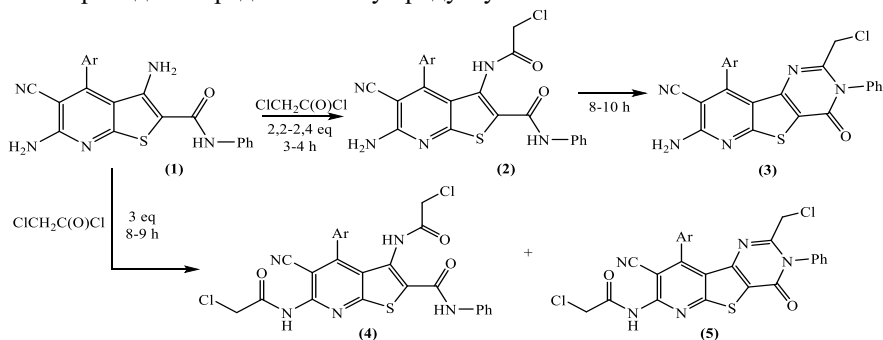
РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ АМИНОГРУПП

ТИЕНО[2,3-*b*]ПИРИДИНОВ В РЕАКЦИЯХ С ХЛОРАЦЕТИЛХЛОРИДОМ

Корсунов А.В., Лукина Д.Ю., Беспалов А.В., Киндоп В.К., Доценком В.В.

Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия

Благодаря широкому спектру биологической активности тиено[2,3-*b*]пиридины представляют постоянный интерес [1,2]. Для расширения ряда таких соединений мы изучили реакцию 3,6-диаминотиено[2,3-*b*]пиридин-5-карбонитрилов **1** с хлорацетилхлоридом. Анализ индексов Фукуи показал, что в соединениях **1** наиболее реакционноспособным является аминогруппа при атоме С(3). Поэтому ожидалось, что реакция с $\text{ClCH}_2\text{C}(\text{O})\text{Cl}$ будет протекать преимущественно по $\text{C}(3)\text{NH}_2$. Действительно, реакция с 2,2-2,4 экв. $\text{ClCH}_2\text{C}(\text{O})\text{Cl}$ в течение 3-4 ч приводит к предсказанному продукту **2**.



Дальнейшее нагревание смеси в течение 8-10 ч приводит к внутримолекулярной циклизации и образованию продукта **3**. Также установлено, что при использовании 3 экв. $\text{ClCH}_2\text{C}(\text{O})\text{Cl}$ и кипячении в течение 9 ч возможно протекание реакции и по аминогруппе $\text{C}(6)\text{NH}_2$, что доказано спектральными данными (ИК, ЯМР ^1H , ^{13}C). При этом образуется смесь 4-х продуктов ацилирования **2-5** в примерно равном соотношении.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Кубанского научного фонда в рамках научного проекта МПИ-24.1/12 «альфа-Роданоацетамиды: синтез, свойства и биологическая активность».

Литература

1. Литвинов В.П., Доценко В.В., Кривоколыско С.Г. // Изв. АН. Сер. Хим. – 2005. – № 4. – С. 848.
2. Доценко В.В., Бурый Д.С., Лукина Д.Ю., Кривоколыско С.Г. // Изв. АН. Сер. Хим. – 2020. – № 10. – С. 1829.

© Корсунов А.В., Лукина Д.Ю., Беспалов А.В., Киндоп В.К.,
Доценком В.В., 2025

УДК 547.814.5

ТРЕХКОМПОНЕНТНЫЙ СИНТЕЗ СПИРОПИРРОЛИЗИДИНОВ

Сорокин В.В.¹, Кочуков А.С.¹, Давыдов Н.И.¹,

Борисова С.В.², Семченко О.Н.²

Саратовский государственный университет, Саратов, Россия¹

Саратовский государственный медицинский университет

им. В.И. Разумовского, Саратов, Россия²

Реакции 1,3-диполярного циклоприсоединения представляют интерес в современном органическом синтезе. Развитие синтетического потенциала данных процессов является важным, так как они обладают высокой региоселективностью и стереоселективностью, благодаря чему становятся незаменимыми для получения сложных молекул с точной структурой.

Соединения ряда спиропирролизидинов, обладают потенциальной биологической активностью, их исследование приобретает большое значение. Для получения указанных соединений выбраны бензилиденмалононитрилы, как потенциально активные диполярофилы в трехкомпонентном варианте циклоприсоединения, что представлено на рисунке 1.

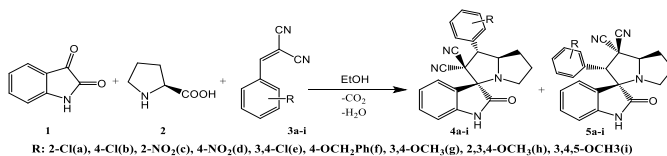


Рис. 1

Разработаны условия региоселективного синтеза изомеров **4a-i** и **5a-i**. Исследована антимикробная активность полученных соединений, получены патенты [1-3].

Литература

1. Пат. 2836731 Российская Федерация. 1'-(3,4-дихлорфенил)-2-оксо-5',6',7',7a'-тетрагидроspиро[индолин-3,3'-пирролизин]-2',2'(1H)-дикарбонитрил, обладающий антимикробными свойствами / С.В. Борисова, В.В. Сорокин, Е.А. Константинова,

А.А. Мещерякова, Г.Л. Бурыгин. – Заявка № 2024120868 от 24.07.2024; опубл. 20.03.2025, Бюл. № 8.

2. Пат. 2834263 Российская Федерация. 1'-(2,3,4-триметоксифенил)-2-оксо-5',6',7',7a'-тетрагидроспиро[индолин-3,3'-пирролизин]-2',2'(1'Н)-дикарбонитрил, обладающий антимикробными свойствами / С.В. Борисова, Е.А. Константинова, А.А. Мещерякова, Г.Л. Бурыгин, В.В. Сорокин. – Заявка № 2024120870 от 24.07.2024; опубл. 04.02.2025, Бюл. № 4.

3. Пат. 2835552 Российская Федерация. 2-оксо-2'-фенил-5',6',7',7a'-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.

© Сорокин В.В., Кочуков А.С., Давыдов Н.И., Борисова С.В., Семченко О.Н., 2025

УДК 547.917, 547.812.5

СИНТЕЗ α -ПИРОНОВ НА ОСНОВЕ ДИГИДРОЛЕОВОГЛЮКОЗЕНОНА

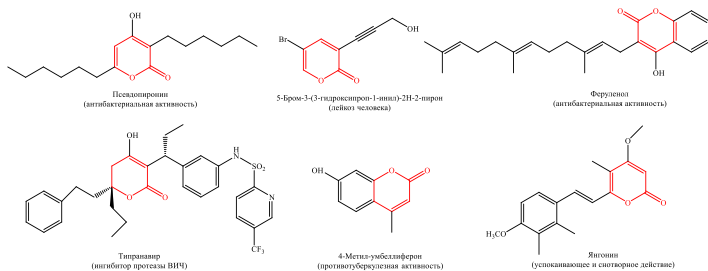
Кравец В.И.², Халилова Ю.А.¹, Дехтярь Т.Ф.², Файзуллина Л.Х.¹

¹Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

²СФ Уфимский университет науки и технологий, Стерлитамак, Россия

α -Пироны - это уникальный класс соединений, отличающийся большим разнообразием биологических активностей. Удивительно, что даже небольшое изменение в структуре α -пиронов может привести к появлению новых свойств (Рисунок 1). Многие представители данного класса соединений изучаются как потенциальные лекарственные препараты. Эти вещества проявили широкий спектр биологической активности, включая противовоспалительную, антиоксидантную и противоопухолевую. Поэтому разработка методов синтеза, которые позволяют получать замещённые α -пироны является важным направлением в органической химии.

Рисунок 1

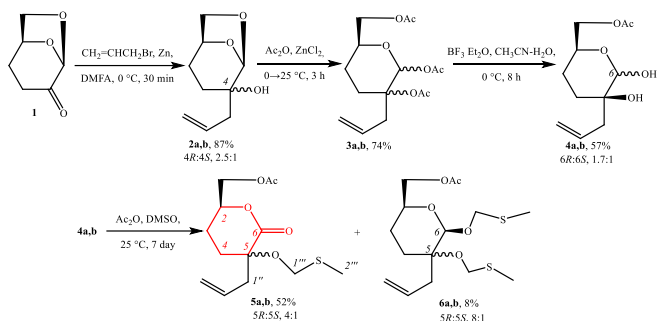


В живых организмах α -пирон образуется из глюкозы в результате ферментативных процессов. В литературе известны синтезы α -пиронов с

использованием реакции Соногаширы [1], MCR реакции [2], окислительной циклизации в присутствии палладиевого катализатора между акриловой кислотой и алкинами [3], аннелирование альдегидов с этилалленоатом [4], 6-Замещенные гидроксильалкил-пироны синтезируют из фурфуролового спирта – возобновляемого сырья, выделяемого из недорогих сельскохозяйственных отходов, таких как жмых и отруби [5].

Мы осуществили синтез α -пиронов на основе дигидролевоглюкозенона **1**, получение которого относится к «зеленой» химии, что является актуальным в настоящее время. Дигидролевоглюкозенон **1** алкилировали бромистым аллилом в присутствии Zn. В результате реакции получили диастереомерные аддукты **2a,b** с выходом 87% (Схема 1). Для трансформации продукта 1,2-присоединения **2a,b** в α -пирон 1,6-ангидромостик в эпимерах **2a,b** раскрыли в уксусном ангидриде действием ZnCl_2 , селективный гидролиз ацетатов **3a,b** осуществили в ацетонитриле в присутствии $\text{BF}_3 \cdot \text{Et}_2\text{O}$ (Схема 1).

Схема 1



Окисление лактолов **4a,b** действием $\text{DMSO-Ac}_2\text{O}$ привело к превращению ацетальных центров в лактонные фрагменты с одновременной этерификацией третичных гидроксильных групп в метилтиометилловые эфиры **5a,b**. Из реакционной массы с незначительным выходом были выделены также и диастереомерные эфиры **6a,b** (Схема 1).

Таким образом, в результате взаимодействия цирена и бромистого аллила в присутствии Zn получены аддукты 1,2-присоединения, из которых осуществлены синтезы α -пиронов **5a,b** и метилтиометилловых эфиров **6a,b**, которые являются перспективными соединениями для изучения взаимосвязи структура-активность.

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

Литература

1. Yao T., Larock, R.C. Synthesis of isocoumarins and alpha-pyrones via electrophilic cyclization // J. Org. Chem. – 2003. – V. 68. – P. 5936-5942.
2. M. Grigalunas, O. Wiest, P. Helquist, Single-Flask Multicomponent Synthesis of Highly Substituted α -Pyrones via a Sequential Enolate Arylation and Alkenylation Strategy // Org. Lett. 2016, 18, 5724-5727.
3. Yu Y., Huang L., Wu W., Jiang H. Palladium-catalyzed oxidative annulation of acrylic acid and amide with alkynes: A practical route to synthesize α -pyrones and pyridines // Org. Lett. – 2014. – V. 16. – P. 2146-2149.
4. Zhu X.-F., Schaffner A.-P., Li R.C., Kwon O. Phosphine-catalyzed synthesis of 6-substituted 2-pyrones: Manifestation of *E/Z*-isomerism in the zwitterionic intermediate // Org. Lett. – 2005. V. 7. P. 2977-2980. Liebeskind, L.S.; Wang, J. 1993, 49, 5461-5470.
5. Dobler D., Reiser O. Synthesis of 6-Substituted 2-Pyrones Starting from Renewable Resources: Total Synthesis of Sibirinone, (E)-6-(Pent-1-en-1-yl)-2H-pyran-2-one, and (E)-6-(Hept-1-en-1-yl)-2H-pyran-2-one // J. Org. Chem. – 2016. V. 81. 10357-10365.

© Кравец В.И., Халилова Ю.А., Дехтярь Т.Ф., Файзуллина Л.Х., 2025

УДК 547.814.5

РЕАКТИВ ЛАВЕССОНА В МОДИФИКАЦИИ ГИБРИДНЫХ СИСТЕМ: ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ

С ДИМЕДОНИЛАРИЛМЕТИЛ-2Н-ХРОМЕН-2-ОНАМИ

Куренкова Д.Х., Рыжов А.С., Мажукина А.О.

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

Природные и синтетические производные 2Н-хромен-2-она признаны важными активными соединениями, оказывающими положительное влияние на здоровье человека антикоагулянтным, вазопротекторным, антиоксидантным, противовоспалительным и противомикробным действием. В последние годы значительное количество производных кумарина исследовалось в качестве потенциальных средств для лечения рака [1].

В представленной работе для взаимодействия с реагентом Лавессона с целью модификации были выбраны 4-гидрокси-3-((2-гидрокси-4,4-диметил-6-оксоциклогекс-1-ен-1-ил)арилметил)-2Н-хромен-2-оны и 3-(3,3-диметил-1-тиоксо-2,3,4,9-тетрагидро-1Н-ксантен-9-ил)-4-гидрокси-2Н-хромен-2-он. Субстрат (1а-с, 2) и реактив Лавессона перемешивали на магнитной мешалке при нагревании в течение 3-9 часов, в качестве растворителя использовался толуол. Сокращение времени проведения реакции добились путем one-pot синтеза в реакторе герметичных сосудов Monowave 50. Реакция проходила в течение 15-20 минут при тех же условиях.

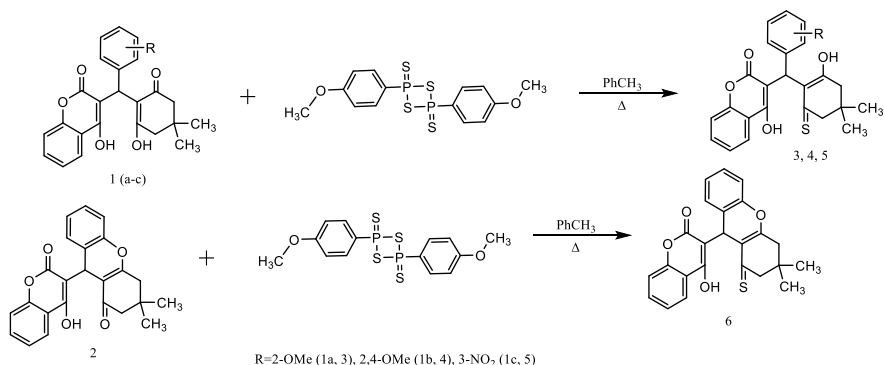


Схема 1. Модификация 4-гидрокси-3-((2-гидрокси-4,4-диметил-6-оксоциклогекс-1-ен-1-ил)арилметил)-2Н-хромен-2-онов и 3-(3,3-диметил-1-тиоксо-2,3,4,9-тетрагидро-1Н-ксантен-9-ил)-4-гидрокси-2Н-хромен-2-она.

Известно, что для систем на основе 2Н-хромен-2-она, характерна кето-енольная таутомерия, где равновесие смещается в ту или иную сторону за счет характера заместителя в ароматическом кольце и полярности растворителя [2]. Оксогруппа димедонильного фрагмента субстрата так же имеет способность к енолизации. Таким образом, тионирование субстрата при взаимодействии его с реактивом Лавессона происходит по не енолизованной карбонильной группе. Данный факт подтверждается наличием НМВС спектров корреляцией метиленового протона с атомом углерода C=S группы при 2.16/208 м.д. и смещением сигналов метинового и метиловых протонов в более слабое поле по сравнению с таковыми в исходных соединениях.

Литература

1. Ramdani, L.H., Talhi, Q., Decombat, C., etc. (2019). Synthesis and Antimicrobial Activity of Some Aldehyde Derivatives of 3-Acetylchromen-2-one. E-Journal of Chemistry, Vol. 7, P. 400-404.
2. Kurenkova, D. C., Arzhamova, E. M., Mazhukina, O. A., & Yegorova, A. Y. (2024). Synthesis of New O- and S-Containing Polyheteroatomic Systems Based on 3-Substituted Pyran-2-Ones with Lawesson's Reagent. Chemistry Proceedings, 16(1), 18.

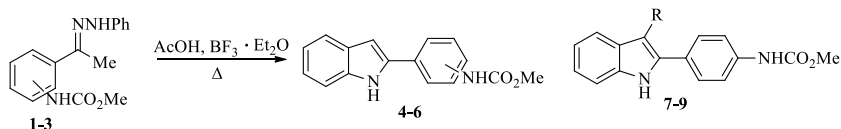
© Куренкова Д.Х., Рыжов А.С., Мажукина А.О., 2025

СИНТЕЗ НОВЫХ 2-(4-МЕТОКСИКАРБОНИЛАМИНОФЕНИЛ)ИНДОЛОВ И ИХ ХИМИЧЕСКАЯ МОДИФИКАЦИЯ

Кутлалиева Э.Н., Великородов А.В.

*Астраханский государственный университет им. В.Н. Татищева,
Астрахань, Россия*

Ранее в нашей лаборатории были получены индолы с карбаматной функцией реакцией индольной циклизации аддуктов присоединения по Михаэлю β-дикарбонильных соединений к N,N'-диметоксикарбонил-1,4-бензохинондиимину [1], а также по реакции Неницеску [2]. В развитие этих исследований нами изучена возможность синтеза 2-(4-метоксикарбониламинофенил)индолов (**4-6**) по реакции Фишера с использованием фенилгидразонов ацетофенонов с карбаматной функцией (**1-3**). Установлено, что нагревание соединений **1-3** в ледяной АсОН в присутствии эфирата трехфтористого бора приводит к получению соответствующих индолов **4-6** с выходами 84-86%. Найдено, что нитрозирование индола **6** при помощи NaNO₂ – АсОН приводит к получению 3-нитрозопроизводного **7** (выход 87%), а его восстановление дитионитом натрия в среде диоксан – вода приводит к образованию соответствующего аминопроизводного **8** (выход 60%). Ацилированием соединения **8** метилхлорформиатом в метиленхлориде в присутствии Et₃N получен индол **9** с выходом 72%.



2-NHCO₂Me (**1,4**), 3-NHCO₂Me (**2,5**), 4-NHCO₂Me (**3,6**); R=NO (**7**), NH₂ (**8**), NHCO₂Me (**9**).

Строение полученных соединений **1-9** установлено методами ИК и ЯМР ¹H спектроскопии, а состав данными элементного анализа.

Литература

- Velikorodov A.V. Synthesis of carbamate indole derivatives / A.V. Velikorodov, V.B. Mochalin // J. Org. Chem. – 1998, – V. 34, № 10. – P. 1490-1493.
- Velikorodov A.V. Synthesis of new carbamate derivatives of indole and their modification / A.V. Velikorodov, A.K. Kuanchaliev, O.L. Titova // Russ. J. Org. Chem. – 2010. – V.46. - № 7. – P. 1060-1065.

© Кутлалиева Э.Н., Великородов А.В., 2025.

СИНТЕЗ (3a*S*,4a*S*,6a*R*)-2-ОКСО-3,3a,4,6a-ТЕТРАГИДРО-2*H*-ЦИКЛОПЕНТА[*b*]ФУРАН-4-ИЛ АЦЕТАТА - КЛЮЧЕВОГО СИНТОНА В ПОДХОДАХ К (-)-ГАЛИЕЛЛАЛАКТОНУ

Гимазетдинов А.М., Загитов В.В., Макаев З.Р.

Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Структура (-)-галиеллалактона (-)-**1** – природного метаболита грибов *Galiella rufa* представляет значительный интерес (рис. 1) [1], поскольку она обладает несколькими видами биологической активности, такими как противоопухолевое [2-5], противовоспалительное (аллергическая астма [6] и атеросклероз [7]).

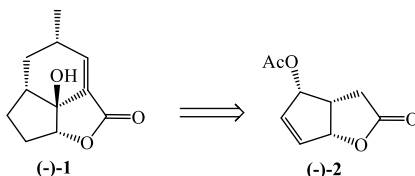


Рис. 1.

Описан синтез бициклического алилового ацетата (-)-**2** – перспективного предшественника (-)-галиеллалактона **1**. Подход основан на разделении диастереомерных карбоксамидов (**4+5**), полученных амидированием рацемического гем-дихлорзамещенного лактона Грико **3** с помощью (+)- α -метилбензиламина. Последующие стадии превращений индивидуального диастереомера включают реакции исчерпывающего восстановительного дехлорирования, построения алильного спиртового фрагмента в кольцевой части путем стерео- и региоспецифичной реакции бромгидроксилирования действием NBS в водном THF и дегидробромирования.

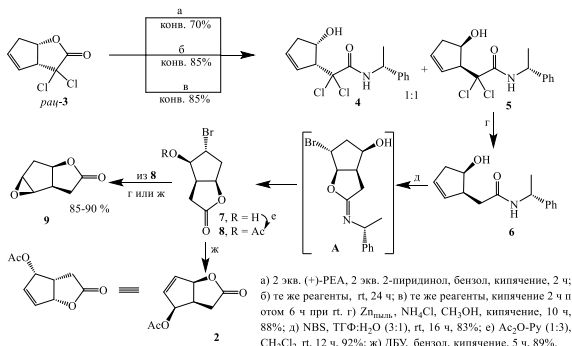


Рис. 2.

Исследование выполнено за счет гранта Российской научного фонда № 24-23-00110, <https://rscf.ru/en/project/24-23-00110/>.

Литература

1. Hautzel R., Anke H. *Naturforsch.* 1990, *45*, 1093–1098.
2. Canesin G., Maggio V., Palominos M., Stiehm A., Contreras H.R., Castellón E.A., Morote J., Paciucci R., Maitland N.J., Bjartell A., Hellsten R. *Sci. Rep.* 2020, *10*, 1-12.
3. Hellsten R., Johansson M., Dahlman A., Sterner O., Bjartell A. *PLoS ONE*. 2011, *6*, e22118.
4. Rudolph K., Serwe A., Erkel G. *Cytokine*. 2013, *61*, 285-296.
5. Zhang Q., Feng Y., Kennedy D. *Cell. Mol. Life Sci.* 2017, *74*, 777-801.
6. Hausding M., Tepe M., Übel C., Lehr H.A., Röhrig B., Höhn Y., Pautz A., Eigenbrod T., Anke T., Kleinert H., Erkel G., Finotto S. *Int. Immunol.* 2011, *23*, 1-15.
7. Bollmann F., Jäckel S., Schmidtke L., Schrick K., Reinhardt C., Jurk K., Wu Z., Xia N., Li H., Erkel G., Walter U., Kleinert H., Pautz A. *PLoS ONE*. 2015, *10*, e0130401.

© Гимазетдинов А.М., Загитов В.В., Макаев З.Р., 2025

УДК 54.547.853.3

НОВЫЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ПИРИДО[3',2':4,5]ТИЕНО[3,2-d]ПИРИМИДИНА: РЕАКЦИИ С НУКЛЕОФИЛАМИ

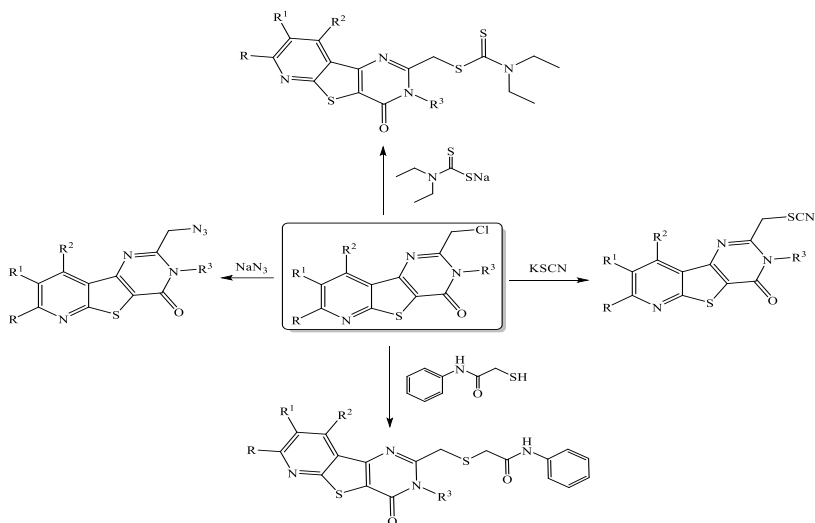
Маркелевич Д.Ю., Доценко В.В.

Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия

Пиридо[3',2':4,5]тиено[3,2-d]пиримидины являются функциональными производными тиено[2,3-b]пиридинов, а также обладают широким спектром различных видов биологической активности, в связи с чем исследование реакционной способности данного класса соединений является актуальной задачей.

Нами был синтезирован ряд пиридо[3',2':4,5]тиено[3,2-d]пиримидинов по известной методике [1].

Полученные соединения были введены во взаимодействие с широким кругом нуклеофильных реагентов в соответствии со схемой.



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 547.772.

СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ АНТИМИКРОБНОЙ АКТИВНОСТИ 5-АМИНО-3-АРИЛ-1-(АРИЛ/АРОИЛ)-1Н-ПИРАЗОЛОВ

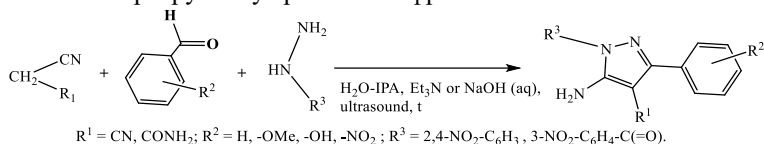
Мещерякова А.А., Плотников Н.А., Болквадзе К.Р., Айена К.-Д.,
Возягин Д.П., Сорокин В.В.

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

Производные пиразола нашли применение как разнообразные лекарственными препараты и пестициды. Изучение простых и экологичных методов синтеза и антимикробных свойств замещённых amino-1H-пиразолов, с фармакоформными заместителями, является актуальной задачей [1, 2].

5-Амино-3-арил-1-(арил/ароил)-1H-пиразолы нами получены путем ультразвукового воздействия на смесь метиленактивной компоненты (малонитрил, амид циануксусной кислоты), бензальдегидов, ароматических гидразинов или нитробензгидразидов в смеси воды и

изопропилового спирта в присутствии основного катализатора. Целевые продукты, различались заместителями в ароматическом кольце и положением нитрогруппы у ароматического фрагмента.



Изучены антимикробные свойства некоторых синтезированных по отношению к грамотрицательным (*Pseudomonas aeruginosa*, *Escherichia coli*) и грамположительным штаммам бактерий (*Staphylococcus aureus*). Наибольший ингибирующий эффект имели представители с нитроареновыми заместителями [4-5].

Полученные результаты позволяют прогнозировать перспективность продолжения подобных работ.

Литература

1. Sorokin V.V., Kriven'ko A.P., Vinogradova N.A., Plotnikov O.P., Pharm. Chem. J. – 2001, – Т. 35. – № 9. – С. 488-490.
2. Nguyen H.T., Truong, M.N.H., Le, T.V., Vo, N.T., Nguyen, H.D., Tran, P.H. ACS omega. 2022, – Т. 7. – № 20. – С. 17432-17443.
3. Meshcheryakova A.A., Konstantinova E.A., Borisova S.V., Burygin G.L., Sorokin V.V.. Pharm. Chem. J. – 2025, – Т. 59. – № 1. – С. 22-27.
4. Пат. 2835303 Российская Федерация. 5-амино-1-(2,4-динитрофенил)-3-(3-нитрофенил)-1Н-пиразол-4-карбоксамид, обладающий антимикробными свойствами. Константинова Е.А., Мещерякова А.А., Бuryгин Г.Л., Сорокин В.В. – Заявка № 2024120726 от 23.07.2024, опубл. 24.02.2025. Бюл. № 6.
5. Пат. 2834046. Российская Федерация. 5-амино-1-(2,4-динитрофенил)-3-(2-метоксифенил)-1Н-пиразол-4-карбонитрил, обладающий антимикробными свойствами. / Мещерякова А.А., Константинова Е.А., Бuryгин Г.Л., Сорокин В.В. – Заявка № 2024120598 от 22.07.2024, опубл. 03.02.2025, Бюл. № 4

© Мещерякова А.А., Плотников Н.А., Болквандзе К.Р., Айена К.-Д.,
Возягин Д.П., Сорокин В.В., 2025

УДК 547.94:834.2

ПРОИЗВОДНЫЕ ИНДОЛА С ТРИАЗОЛЬНЫМИ И ТЕТРАГИДРОПИРРОЛОПИРРОЛДИОНОВЫМИ ФРАГМЕНТАМИ

Мокрушина Д.А.², Сорокина В.А.¹, Лобов А.Н.¹, Цпышева И.П.¹

¹Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

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

Индольная гетероциклическая субъединица является важным фармакофорным фрагментом, входящим в состав многих биологически

активных соединений, в том числе, индольных алкалоидов [1, 2]. Так, алкалоид эсрин, содержащийся в семенах *Physostigma venenosum*, применяется для лечения болезни Альцгеймера, а винбластин и винкристин из *Catharanthus roseus* отлично зарекомендовали себя в качестве средств для лечения злокачественных новообразований [3]. С целью синтеза новых производных индола с потенциальной противоопухолевой активностью осуществлен периферийный дизайн стартовой индольной матрицы путем последовательного 1,3-диполярного циклоприсоединения азидов и азометинилидов [4, 5] (схема 1).

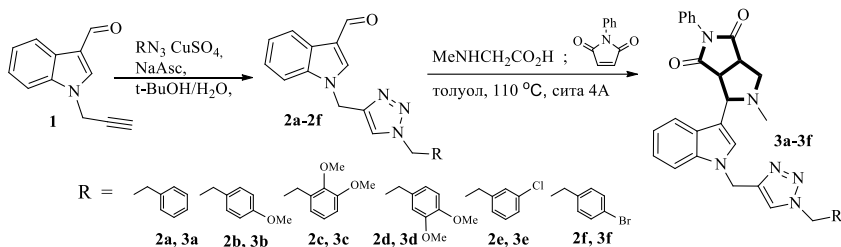


Схема 1

Стартовый *N*-пропаргил-индол-3-карбальдегид **1** сначала вовлекали в реакцию с органическими азидом в условиях, представленных на схеме 1, что привело к 1,2,3-триазолам **2a-2f** (выходы от 47 до 86%), которые далее вступали в мультикомпонентную реакцию с саркозином и *N*-фенилмалеинимидом в кипящем толуоле, приводя к соответствующим 5-метилтетрагидропирроло[3,4-с]пиррол-1,3(2H,3aH)-дионам **3a-3f** с выходами от 61 до 75%. Геометрия сочленения пирролидиновых циклов в производных **3a-3f** установлена на основании данных ЯМР спектроскопии ^1H , ^{13}C и ^{15}N .

Литература

1. Kaushik N.K., Attri P., Kumar N., Kim Ch.H., Verma A.K., Choi E.H. Biomedical Importance of Indoles // *Molecules*. – 2013. – Vol. 18. – P. 6620.
2. Sharma V., Pradeep K., Devender P. Biological importance of the indole nucleus in recent years: a comprehensive review // *J. Heterocycl. Chem.* – 2010. – Vol. 47. – P. 491.
3. Almagro L., Fernandez-Perez F., Pedreno M.A. Indole alkaloids from *Catharanthus roseus*: bioproduction and their effect on human health molecules // *Molecules*. – 2015. – Vol. 20. – P. 2973.
4. Cascio M. G., Lazzari P., Pertewee R., Testa A., Zanda M. Tricyclic fused Pyrazoles with a 'Click' 1,2,3-Triazole Substituted in Position 3 are Nanomolar CB1 Receptor Ligands // *Synthesis*. – 2015. – Vol. 47. – P. 817.
5. Медведева С.М., Шихалиев Х.С. Реакции (3+2)-циклоприсоединения в синтезе конденсированных по связи C(4)-N(5) тетрагидропирроло[3,4-с]пиррол-1,3-дионов // *Хим. Гетероцикл. Соед.* – 2016. – Vol. 52. – P. 687.

© Мокушина Д.А., Сорокина В.А., Лобов А.Н., Цыпышева И.П., 2025

ПРИМЕНЕНИЕ ТЕПЛОВЫХ НАСОСОВ В РЕКТИФИКАЦИИ СМЕСИ БЕНЗОЛ – ТОЛУОЛ – КСИЛОЛ

Морев Г.И., Рудаков Д.Г., Тимошенко А.В.

МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия

По ценности и значимости для химической промышленности ароматические углеводороды занимают второе место после олефинов. Одними из наиболее важных ароматических соединений являются бензол, толуол и ксилолы – БТК-фракция. Основным способом получения БТК являются процессы риформинга или пиролиза, где на стадии разделения продуктов возникает задача выделения и последующего разделения БТК-фракции. Для разделения БТК-фракции применяют ректификацию, которая характеризуется высокими удельными затратами энергии. Одним из перспективных направлений повышения энергоэффективности процессов ректификации является применение схем с тепловыми насосами (ТН).

Цель настоящей работы заключается в оценке энергетической эффективности применения ТН в схеме разделения БТК-фракции на бензол, толуол и суммарные ксилолы (Рис.1).

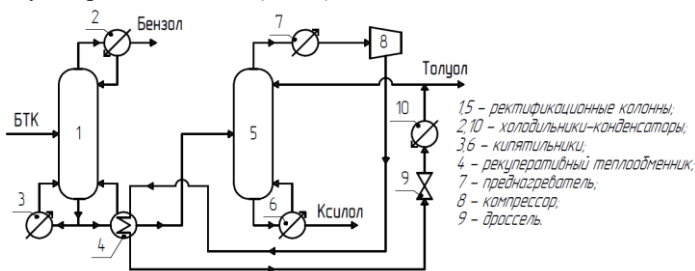


Рис. 1. Принципиальная схема разделения БТК-фракции с применением теплового насоса

Решение поставленной задачи осуществляли методом вычислительного эксперимента в российском программном комплексе GIBBS в соответствии с алгоритмом, предложенным в [1]. Расчеты показали, что приведенные энергетические затраты схемы с ТН на 20,5% ниже по сравнению с исходной схемой из двух простых колонн.

Литература

1. Рудаков Д.Г., Клаузнер П.С., Рамочников Д.А., Анохина Е.А., Тимошенко А.В. Эффективность применения тепловых насосов в экстрактивной ректификации смеси аллиловый спирт – аллилацетат в зависимости от состава питания. Часть 1. Применение тепловых насосов в схемах из двухотборных колонн // Химическая технология. 2022. Т. 23. № 6. С. 280-288.

© Морев Г.И., Рудаков Д.Г., Тимошенко А.В., 2025

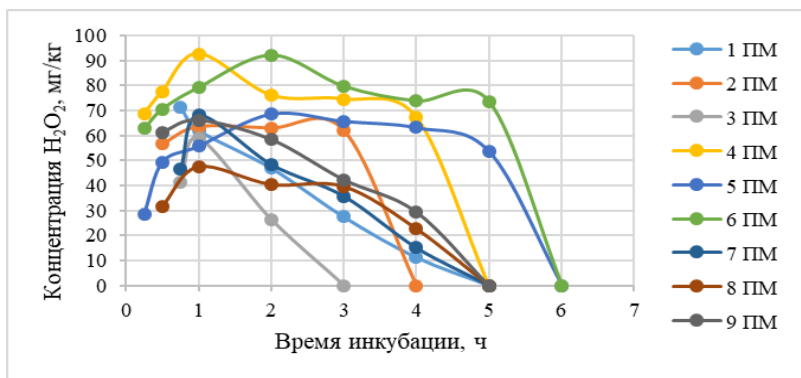
ВЛИЯНИЕ ВРЕМЕНИ ИНКУБИРОВАНИЯ РАСТВОРА МЕДА НА ЕГО ПЕРОКСИДНУЮ АНТИБАКТЕРИАЛЬНУЮ АКТИВНОСТЬ

Муртазина Р.Р., Лутфуллина Р.И., Гаянова А.А.,

Канчурина М.М., Талипов Р.Ф.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Исследование пероксидной антибактериальной активности различных видов башкирского меда на кафедре органической и биоорганической химии УУНиТ показало, что наибольшее количество пероксида водорода (ПВ) образуется в 5%-ном растворе подсолнечникового меда при его инкубации в течение 1 часа. Однако не известно, как время инкубирования раствора меда влияет на образование ПВ в растворе подсолнечникового меда. Поэтому мы решили изучить процесс накопления ПВ в растворе меда с течением времени. Всего в исследовании участвовало 9 образцов подсолнечникового меда, и для всех образцов изучено изменение концентрации ПВ с течением времени используя ферментативный метод, сопряженный со спектрофотометрией [1]. У 6 образцов меда из 9 (2 ПМ, 3 ПМ, 4 ПМ, 7 ПМ, 8 ПМ, 9 ПМ) наибольшее количество ПВ образуется при инкубации раствора меда в течение 1 часа, у 2 образцов (5 и 6 ПМ) – в течение 2 часов и 1 образца (1 ПМ) – в течение 45 минут (см. рис. 1).



Таким образом, у большинства образцов меда максимальное количество ПВ образуется в 5%-ном растворе меда при его инкубации в течение 1 часа.

Литература

1. Rückriemen J. Carbonyl compounds in Manuka honey: Antibacterial activity, reactions and metabolic transit, Dissertation, Dr. rer. nat., Dresden, 2018. 258 p.

© Муртазина Р.Р., Лутфуллина Р.И., Гаянова А.А.,
Канчурина М.М., Талипов Р.Ф., 2025

НИКЕЛЕВЫЕ ПЛАСТИНЫ С НАНОВОРСИНКАМИ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ БИОДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА ВТОРОГО ПОКОЛЕНИЯ

Найдина И.А., Тихонова А.А., Рябков Е.Д.

МИРЭА – Российский технологический университет, Москва, Россия

Возросший спрос на устойчивую энергетику вызвал большой интерес к разработке альтернативных видов топлива, особенно биотопливу, относящемуся к возобновляемым энергоресурсам, причем биодизель второго поколения считается одним из самых востребованных его видов. Основными методами производства данного продукта являются этерификация, переэтерификация и гидропереработка растительных масел и животных жиров. В качестве сырья используют рапсовое, соевое, пальмовое, кокосовое масло и отходы пищевой промышленности. Биодизельное топливо, получаемое в результате переэтерификации, имеет тот же жирнокислотный состав, что и исходное масло или жир, богатые двойными связями. В этом случае биодизельное топливо нестабильно и может превращаться в пероксид, альдегид, кетон и т.д. в присутствии света, тепла и кислорода [1]. Повышение устойчивости биодизеля к окислению, особенно для топлив с ненасыщенными жирными кислотами, является важной задачей, и гидрирование является перспективным способом достижения стабильности топлива.

В данной работе изучен процесс жидкофазного гидрирования смеси жирных кислот (олеиновая, линолевая, пальмитиновая и стеариновая) при атмосферном давлении с использованием в качестве каталитически активного материала наноструктурированной никелевой пластины, диаметр ворсинок на поверхности которой составляет 150-250 нм. Катализатор был получен методом электрохимического осаждения на наноперфорированную матрицу из оксида алюминия [2]. Анализ продуктов показал почти полное отсутствие линолевой кислоты, которая частично гидрировалась до олеиновой и стеариновой кислот. Результаты подтвердили перспективность нановорсинок никеля как катализатора в гидрировании непредельных жирных кислот.

Литература

1. Duarte M.P., Naccache R. Exploiting the potential of calcined sodium citrate as a novel and efficient heterogeneous catalyst for biodiesel synthesis //Catalysis Science & Technology. – 2024. – Т. 14. – №. 14. – С. 3864-3877.
2. Antropov A.P., Zaytsev N.K., Ryabkov Ye.D., Yashtulov N.A., Mudrakova // P.N. Tonk. Khim. Tekhnol.Fine Chem. Technol. 2021;16(2):105-112

© Найдина И.А., Тихонова А.А., Рябков Е.Д., 2025

МУЛЬТИКОМПОНЕНТНАЯ РЕАКЦИЯ ИНДОЛА С ФОРМАЛЬДЕГИДОМ, СЕРОУГЛЕРОДОМ И АНИЛИНОМ

Нигматуллина В.Р.¹, Леонтьев Д.В.², Ахметова В.Р.²

¹Уфимский государственный нефтяной технический университет,

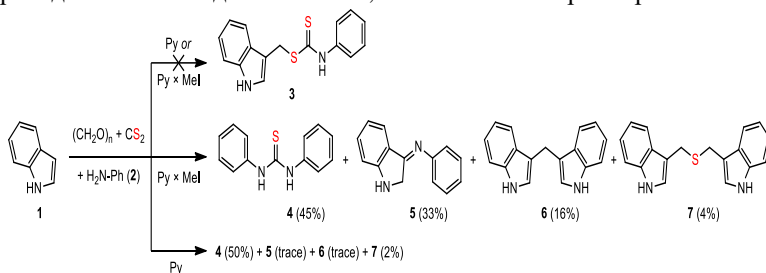
Уфа, Россия

²Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН,

Уфа, Россия

Индол и его производные являются структурными фрагментами алкалоидов, проявляющих фунгицидные, антимикробные и ростостимулирующие свойства. Синтетические S-содержащие аналоги используются в качестве лекарственных препаратов широкого действия [1], которые обычно получают многостадийными способами. Недавно нами разработана одnoreакторная S-функционализация индола **1** с CH₂O и тиолами при катализе пиридином [2].

В данной работе изучена мультикомпонентная реакция (МКР) индола с формальдегидом, сероуглеродом и анилином с целью синтеза дитиокарбаматного производного индола **3**, близкого по структуре к алкалоиду брассинину [3]. Установлено, что МКР **1** с CH₂O, CS₂ и анилином в присутствии пиридина или комплекса Ru·MeI не дает целевой продукт **3**. Колоночной хроматографии выделены продукты **4** – **7**, строение которых доказано методами ЯМР ¹H, ¹³C и масс-спектрометрией HRMS.



Образование продукта **4** является предпочтительным при катализе Ru или комплексом Ru·MeI. Тиокарбанилид **4** нашел применение в сельском хозяйстве в качестве ретарданта и фунгицида, а в медицине как противомикробный и антигрибковый препарат.

Работа выполнена в рамках госзадания FMRS-2025-0041

Литература

1. Güzel-Akdemir Ö.; Trawally M.; Özbek-Babuç M.; Özbek-Çelik B.; Ermut G.; Özdemir H. Synthesis and antibacterial activity of new hybrid derivatives

of 5-sulfamoyl-1H-indole and 4-thiazolidinone groups. Chemical Monthly. 2020, 151,1443-1452.

2. В.Р. Ахметова, Д.В. Леонтьев, Э.М. Галимова, Е.С. Мещерякова, ХГС, 2023, 59, 826-832.

3. Soledade, M.; Pedras, C.; Minic, Z.; Sarma-Mamillapalle, V.K. J. Agric. Food Chem. 2009, 57, 2429-2435.

© Нигматуллина В.Р., Ахметова В.Р., Леонтьев Д.В., 2025

УДК 542.61

АНАЛИЗ ЭМУЛЬСИОННЫХ ЭКСТРАКТОВ ДРЕВЕСНОЙ ЗЕЛЕНИ ПИХТЫ И СОСНЫ МЕТОДОМ ОПТИЧЕСКОЙ МИКРОСКОПИИ

Никонова Н.Н., Хуршкайнен Т.В., Кучин А.В.

Институт химии ФИЦ Коми НЦ УрО РАН, Сыктывкар, Россия

Представленное исследование посвящено анализу экстрактов, полученных из древесной зелени сосны обыкновенной и пихты сибирской эмульсионным методом, с целью повышения эффективности извлечения экстрактивных веществ. При использовании в качестве экстрагента водного раствора щелочи в суспензионной смеси появляются поверхностно-активные вещества – соли жирных и смоляных кислот древесной зелени. С участием поверхностно-активных веществ и липидных компонентов в водной среде образуется эмульсия, с помощью которой происходит извлечение из сырья малополярных и малорастворимых веществ.

Определено влияние концентрации водного раствора щелочи, гидромодуля и продолжительности экстракции на формирование эмульсии и ее качество (размер частиц дисперсионной фазы и их распределение).

Для определения дисперсного состава эмульсии был выбран метод оптической микроскопии, поскольку он определяет дисперсный состав непосредственно по результатам измерений отдельных капель, не требует сложной математической обработки и дорогостоящих средств реализации.

Образование качественной эмульсии и эффективное извлечение экстрактивных веществ из древесной зелени сосны достигалось при концентрации водного раствора щелочи 3%, гидромодуле 1/8 и продолжительность экстракции 30 мин [1]. Из древесной зелени пихты - при концентрации водного раствора щелочи 3%, гидромодуле 1/8 и продолжительность экстракции 120 мин.

Экстракты представляют собой эмульсию «масло в воде», в которой в качестве дисперсионной среды выступают частицы с размером от 0.9 до 4.9 мкм (средний размер 2.5 мкм) – для сосны и от 1.1 до 7.2 мкм (средний размер 2.7 мкм) – для пихты, равномерно распределенные по всему объему дисперсионной среды. Частицы дисперсной фазы - это липофильная фракция компонентов древесной зелени, дисперсионная среда – водно-

щелочной раствор с содержанием водорастворимых компонентов растительного сырья.

Литература

1. Никонова Н.Н., Легкий Ф.В., Хуршайнен Т.В., Кучин А.В. Химия растительного сырья. 2023. №2. С. 319-325.

© Никонова Н.Н., Хуршайнен Т.В., Кучин А.В., 2025

УДК 547.811

ЗАМЕЩЕННЫЕ ТЕТРАГИДРОХРОМЕНКАРБОНИТРИЛЫ, СИНТЕЗ, РЕГИОИЗОМЕРЫ, БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ

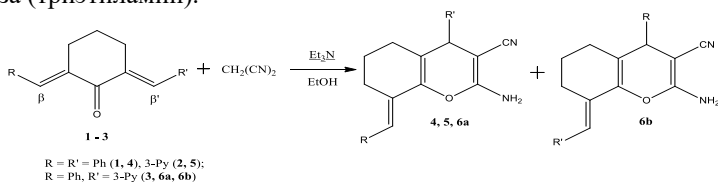
Никулин А.В.¹, Астанкова А.С.^{1, 2}, Кривенько А.П.¹, Бурьгин Г.Л.^{1, 2, 3}

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

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

³ Саратовский государственный университет генетики, биотехнологии и инженерии им. Н.И. Вавилова, Саратов, Россия

С целью получения потенциально биологически активных веществ и выявления влияния замещающих групп нами осуществлен синтез фенил (3-пиридил) аминотетрагидро-4Н-хроменкарбонитрилов **4**, **5**, **6a**, **6b** по модифицированным методикам посредством конденсации дилиденциклогексанонов **1-3** с малононитрилом в условиях основного катализа (триэтиламин).



Опыты в ампуле ЯМР-спектрометра (на примере субстрата **1**) показали, что реакция протекает как нуклеофильное присоединение по электронодефицитному β -центру с последующей внутримолекулярной О-циклизацией (лимитирующая стадия) аддукта Михаэля. Взаимодействие несимметрично построенного халкона **3** с малонитрилом из-за наличия неэквивалентных β , β' электронодефицитных центров приводит к образованию региоизомерных продуктов **6a**, **6b**, соотношения которых по данным ЯМР ^1H спектров составляет 1.0:1.1 соответственно. Разделение последних осуществлено с помощью колоночной хроматографии (хроматографическая колонка диаметром 32 мм, длиной 457 мм, активированный силикагель (фракция 0.2-0.5 мм), элюент

хлороформ:этилацетат = 1:1), определены их физические константы и спектральные характеристики.

При экспериментально исследовании на базе ФГБОУ ВО Вавиловского университета установлено, что дипиридилзамещенная система **5** является лидером по антибактериальной активности в отношении *Staphylococcus aureus*, а соединение **4** по цитотоксическому действию в отношении клеточной линии HeLa.

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

УДК 547

СИНТЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНО ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ В УСЛОВИЯХ РЕАКЦИИ МАННИХА.

Охиров Ш.М., Валитова Р.С., Канчурина Н.М., Забалуева С.С.,
Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф.

Уфимский университет науки и технологии, Уфа, Россия

Ранее в ходе изучения возможности синтеза оснований Манниха на основе спиртов **1(a,b)** - тетрагидрофуранола-3 (**1a**) и нопола (**1b**) – вместо ожидаемых аминотоксипроизводных **2(a,b)** были получены продукты димеризации спиртов с участием формальдегида **3(a,b)**. Соединения (**3a-b**), согласно программе Pass Online, могут проявлять различные виды биологической активности (таблица 1) при их низкой токсичности, рассчитанной на основе программы Gussar Online.

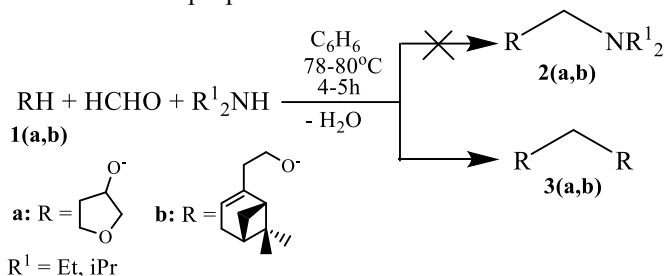


Таблица 1. Фармакологическая активность соединений (**3a-b**)
согласно программе Pass Online

Соединение	Виды активности	Pa
3a	Ингибитор маннотетраозы 2-альфа-N-ацетилглюкозаминилтрансферазы	0,859
	Лечение фобических расстройств	0,817

3b	Анестетик	0,681
	Антинейротический	0,625

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

Изучение соответствия соединений (**3a**, **b**) критериям лекарственного сходства согласно правилам Липински, Вебера, Мюгге, Гозе, Игана с использованием on-line платформы SwissADME показало, что соединение **3a** полностью удовлетворяет вышеуказанным правилам за исключением не соответствия правилу Мюгге – его молекулярная масса меньше 200, что является не критичным.

Важной составной частью биологической активности соединений является их антиокислительная активность - способность к снижению нежелательных процессов окисления. В модельной реакции инициированного окисления изопропилового спирта определена антиокислительная способность соединения **3a**. Эффективная константа скорости реакции ингибирования для 3,3'[метиленис(окси)] дитетрагидрофурана **3a** характеризует его как слабый акцептор свободных радикалов

© Охиров Ш.М., Валитова Р.С., Канчурина Н.М., Забалуева С.С.,
Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф., 2025

УДК 547

СИНТЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНО ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ ДИГИДРОФУРАН-3(2H)-ОНА Охиров Ш.М., Валитова Р.С., Валишина С.В., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф. *Уфимский университет науки и технологии, Уфа, Россия*

Однореакторной реакцией Манниха дигидрофуран-3(2H)-она (**1**) с вторичными аминами в присутствии формальдегида получены соединения: 4,4-бис(пиперидин-1-илметил)дигидрофуран-3(2H)он (**2a**), 4,4-бис[(4-метилпиперидин-1-ил)метил]дигидрофуран-3(2H)он (**2b**), 4,4-бис(пирролидин-1-илметил)дигидрофуран-3(2H)-он (**2c**). Соединения (**2a-c**), согласно программе Pass Online, могут проявлять различные виды биологической активности (таблица 1) при их низкой токсичности, рассчитанной на основе программы Gussar Online.

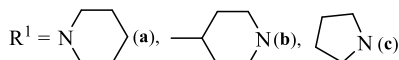
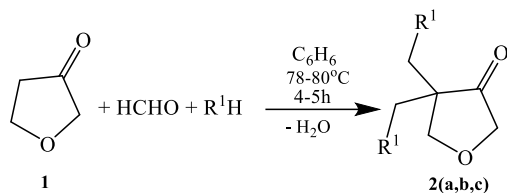


Схема 1. Реакция Манниха с участием дигидрофуран-3(2H)-она (**1**), формальдегида и вторичных аминов.

Таблица 1

Фармакологическая активность соединений (**2a-c**) согласно программе Pass Online,

Соединение	Виды активности	Pa
2a	Аналептик для сердечно-сосудистой системы	0,927
	Средство для лечения фобических расстройств	0,797
2b	Ингибитор проницаемости мембран	0,758
	Противосудорожный	0,694
2c	Противоаллергический препарат	0,683
	Противоастматический	0,666

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

Изучение соответствия синтезированных соединений (**2a-c**), критериям лекарственного сходства согласно правилам Липински, Вебера, Мюгге, Гозе, Игана с использованием on-line платформы SwissADME показало, что рассматриваемые соединения полностью удовлетворяет вышеуказанным правилам.

© Охиров Ш.М., Валитова Р.С., Валишина С.В.,
Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф., 2025

НИТРОВАНИЕ N-БЕНЗОИЛ-2,2,4,7-ТЕТРАМЕТИЛ-6-НИТРО-1,2,3,4-ТЕТРАГИДРОХИНОЛИНА

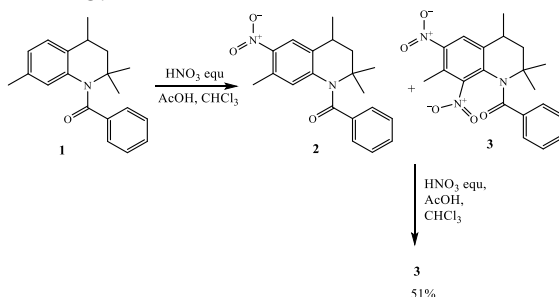
Потапов А.Ю., Карелина К.О.

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

Нитросоединения представляют собой важные функциональные производные в синтетической органической химии, поскольку являются строительными блоками для веществ, обладающих широким спектром биологической активности. В работе [1] показано, что в результате обработки дымящей азотной кислотой раствора N-ацилгидрохинолинов в среде хлороформа, содержащего каталитические количества ледяной уксусной кислоты, нитрование протекает по 6 положению хинолинового остова. Целью настоящей работы являлось изучение реакции нитрования N-бензоил-2,2,4,7-тетраметил-1,2,3,4-тетрагидрохинолина **1**.

По данным ВЭЖХ-МС установлено, что в результате распространения условий, описанных в статье [1], на N-бензоилтетрагидрохинолин **1**, помимо ожидаемого N-бензоил-2,2,4,7-тетраметил-6-нитро-1,2,3,4-тетрагидрохинолина **2** образуется 11-15% побочного продукта. Разделить полученную смесь не удалось.

На основании массы молекулярного иона примеси, было предположено, что она представляет собой продукт присоединения двух нитрогрупп. Для получения в чистом виде и установления структуры побочного продукта реакции, было принято решение продолжить обработку азотной кислотой полученной смеси. Выход динитропроизводного составил 51%. На основании ВЭЖХ-МС и ¹H ЯМР анализов, полученному продукту была присвоена структура N-бензоил-2,2,4,7-тетраметил-6,8-динитро-1,2,3,4-тетрагидрохинолина **3**.



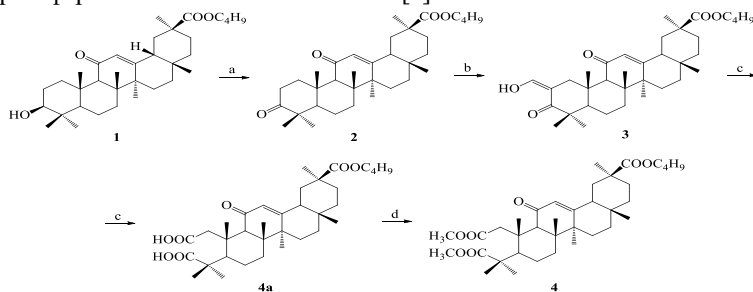
Литература

1. Нитрование 2,2,4-триметил-4-фенил-1,2,3,4-тетрагидрохинолина и его N-ацилпроизводных / Ж.В. Шмырева [и др.] // ЖОХ. – 1989. – Т. 59, № 6. – С.1391-1397.

© Потапов А.Ю., Карелина К.О., 2025

СИНТЕЗ А-СЕКО ПРОИЗВОДНЫХ 18 β -ГЛИЦИРРЕТИНОВОЙ КИСЛОТЫРасулев Н.М.¹, Каримова Э.Р.^{1,2}, Балтина Л.А.²¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия²Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Химическая модификация доступных биологически активных растительных метаболитов является перспективным путем получения новых фармакологически значимых соединений медицинского назначения. Целью данной работы является синтез А-секо-производных основного тритерпеноида корней солодки – 18 β -глицирретиновой кислоты, обладающей широким спектром фармакологической активности [1].



Условия и реагенты: а) PDC, CH₂Cl₂, RT; б) C₂H₅COOH, бензол, 30% NaOMe/MeOH₄; в) O₃, CH₂Cl₂, -30°C; д) CH₂N₂-Et₂O, CH₂Cl₂, RT

В качестве исходного соединения использовали бутиловый эфир ГЛК 1, который окисляли PDC в 3-оксо-производное 2 и взаимодействием 2 с этилформиатом в бензоле в присутствии 30% NaOMe/MeOH получали бутиловый эфир 2-оксиметилен-3,11-диоксо-18 β -олеан-12-ен-30-овой кислоты 3 с выходом 84%. Исчерпывающий озонолиз соединения 3 в хлористом метиле при -30°C привел к образованию 2,3-секо-производного 4а и смеси минорных продуктов окисления. После обработки продукта реакции эфирным раствором диазометана колоночной хроматографией выделили и идентифицировали основной продукт реакции 4 (выход 54 %). Структура соединений 3 и 4 подтверждена спектрами ЯМР ¹H (500 МГц) и ¹³C (125 МГц) с двумерной корреляцией (COSY, HSQC, HNBC).

Литература

1. Толстиков Г.А., Балтина Л.А., Гранкина В.П., Кондратенко Р.М., Толстикова Т.Г. Солодка: биоразнообразие, химия, применение в медицине. – Новосибирск: Академическое изд-во «Гео», 2007. – 311 с.

© Расулев Н.М., Каримова Э.Р., Балтина Л.А., 2025

УДК 547.917.

ПОЛУЧЕНИЕ ЛЕВОГЛЮКОЗЕНОНА ИЗ ЦЕЛЛЮЛОЗАСОДЕРЖАЩИХ ОТХОДОВ

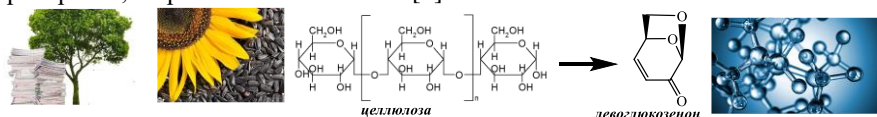
Резванова С.В.¹, Каримов Р.Р.², Ялалов М.Г.^{2,3}, Улмасбаева З.А.^{2,3},
Муслюмова Д.М.³, Карамышева Л.Ш.³, Галимова Ю.С.³, Халилова Ю.А.³,
Файзуллина Л.Х.³

¹ Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Уфа, Россия

² Уфимский университет науки и технологии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

³ Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия,

Целлюлоза составляет значительную долю отходов сельского хозяйства, деревообработки и пищевой промышленности (опилки и жмых) и обладает огромным потенциалом как источник ценных химических соединений. Одним из таких соединений является левоглюкозенон - многофункциональное органическое соединение, которое используется как замена токсичным растворителям, эффективно в синтезе фармацевтических препаратов, в органическом синтезе.[1]



В данной работе представлен сравнительный анализ синтеза левоглюкозенона из ватмана, бумаги, шелухи семечек и опилок с учётом не только выхода продукта, но и его чистоты (ГЖХ). Экспериментальные данные показали, что из ватмана выход левоглюкозенона составил 1,4%, чистота 97%; из шелухи семечек - 1,7%, чистота 73%; из макулатуры - 1%, чистота 90%; из опилок получили 0,77 г. левоглюкозенона с выходом 0,5% чистота 91%.

Исследование показало зависимость между качеством сырья, его выходом и чистотой для получения левоглюкозенона. Результаты подчёркивают необходимость выбора сырья в зависимости от целей: ватман оптимален для лабораторного синтеза, так как отсутствуют какие-либо примеси и не требуется дополнительной очистки, а шелуха семечек, опилки и макулатура — для масштабирования с учётом экономики процессов. Работа вносит вклад в развитие технологий переработки биомассы с акцентом на оценку эффективности и является актуальной для решения экологических проблем.

Работа выполнена по теме государственного задания 125020601627-6.

Литература

1. Sarotti A.M., Zanardi M., Spanevello R.A. Recent applications of levoglucosenone as chiral synthon. *Curr. Org. Synth.* 2012. V.9. P. 439-459.

© Резванова С.В., Каримов Р.Р., Ялалов М.Г., Улмасбаева З.А.,
Муслюмова Д.М., Карамышева Л.Ш., Галимова Ю.С., Халилова Ю.А.,
Файзуллина Л.Х., 2025

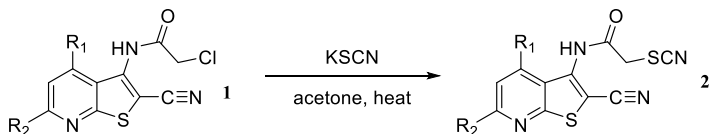
УДК 547.834.22

ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ 2-ЦИАНО-3-(ХЛОРАЦЕТАМИДО)ТИЕНО [2,3-*b*]ПИРИДИНОВ С ТИОЦИАНАТОМ КАЛИЯ В АЦЕТОНЕ

Руденко С.В., Лукина Д.Ю., Киндоп В.К., Киндоп Вл.К.,
Беспалов А.В., Доценко В.В

Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия

Известно, что многие производные 3-аминотиено[2,3-*b*]пиридина обладают широким спектром биологической активности [1-3]. Их свойства могут быть модифицированы путём введения в систему различных заместителей. Доступными и удобными субстратами для проведения функционализации являются 3-(хлорацетамидо)тиено[2,3-*b*]пиридины, способные вступать в реакции нуклеофильного замещения. Установлено, что эти производные взаимодействуют с тиоцианатом калия, который выступает в роли *S*-нуклеофила. Однако данная реакция часто сопровождается процессами внутримолекулярной циклизации, и приводит к образованию различных продуктов, структуры которых сильно зависят от природы заместителя, находящегося в положении *C*² исходного тиенопиридина. Было обнаружено, что 2-циано-3-(хлорацетамидо)тиено[2,3-*b*]пиридины (**1**) могут вступать во взаимодействие с тиоцианатом калия с образованием 2-циано-3-(тиоцианоацетамидо)тиено[2,3-*b*]пиридинов (**2**), которые не подвергаются дальнейшим превращениям в условиях данной реакции.



Строение 2-циано-3-(тиоцианоацетамидо)тиено[2,3-*b*]пиридинов (**2**) было подтверждено данными ИК-, ЯМР ¹H и ¹³C спектроскопии. Свойства и биологическая активность соединений **2** в настоящее время изучаются.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Кубанского научного фонда в рамках научного проекта МПИ-24.1/12 «альфа-Роданоацетамиды: синтез, свойства и биологическая активность»

Литература

1. Литвинов В.П., Доценко В.В., Кривоколыско С.Г. // Изв. АН. Сер. Хим. – 2005. – № 4. – С. 848.
2. Доценко В.В., Бурый Д.С., Лукина Д.Ю., Кривоколыско С.Г. // Изв. АН. Сер. Хим. – 2020. – № 10. – С. 1829.
3. Shaw R. Tewari R., Yadav M., Pandey E., Tripathi K., Rani J. // Eur. J. Med. Chem. Reports. – 2024. – paper 100185.

© Руденко С.В., Лукина Д.Ю., Киндоп В.К., Киндоп Вл.К.,
Беспалов А.В., Доценко В.В., 2025

УДК 541.14:547.551.2

ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТОДА СИНТЕЗА ТРОЙНОГО ХЕЛАТНОГО КОМПЛЕКСА ЖЕЛЕЗА – АСКОРБАТОНИКОТИНАТА ЖЕЛЕЗА

Самоволов А.В., Блинов А.В., Серов А.В., Серов А.М., Татов А.В.

Северо-Кавказский федеральный университет, Ставрополь, Россия

Одним из важнейших микроэлементов является железо [1]. Уникальность этого элемента определяется его ключевой ролью в фундаментальных функциях организма [2]. Эссенциальный микроэлемент железо содержится в таких продуктах питания, как: говядина, куриная печень, морепродукты, и т.д. [3].

Для повышения уровня железа в организме разработано множество биоактивных добавок с неорганической формой железа. На сегодняшний день проявляется большой интерес к тройным хелатным комплексам железа с витаминами и аминокислотами, так как они обладают более высокой биосвоеваемостью по сравнению с неорганической формой.

Для оптимизации метода синтеза аскорбатоникотината железа (II) варьировали концентрации различных исходных реагентов. В качестве исходных реагентов использовались: сульфат железа, аскорбиновая кислота и никотиновая кислота. В качестве выходного параметра выступало значение оптической плотности (D).

Анализ полученных данных показал, что концентрации исходных реагентов оказывают значимое влияние на оптическую плотность комплекса. Увеличение концентрации сульфата железа приводит к увеличению оптической плотности, в то время как увеличение концентрации никотиновой кислоты – к уменьшению оптической плотности. Изменение концентрации аскорбиновой кислоты не оказывает влияния на оптические свойства комплекса. Таким образом, оптимальными параметрами синтеза являются: $C(C_6H_5NO_2) = 0.346$ моль/л, $C(FeSO_4) = 1,249$ моль/л, $C(C_6H_8O_6) = 0,516$ моль/л.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-76-10063, <https://rscf.ru/project/24-76-10063/>.

Литература

1. Smirnov O.A., Smirnova O.N., Giposideroz kak forma mikroelementoza s narusheniem obmena zheleza // Mikroelementy v medicine. – 2019. – № 20 (3). – S. 12-19.
 2. Цветаева Н.В., Левина А.А., Мамукова Ю.И. Основы регуляции обмена железа. Клиническая онкогематология. 2010; 3 (3): 278-83.
 3. Iron, Fe (mg), <https://fdc.nal.usda.gov/fdc-app.html#/?component=1089>
- © Самоволов А.В., Блинов А.В., Серов А.В., Серов А.М., Татов А.В., 2025

УДК 547.626

СИНТЕЗ 3-АЛКИЛИНДАЗОЛОВ

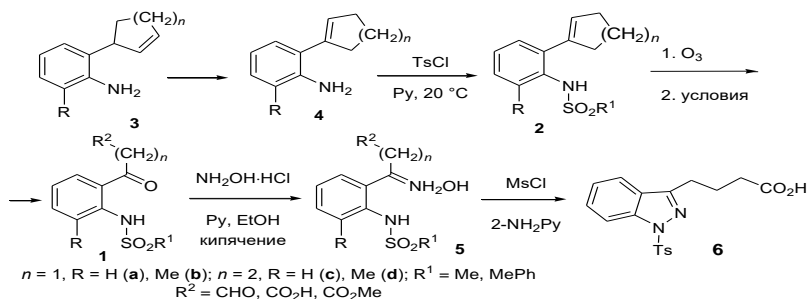
Сафаргалин Р.Р., Гатауллин Р.Р.

Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Производные индазола проявляют различные виды биологической активности. Такие как, имеющие торговые названия *пазопаниб* и *гранисетрон*, одобрены Управлением по контролю качества пищевых продуктов и лекарственных средств (Food and Drug Administration, USFDA) США. 1-Дихлорбензилиндазол-3-карбоновая кислота, которую назвали *лонидамин*, подавляет аэробный гликолиз в раковых клетках, *бензидамин* и *бендазак* применяются как противовоспалительное средство. Производные бензпиразола синтезируют как с применением металлокомплексных катализаторов, так и без их участия. Последние способы предпочтительны с точки зрения медицинской химии.

Подход к синтезу индазолов из кетоксимов 2-(аминофенил)алканонов или 2-(аминофенил)арилметанов при обработке метансульфохлоридом в присутствии аминов реализован лишь на ограниченном примере объектов и сведения о представителях с алкильными фрагментами, обремененными функциональной группой [напр., CO_2H , $\text{CH}(\text{OMe})_2$, и др.], пока в литературе отсутствуют.

Необходимым условием успешной реализации этих синтезов является наличие соответствующего кетона. Нами проводятся исследования по синтезу кетонов **1** окислением озоном тозилатов **2**, доступных из циклоалкениланилинов **3**→**4**. Кетоны **1** далее вводятся в реакцию с гидрохлоридом гидроксилamina и полученные оксимы **5** действием мезилхлорида в присутствии 2-аминопиридина подвергаются циклизации в индазолы **6**.



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

УДК 547.841

СИНТЕЗ 4,4-ДИМЕТИЛ-1,3-ДИОКСАНА ПО РЕАКЦИИ ПРИНСА В УСЛОВИЯХ ГЕТЕРОГЕННОГО КИСЛОТНОГО КАТАЛИЗА

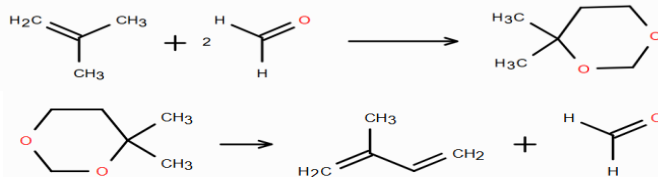
Саяров Д.Р.¹, Исмагилов Р.Р.¹, Альмухаметов М.Р.², Фаттахов А.Х.¹,
Тухватшин В.С.¹, Талипов Р.Ф.¹

¹ Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

² МАОУ Татарская гимназия 84, Уфа, Россия

«Диоксановый» метод играет ключевую роль в промышленном синтезе изопрена. Он характеризуется комплексной научной проработкой, включая теоретические и экспериментальные исследования [1] и высокой эффективностью, обеспечивающей хороший выход и низкую себестоимость целевого продукта. Технологическая основа двухстадийного «диоксанового» процесса включает синтез 4,4-диметил-1,3-диоксана (ДМД) по реакции Принса из изобутилена и формальдегида в кислой среде и его каталитическое расщепление до целевого изопрена (Схема. 1).

Схема 1



Основным недостатком диоксанового метода синтеза является образование большого количества побочных продуктов на первой стадии реакции, получение ДМД, а также коррозионное влияние гомогенных кислотных катализаторов на реактор. Одним из путей решения указанных проблем является применение гетерогенных кислотных катализаторов. Известно, что пористые материалы способствуют формированию и стабилизации циклического переходного состояния реакции Принса, а, следовательно, селективному образованию 1,3-диоксанов [2-3].

В связи с этим нами были проведены исследования по влиянию цеолита НУ на селективность образования и выход ДМД по реакции Принса.

Проведена серия экспериментов по оценке воздействия концентрации цеолита НУ в реакционной смеси на селективность образования 4,4-диметил-1,3-диоксана (ДМД) в реакции конденсации формальдегида с изобутиленом в проточном режиме. В результате исследования были установлены оптимальные условия процесса: температура 130°C, содержание цеолита-8%.

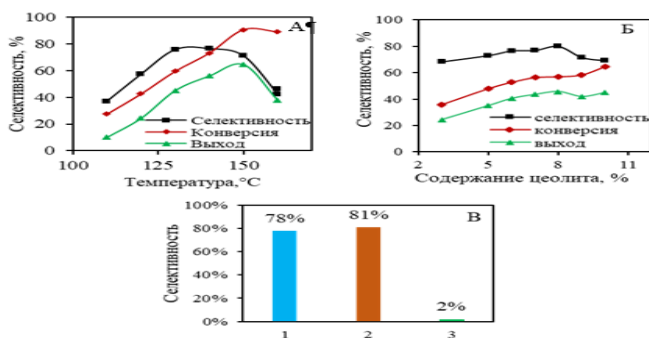


Рис. 1. Зависимость селективности ДМД от температуры (А), от содержания цеолита (Б) и от типа катализатора (В): 1 – ортофосфорная кислота, 2 – цеолит НУ, 3 – без катализатора

Проведенные исследования показали, что использование пористых материалов, в частности цеолита НУ, позволяет повысить селективность реакции Принса до 80-82%. Таким образом, модификация «диоксанового метода» за счет применения цеолитсодержащих катализаторов открывает перспективы для его дальнейшей оптимизации: повышения выхода изопрена, снижения коррозионной нагрузки и улучшения экономических показателей процесса. Для промышленного внедрения данного подхода требуются дополнительные исследования, направленные на изучение стабильности катализатора, возможности его регенерации и масштабирования технологии.

Литература

1. Способ получения 4,4-диметил-1,3-диоксана. Фаттахов А.Х., Латыпов А.Х., Талипов Р.Ф., Тухватшин В.С., Фахретдинов Д.Ш., Исмагилов Р.Р., Травкина О.С., Кутепов Б.И., Латыпова Э.Р. Патент на изобретение RU 2811258 C1, 11.01.2024. Заявка № 2023129613 от 15.11.2023.
2. Влияние силикагелей марок АСКГ и ШСМГ на селективность образования 4,4-диметил-1,3-диоксана. Латыпов А.Х., Талипов Р.Ф., Фаттахов А.Х. Вестник Технологического университета. 2023. Т. 26. № 7. С. 57-60.

3. Селективность образования 4,4-диметил-1,3-диоксана в присутствии синтетических цеолитов в реакторе проточного типа. Латыпов А.Х., Фаттахов А.Х., Аллагузин И.Х., Талипов Р.Ф. Бутлеровские сообщения. 2024. Т. 79. № 8. С. 21-28.

© Саяров Д.Р., Исмагилов Р.Р., Альмухаметов М.Р., Фаттахов А.Х.,
Тухватшин В.С., Талипов Р.Ф., 2025

УДК 54.058

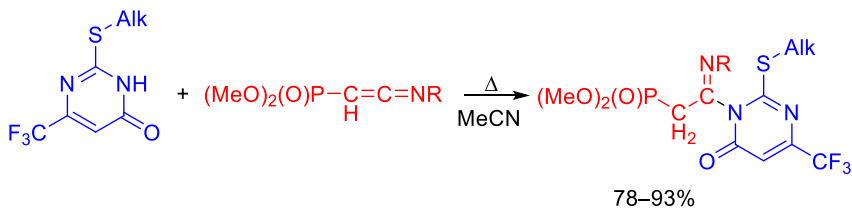
АЛЬДОКЕТЕНИМИНОФОСФОНАТЫ В РЕАКЦИЯХ С 5-АЛКИЛТИО- 6-ТРИФТОРМЕТИЛ-4(3*H*)-ОКСОПИРИМИДИНАМИ

Сидорова А.П., Свиницкая Н.И.

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

Кетенимины – электрононасыщенные соединения, обладающие высокой реакционной способностью, благодаря чему они находят широкое применение в качестве интермедиатов и строительных блоков в органическом синтезе. Так, реакции с аминами открывают удобный доступ к получению амидинов, которые проявляют разнообразную биологическую активность, что делает их потенциальными кандидатами для создания на их основе лекарственных средств. Одновременное введение тиюрацильного фрагмента и фосфонатной группы в структуру амидинов позволяет существенно расширить их синтетический и биологический потенциал. Тиюрацилы обладают химиотерапевтическим значением, особенно в отношении бактерий-паразитов и онкологических заболеваний.

В продолжение исследований в области химии кетениминофосфонатов осуществлен атом-экономный синтез ряда новых несимметричных С-фосфоноацетамидинов на основе реакции стабильных стерически затрудненных кетениминофосфонатов с 5-(алкилтио)-4(3*H*)-оксопиримидинами. Установлено, что реакции диалкил-2-(*N*-адамант-1-ил/*трет*-бутил)иминоэтенилфосфонатов с замещенными 5-алкилтио-6-трифторметил-4(3*H*)-оксопиримидинами протекают при кипячении в ацетонитриле и приводят к образованию соответствующих [2-(1-адамантил/*трет*-бутилимино)-2-(оксопиримидин)этил]фосфонатов с выходом 78–93%.



Alk = H, Me, Pr, i-Pr, n-Bu, amyl; R = t-Bu, 1-adamantyl.

Строение С-фосфонилированных ацетамидинов подтверждено данными спектроскопии ЯМР ^1H , ^{13}C и ^{31}P .

© Сидорова А.П., Свинцицкая Н.И., 2025

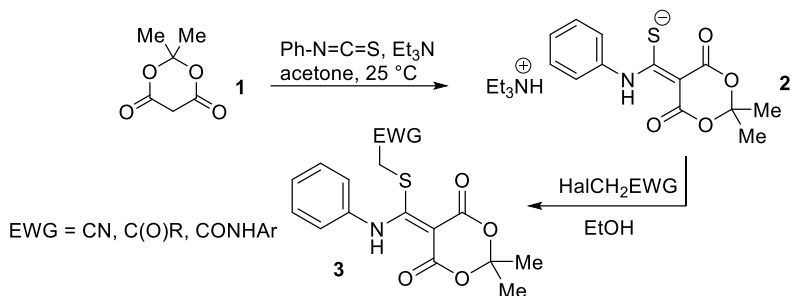
УДК 547.491.4 : 547.841

СИНТЕЗ НОВЫХ S,N-КЕТЕНАЦЕТАЛЕЙ ЧЕРЕЗ S-АЛКИЛИРОВАНИЕ (2,2-ДИМЕТИЛ-4,6-ДИОКСО-1,3-ДИОКСАН-5-ИЛИДЕН)(ФЕНИЛАМИНО)МЕТАНТИОЛАТА

Скачкова А.Ю., Русских А.А., Доценко В.В.

Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия

Кетен-S,N-ацетали зарекомендовали себя перспективными исходными реагентами для получения самых разнообразных производных [1-4]. Наиболее доступным способом получения кетен-S,N-ацеталей является взаимодействие метиленактивных соединений с изотиоцианатами либо тиоцианатами в присутствии оснований. Кислота Мельдрума **1** достаточно легко реагирует с фенилизотиоцианатом, образуя после подкисления соответствующее 5-(N-фенил)тиокарбамоильное производное [5]. Нам удалось подобрать условия, позволяющие в реакции кислоты Мельдрума **1** с фенилизотиоцианатом выделить соответствующий тиолат **2**. Нами было установлено, что тиолаты **2** вступают в реакцию алкилирования под действием α -галогенкетонів и производных хлоруксусной кислоты региоселективно по атому серы с образованием ранее не описанных в литературе кетен-S,N-ацеталей **3**.



Следует отметить, что на текущий момент одним из основных методов получения подобных соединений является аммонолиз соответствующих кетен-*S,S*-дитиоацеталей [6-10]. В настоящее время изучаются возможности и ограничения реакции, свойства полученных соединений, в частности реакции дальнейшей гетероциклизации, а также возможные сферы практического использования продуктов.

Литература

1. Zhang L., Dong J., Xu X., Liu Q. // Chem. Rev. 2016. Vol. 116. N 2. P. 287-322.
2. Biesen L., Müller T.J.J. // Chem. Eur. J. 2023. Vol. 29. N 64. Paper e202302067.
3. Lyapustin D.N., Fedotov V.V., Ulomsky E.N., Rusinov V.L., Chupakhin O.N. // Russ. Chem. Rev. 2023. Vol. 92. N 4. P. 5077.
4. Metwally M.A., Abdel-Latif E., Bondock S. // J. Sulfur Chem. 2007. Vol. 28. N 4. P. 431- 466.
5. Basheer A., Rappoport Z. // J. Phys. Org. Chem. 2008. Vol. 21. № 6. P. 483-491.
6. Ye F.C., Chen B.C., Huang X. // Synthesis. 1989. Vol. 1989. № 4. P. 317-320.
7. Erb B., Rigo B., Pirotte B., Couturier D. // J. Heterocycl. chem. 2002. Vol. 39. N 1. P. 15-28.
8. Lyapustin D.N., Marusich I.V., Fayzullina D.F., Ulomsky E.N., Matern A.I., Rusinov V.L. // Chem. Heterocycl. Comp. 2023. Vol. 59. N 1. P. 63-72.
9. Fulloon B.E., Wentrup C. // Austr. J. Chem. 2009. Vol. 62. № 2. P. 115-120.
10. Ben Cheikh, A., Chucho, J., Manisse, N., Pommelet, J.C., Netsch, K.P., Lorencak, P., Wentrup, C. // J. Org. Chem. 1991. Vol. 56. N 3. P. 970-975.

© Скачкова А.Ю., Русских А.А., Доценко В.В., 2025

УДК 547.831.3

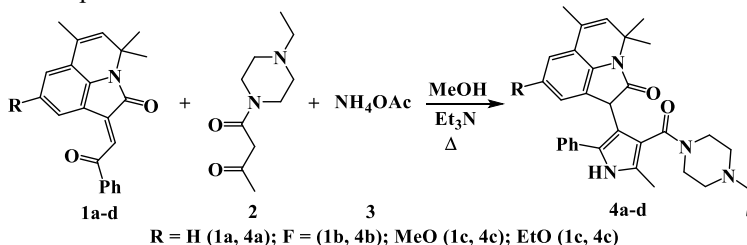
ТРЕХКОМПОНЕНТНЫЙ СИНТЕЗ НОВЫХ 1-ПИРРОЛИЛПИРРОЛО[3,2,1-*lj*]ХИНОЛИН-2-ОНОВ

Скопцова А.А., Чаплыгина М.Г., Зотова И.С., Шихалиев Х.С.
Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

Функционально замещенные пирроло[3,2,1-*ij*]хинолин-2-оны находят применение в синтезе молекул, обладающих разнообразной биологической активностью [1-3]. Так, построение новых гетероциклических систем

возможно на основе 2-оксо-2-арилэтилиденовых производных пирроло[3,2,1-*ij*]хинолин-2-она – удобных гетерофункциональных субстратах, позволяющих объединять ядро пирроло[3,2,1-*ij*]хинолинона с различными фармакофорами. Одним из способов сочетать в структуре соединения одновременно несколько фармакофорных фрагментов, получая при этом целевые гибридные молекулы *one pot*, являются многокомпонентные реакции.

В данной работе нами были изучены трехкомпонентные реакции 1-фенацилиденпирроло[3,2,1-*ij*]хинолин-2-онов **1** с 1-(4-этилпиперазин-1-ил)бутан-1,3-дионом **2** и ацетатом аммония в качестве источника молекулы аммиака. Были определены условия проведения реакции, позволяющие получать целевые линейносвязанные 1-пирролилпирроло[3,2,1-*ij*]хинолин-2-оны **4a-d** с хорошими выходами – кипячение в среде метанола с добавлением триэтиламина в качестве основного катализатора.



Структуры 1-пирролилпирролохинолин-2-онов **4a-d** охарактеризованы с использованием данных ВЭЖХ-МС анализа и ЯМР ^1H , ^{13}C спектроскопии. Проведенный ВЭЖХ-МС мониторинг реакции также позволил предположить маршрут данной реакции с первичным образованием енаминона при взаимодействии дикарбонильной компоненты с молекулой аммиака, присоединением енаминона к оксоилиденовому фрагменту соединения **1** и последующей циклизацией с получением целевых молекул **4**.

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

Литература

1. Kartsev V. et al. Appendix A. dithioquinolinethiones as new potential multitargeted antibacterial and antifungal agents: Synthesis, biological evaluation and molecular docking studies // Eur. J. Med. Chem. – 2019. – V. 175. – P. 201-214.
2. Medvedeva S.M., Kh. S. Shikhaliev. Synthesis of 4,5-Dihydro-1H-[1,2]dithiolo [3, 4-c]quinoline-1-thione Derivatives and Their Application as Protein Kinase Inhibitors // Molecules. – 2022. – V. 27. – P. 4033.

3. Novichikhina N. et al. Synthesis, Docking, and In Vitro Anticoagulant Activity Assay of Hybrid Derivatives of Pyrrolo[3,2,1-ij]Quinolin-2(1H)-one as New Inhibitors of Factor Xa and Factor XIa // *Molecules*. – 2020. – V. 25. – P. 1889.

© Скопцова А.А., Чаплыгина М.Г., Зотова И.С., Шихалиев Х.С., 2025

УДК 577.1:544.77-148

ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ И СОЛЕЙ КАЛЬЦИЯ В КАЧЕСТВЕ СШИВАЮЩИХ АГЕНТОВ

Ступко Ю.П., Таганбекова З.К., Маркин В.И.

Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия

Гидрогели представляют собой сетчатые полимеры, способные поглощать и удерживать большое количество воды, сохраняя свою трехмерную структуру. Альгинат натрия, сшитый ионами кальция, широко используется в биомедицине как каркас для тканевой инженерии благодаря структурному сходству с естественным внеклеточным матриксом. Он также полезен для заживления ран и может использоваться как гемостатический перевязочный материал [1].

В работе изучено влияние концентрации сульфата кальция (CaSO_4) на сшивание альгината натрия с получением гидрогелей, а также влияние использования лимонной кислоты (ЛК) в качестве регулятора кислотности на свойства полученных гидрогелей. Лимонная кислота, изменяя pH среды, влияет на степень ионизации альгината натрия, что приводит к увеличению количества свободных карбоксильных групп, способных связывать воду.

Для синтеза получали 1% полимерный раствор альгината натрия в водной среде при комнатной температуре 20-25°C с последующим добавлением сшивающих агентов при перемешивании в течении 1 ч. Водопоглощающую способность оценивали через 24 часа и 5 дней путем взвешивания образцов до и после набухания в дистиллированной воде при 25°C. Результаты представлены на рисунке 1.

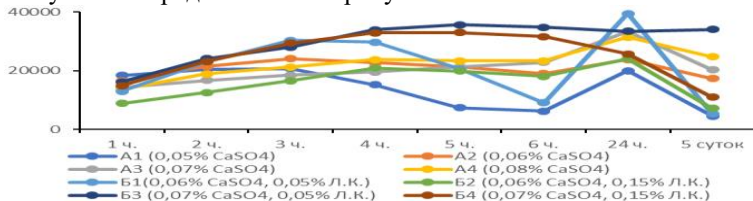


Рис. 1. Кинетика водопоглощения отвержденных образцов на основе альгината натрия при различных концентрациях сульфата кальция и лимонной кислоты

Примечание: все указанные концентрации рассчитаны в процентах от общего объема раствора, который составляет 100 мл воды.

При измерении водопоглощающей способности гидрогелей на основе альгината натрия, сшитых сульфатом кальция, с добавлением лимонной кислоты, наблюдается заметное увеличение водопоглощения.

Оптимальная концентрация CaSO_4 без добавления ЛК 7% и 8% (от массы альгината натрия) – образцы А3 и А4 соответственно, при данной концентрации наблюдается максимальное водопоглощение.

Добавление лимонной кислоты не только увеличивает сорбционные свойства гидрогелей, но и способствует получению более стабильных к растворению в воде материалов, что указывает на улучшение сшивания реагентов. Как видно из рисунка 1, гидрогели, погруженные в воду на 5 дней, демонстрируют снижение водопоглощения из-за частичного растворения, что подтверждает важность лимонной кислоты в повышении стабильности гидрогелей.

Наибольшую механическую стабильность при нахождении в воде показал образец Б3 (0,07% CaSO_4 , 0,05% ЛК) – 34143% спустя 5 дней. Однако при превышении оптимальной концентрации ЛК (более 5% от массы полимера) наблюдается обратный эффект: избыточное сшивание приводит к уменьшению размера пор и снижению абсорбционной ёмкости, как это видно на примере образца Б4.

Результаты подтверждают перспективность альгината натрия для биомедицинских приложений. Добавление лимонной кислоты улучшает стабильность гидрогелей в водной среде, что делает их пригодными для длительного использования. Это может привести к разработке материалов с улучшенными свойствами для биомедицинских и косметических применений.

Литература

1. Пат. №2508091. Способ получения гидрогеля лечебного назначения / Н.Д. Олтаржевская, М.А. Коровина, В.Н. Никитенкова, Т.С. Хлыстова, И.В. Гусев; заявитель и патентообладатель Москва. ООО «Колетекс»; заявл. 11.10.12; опубл. 27.02.14.

© Ступко Ю.П., Таганбекова З.К., Маркин В.И., 2025

УДК 547.458.82

ВЛИЯНИЕ СОЛЯНОЙ КИСЛОТЫ НА СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ, СШИТЫХ ЯБЛОЧНОЙ КИСЛОТОЙ

Таганбекова З.К., Маркин В.И.

Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия

Гидрогели на основе карбоксиметилцеллюлозы (КМЦ) представляют значительный интерес благодаря своей биосовместимости, способности к набуханию и удержанию воды (до 90% массы). В последние годы активно

исследуются методы сшивания КМЦ поликарбоновыми кислотами, такими как лимонная, для создания материалов с улучшенными абсорбционными и механическими свойствами. В данной работе впервые изучено применение яблочной кислоты (ЯК) в реакции этерификации с КМЦ, катализируемой соляной кислотой (HCl). Этот подход позволяет формировать трёхмерные сети за счёт образования ковалентных связей между карбоксильными группами КМЦ и гидроксилами ЯК, что потенциально усиливает стабильность гидрогеля в различных средах [1].

Синтез проводили в водной среде при 60°C в течении 2 ч с варьированием параметров: соотношения КМЦ:ЯК 186:1 и 5,6:1, соотношения КМЦ: HCl 21,7 : 3,8 : 1 и 16,3 : 3 : 1. В полученных образцах изучена водопоглощающая способность. Результаты сведены в таблице 1.

Таблица 1

Водопоглощающая способность отвержденных образцов на основе карбоксиметилцеллюлозы и яблочной кислоты в присутствии соляной кислоты в течении 2 ч при температуре 60°C при разном соотношении реагентов в 50 мл воды

№ Образца	Содержание КМЦ в % (от массы H ₂ O)	Содержание ЯК в % (от массы КМЦ)	Соотношение КМЦ : ЯК, моль	Соотношение КМЦ : ЯК : HCl, моль	Водопоглощение 1 ч, %	Водопоглощение 24 ч, %
1	10	0.3	186 : 1	-	423	Деградация гидрогеля
2	8	0.3	186 : 1	-	913	Деградация гидрогеля
3	5	0.3	186 : 1	-	1911	Деградация гидрогеля
4	2	0.3	186 : 1	-	755	Деградация гидрогеля
5	5	10	5,6 : 1	-	448	840
6	5	10	5,6 : 1	21,7 : 3,8 : 1	803	805
7	5	10	5,6 : 1	16,3 : 3 : 1	1656	1809

Исходя из полученных данных следует, что при получении гидрогелей на основе КМЦ и ЯК без соляной кислоты с понижением концентрации

КМЦ от 10% до 2% увеличивается водопоглощающая способность, однако данные гидрогели подвергаются деструкции в воде, через 1-4 ч, что затрудняет процесс взвешивания.

Для исследования влияния концентрации яблочной кислоты на свойства полученных полимеров взята концентрация КМЦ 5%, так как видно из таблицы 1, что при данной концентрации гидрогель обладает наибольшим водопоглощением. На первый взгляд увеличение концентрации ЯК понижает водопоглощение при 1 ч, однако как можно заметить, данный образец сохраняет устойчивость к деструкции в воде в течении 24 ч, что говорит об эффективном сшивании КМЦ и яблочной кислоты.

Для исследования каталитической роли HCl в реакции этерификации между полисахаридом и сшивающим агентом использовали концентрацию КМЦ 5% и ЯК 10%, полученный гидрогель (образец 6 – 805%) обладает более устойчивой способностью к растворению в воде в течении 24 ч чем без её добавления, так же можно отметить, что данный образец поглощает максимум воды в 1 ч и сохраняет её всё время, что подтверждает эффективность использования соляной кислоты как катализатора в реакции этерификации. Снижение водопоглощения относительно образца 5 – 840%, также может подтверждать эффективность сшивания, так как при увеличении плотности и уменьшении размера пор полимерной сети влияет понижает сорбционные свойства [1].

При увеличении концентрации соляной кислоты в 5,4 раза позволило повысить водопоглощение более чем в 2 раза (образец 7 – 1809%), однако при избыточном добавлении минеральной кислоты возможен гидролиз полисахарида, что приведет к получению низкомолекулярной фракции и ухудшению свойств гидрогеля.

Таким образом, оптимальные условия для получения стабильной формы гидрогеля на основе КМЦ и яблочной кислоты в присутствии соляной кислоты при температуре 60°C и времени синтеза 2 ч является их мольное соотношение 16,3 : 3 : 1 соответственно, при котором водопоглощение составляет 1809%.

Исследование выполнено в рамках реализации Программы развития Алтайского государственного университета на 2021-2030 годы в рамках реализации программы стратегического академического лидерства «Приоритет 2030», проект «Разработка способов выделения и иммобилизации метаболитов из биомассы нематофаговых грибов для создания антигельминтного ветеринарного препарата».

Литература

1. Tofanica B.M., Mikhailidi A., Samuil C., Ungureanu O.C., Fortuna M.E., Ungureanu E. Advances in Cellulose-Based Hydrogels: Current Trends and Challenges // Gels. – 2024. – Vol. 10, No. 12. – P. 842. DOI: 10.3390/gels10120842.

© Таганбекова З.К., Маркин В.И., 2025

СИНТЕЗ α -АЛЛИЛПРОИЗВОДНЫХ АДДУКТОВ ДИЛЬСА-АЛЬДЕРА ЛЕВОГЛЮКОЗЕНОНА И 1,3-ДИЕНОВ

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

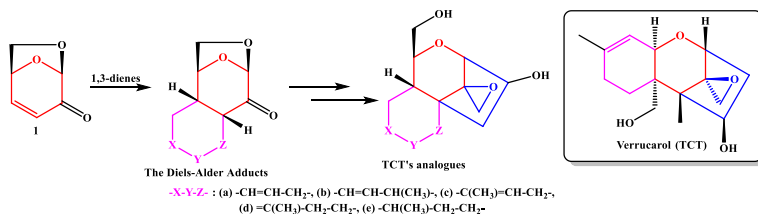
¹Институт химии и защиты в чрезвычайных ситуациях УУНУТ,

Уфа, Россия

²Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Трихотеценовые сесквитерпеноиды – класс соединений, которые продуцируются в основном микроскопическими плесневыми грибами. Они обладают широким спектром биологической активности, такими как противогрибковая, цитотоксическая и фитотоксическая [1]. Ранее нами сообщалось о синтезе модифицированных по трициклическому ядру аналогов трихотеценовых сесквитерпеноидов, в частности веррукарولا [2]. В продолжение исследований в этом направлении с целью получения ключевых соединений для синтеза аналогов трихотеценов, мы изучили реакцию присоединения бромистого аллила к доступным аддуктам Дильса-Альдера левоглюкозенона и 1,3-диенов.

Схема 1



С этой целью в присутствии *t*-BuOK в THF, были получены α -аллилпроизводные **3 а-е**. Следует отметить, что реакции протекали со значительным осмолением, в случае аддуктов Дильса-Альдера левоглюкозенона с бутадиеном **3а** и изомеризованным аддуктом с изопреном **3д**. В случае аддукта левоглюкозенона с пипериленом **3б** и изопреном **3е** после обработки (подкисления 3% раствором HCl до нейтральной среды, экстракции, осушки MgSO_4 и упаривания) из реакционной смеси были выделены продукты восстановительного раскрытия 1,6-ангидромостика **4с, 5б** (Схема 2).

Схема 2

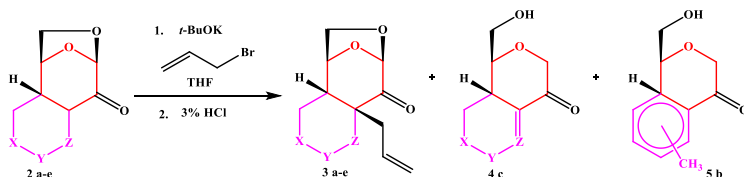
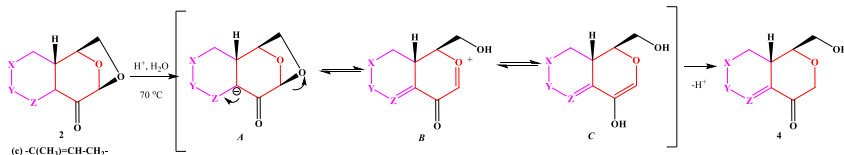


Таблица 1

Исходное соединение 2	Выход продуктов, %		
	3	4	5
(a) -CH=CH-CH ₂	18	-	-
(b) -CH=CH-CH(CH ₃)-	47	-	9
(c) -C(CH ₃)=CH-CH ₂ -	38	39	-
(d) =C(CH ₃)-CH ₂ -CH ₂ -	40	-	-
(e) -CH(CH ₃)-CH ₂ -CH ₂ -	74	-	-

Раскрытие 1,6-ангидромостика с одновременным восстановлением пиранозного цикла в пирановый в аддуктах Дильса-Альдера левоглюкозенона и 1,3-диенов описаны в [4], обнаруженная эпимеризация асимметрического центра в α' -положении к кетогруппе вероятно является следствием енолизации кетогруппы в аддуктах.

Схема 3



Таким образом, осуществлен синтез α -аллилпроизводных аддуктов Дильса-Альдера левоглюкозенона и 1,3-диенов. Полученные α -аллилпроизводные перспективны в направлении синтеза аналогов трихотеновых сесквитерпенов.

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

Литература

- McPhail A.T., Sim G.A. Fungal Metabolites. Part VI. The Structure of Verrucaric Acid: X-Ray Analysis of Verrucaric Acid p-Iodobenzenesulphonate // J. Chem. Soc. C. – 1966. – P. 1394-1406.
- Faizullina L. Kh., Khalilova Yu. A., Karamysheva L. Sh., Salikhov Sh. M., Valeev F.A. The synthetic potential of α,α -diallylcycrene // Mendeleev Commun. – 2022. – V. 32. – P. 546-548.
- Tagirov A.R., Biktagirov I.M., Galimova Yu. S., Faizullina L. Kh., Salikhov Sh. M., Valeev F.A. Opening of the 1,6-Anhydro Bridge with Selective Reduction of the Acetal Moiety in Levoglucosenone and Its Derivatives // Russ. J. Org. Chem. – 2015. – V. 51. P. 569-575.

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

ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ КАРБОКСИМЕТИЛИРОВАНИЯ ДРЕВЕСИНЫ БЕРЁЗЫ ПОСЛЕ КУЛЬТИВИРОВАНИЯ *LENTINULA* *EDODES* С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МИКРОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ

Фельде А.В., Сапегина А.А., Таганбекова З.К.

Алтайский государственный университет, Барнаул, Россия

Химическое модифицирование древесины – перспективное направление создания функциональных материалов. Биопредобработка мицелием *Lentinula edodes* повышает реакционную способность целлюлозы за счет деструкции надмолекулярной структуры, исключая необходимость дополнительной активации. Цель работы – определить влияние предварительной обработки берёзовых опилок мицелием *Lentinula edodes* в течение 1 и 3 месяцев на эффективность карбоксиметилирования с использованием микроволнового излучения (МВИ). Проведен сравнительный анализ модифицированной и исходной древесины, результаты анализа представлены в таблице 1.

Таблица 1

Состав древесины берёзы интактной и обработанной *Lentinula edodes* в течение 1 и 3 месяцев, не подвергнутые карбоксиметилированию

Образец	Влажность, %	Зольность, %	Содержание целлюлозы, %	Содержание лигнина, %
Субстрат на основе древесины берёзы	5,5	1,6	43,5	28,9
Древесина берёзы, обработанная грибами <i>Lentinula edodes</i> в течение 1 месяца	6,4	2,6	39,2	34,8
Древесина берёзы, обработанная грибами <i>Lentinula edodes</i> в течение 3 месяцев	6,5	2,2	34,2	29,4

Из данных таблицы 1 видно, что после обработки древесины грибами показатели влажности и зольности увеличиваются. Содержание целлюлозы уменьшается, так как грибы используют лигноуглеводную часть субстрата (в основном, гемицеллюлозы) в качестве питательной среды для своего роста и развития.

Опилки древесины березы, обработанной грибами *Lentinula edodes*, подвергли карбоксиметилированию с использованием МВИ мощностью 350 и 700 Вт среде изопропанола/воды в течении 30 с для первой и второй стадии соответственно. Все полученные образцы исследованы на растворимость в воде и на процентное содержание карбоксиметильных групп. Все полученные результаты сведены в таблицы 2, 3. Анализ модифицированных образцов показал, что содержание карбоксиметильных групп соответствует теоретически возможным значениям, что свидетельствует об успешном протекании реакции карбоксиметилирования [1, с. 41–43].

Таблица 2

Характеристика карбоксиметилированной древесины березы, обработанной грибами *Lentinula edodes* (срок обработки 1 месяц)

Образец	Растворитель	Мощность МВИ, Вт	КМГ, %	Растворимость, %
1	вода	700	9,63	17,3
2		350	8,51	13,03
3	Пропанол-2	700	12,52	47,9
4		350	10,54	43,5

Содержание карбоксиметильных групп (КМГ) возрастает с увеличением мощности микроволнового излучения. Использование пропанола-2 в качестве растворителя также способствует увеличению содержания КМГ, причем этот фактор оказывает большее влияние, чем мощность излучения. Это важно, поскольку увеличение содержания КМГ повышает растворимость продукта в воде. Наибольшее содержание КМГ наблюдается в образце 3 (пропанол-2, 700 Вт).

Таблица 3

Характеристика карбоксиметилированной древесины березы, обработанной грибами *Lentinula edodes* (срок обработки 3 месяца)

Образец	Растворитель	Мощность МВИ, Вт	КМГ, %	Растворимость, %
5	вода	700	8,49	16,29
6		350	8,20	11,46
7	Пропанол-2	700	12,04	42,74
8		350	10,82	41,6

Для сырья, обработанного в течение 3 месяцев, наблюдается та же зависимость содержания КМГ от мощности МВИ и типа растворителя, что и для сырья, обработанного в течение 1 месяца. Увеличение срока обработки берёзы мицелием *Lentinula edodes* до 3 месяцев не привело к существенному изменению содержания карбоксиметильных групп.

Литература

1. Пат. 2436283 Российская Федерация, МПК A01G1/04. Субстрат для выращивания грибов *lentinula edodes* / Р.А. Карначук, Л.Б. Глухова, Л.О. Соколянская; заявитель и патентообладатель: Государственное образовательное учреждение высшего профессионального образования «Томский государственный университет». – № 2010114398/13; заявл. 12.04.2010; опубл. 20.12.2011.

© Фельде А.В., Сапегина А.А., Таганбекова З.К., 2025

УДК 547.751

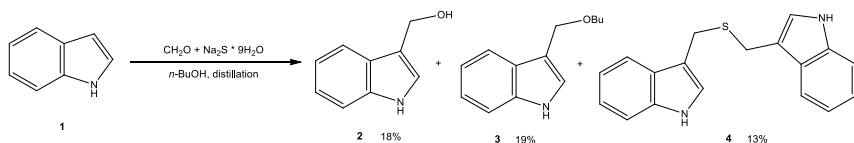
МУЛЬТИКОМПОНЕНТНАЯ РЕАКЦИЯ ИНДОЛА С ФОРМАЛЬДЕГИДОМ И СУЛЬФИДОМ НАТРИЯ

Фролова О.В.¹, Леонтьев Д.В.², Ахметова В.Р.²

¹Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Уфа, Россия

²Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Известен синтез ди(1*H*-индол-3-ил-метил)сульфида **4** кипячением алкалоида - 3-диметиламинометилиндола (грамина) с сульфидом натрия [1] или тиоацетатом калия [2] в воде с высоким выходом. Мы изучили мультикомпонентный синтез целевого продукта **4** с участием более доступного и дешевого исходного соединения - индола **1**. Оказалось, что реакция **1** с формальдегидом и сульфидом натрия в кипящей воде в соотношении реагентов 2 : 2 : 1 селективно дает бис-индолилметан. Вместе с тем, мультикомпонентная реакция с отгоном бутанола проходит не селективно, в результате чего получили смесь индол-3-ил-карбинола **2**, его бутилового эфира **3** и целевого продукта **4** в соотношении ~ 1 : 1 : 0.7.



Соединения **2-4** были охарактеризованы ¹H, ¹³C-ЯМР спектроскопией и масс-спектрометрией. Продукты **3** и **4** обладают антиоксидантными свойствами [3,4].

Работа выполнена в рамках госзадания FMRS-2025-0041

Литература

1. Licari, J.J.; Dougherty, Gregg. (1954). Reactions of Gramine with Sulfur Compounds. Journal of the American Chemical Society, 76(15), 4039–4040. doi:10.1021/ja01644a060
2. Eric Benghiat; Peter A. Crooks. (1983). Synthesis of s-3-indolemethyl derivatives of 5'-deoxy-5'-thioadenosine., 20(2), 423–425. doi:10.1002/jhet.5570200229

3. Beata Jasiewicz; Weronika Kozanecka-Okupnik; Michał Przygodzki; Beata Warżajtis; Urszula Rychlewska; Tomasz Pospieszny; Lucyna Mrówczyńska; (2021). Synthesis, antioxidant and cytoprotective activity evaluation of C-3 substituted indole derivatives. Scientific Reports, (11:15425). doi:10.1038/s41598-021-94904-z

4. Claudio C. Silveira, Samuel R. Mendes, Josemar R. Soares, Francine N. Victoria, Débora M. Martinez, Lucielli Savegnago (2013) Synthesis and antioxidant activity of new C-3 sulfenyl indoles. Tetrahedron Letters, 36(4), 4926-4929. <https://doi.org/10.1016/j.tetlet.2013.07.004>

© Фролова О.В., Ахметова В.Р., Леонтьев Д.В., 2025

УДК 547.8+542.97

СИНТЕЗ НОВЫХ КРЕМНИЙ-СОДЕРЖАЩИХ ПЕРОКСИДОВ

Ишмухаметова И.Р.¹, Хайруллина А.А.²,

Гарипова Л.А.², Махмудиярова Н.Н.¹

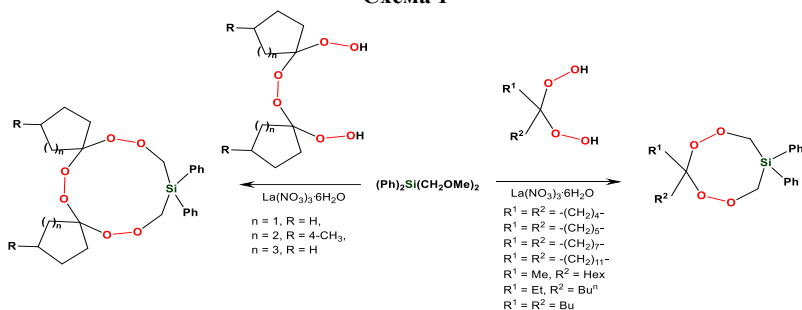
¹Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Радикальная полимеризация – один из наиболее востребованных методов получения полимерных материалов в мире, где в качестве инициаторов часто используют пероксидные соединения [1]. Кремнийсодержащие органические пероксиды широко применяются при получении полимеров, в качестве реагентов гидроксирования, пероксидирования и окисления.

В рамках исследования впервые осуществлен синтез циклических 8- и 11-членных кремнийсодержащих ди- и трипероксидов с высокими выходами и селективностью реакцией *гем*-бисгидропероксидов с *бис*(метоксиметил)дифенилсианом с участием $\text{La}(\text{NO}_3)_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ в качестве катализатора (схема 1).

Схема 1



Литература

1. Mishra M.K., Yagci Y. Handbook of Vinyl Polymers: Radical Polymerization, Process, and Technology. Taylor & Francis Group. Boca Raton, 2009. – 746 p.

© Ишмухаметова И.Р., Хайруллина А.А., Гарипова Л.А.,
Махмудиярова Н.Н., 2025

УДК 54.057

СИНТЕЗ ПОЛИИЗОБУТИЛЕНСУКЦИНИМИДА

Хаметчина А.Р.¹, Алексанян Д.Р.^{1,2}, Савеленко В.Д.^{1,2}, Ершов М.А.^{1,2}

¹ РГУ нефти и газа (НИУ) им. И.М. Губкина, Москва, Россия

² ЦМНТ, Москва, Россия

Полиизобутиленисукцинимид (ПИБСИ) - это эффективная диспергирующая присадка, используемая в смазочных маслах. Она помогает поддерживать чистоту двигателя, предотвращая образование отложений и нагара.

ПИБСИ - это продукт реакции полиизобутилена с малеиновым ангидридом. Молекула присадки обладает способностью удерживать загрязнения и продукты окисления в диспергированном состоянии, предотвращая их оседание и образование отложений.

Синтез проводили по следующей схеме: первая стадия взаимодействие малеинового ангидрида, МА с фракцией полиолефинов (ПИБ) - полиизобутилен. Схема реакции представлена на рисунке 1. Условия проведения синтеза: температура 206°C, продолжительность 10 ч, мольное соотношение МА:олефины 1,3:1 (рассчитывалось, исходя из массовой доли олефинов с концевой двойной связью). Синтез проводили при массовом соотношении МА:ПИБ = 1,1:20.

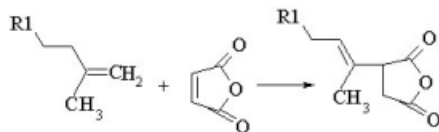


Рис. 1. Схема реакции малеинового ангидрида с полиизобутиленом

Вторая стадия: взаимодействие алкенилantarного ангидрида (АЯА) с моноэтанолмином (МЭА). Схема реакции представлена на рисунке 2. Соотношение АЯА:МЭА = 1:1. Смесь нагревали до 150°C и выдерживали при этой температуре в течение 3 ч при постоянном перемешивании. Синтез полиалкенилсукцинимидов проводили при массовом соотношении АЯА:МЭА = 40:4.

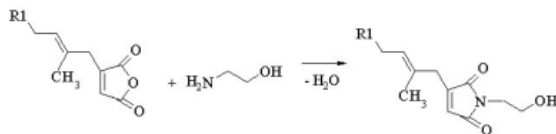


Рис. 2. Схема реакции алкенилянтарного ангидрида с моноэтаноламином

По результатам двухстадийных синтезов были получены образцы присадок, представляющие собой полиалкенилсукцинимиды.

Содержание активного вещества в алкенилянтарном ангидриде определяли хроматографически по количеству непрореагировавшего ПИБ, элюированного петролейным эфиром из хроматографической колонки с силикагелем, пропитанным алкенилянтарным ангидридом.

Процесс амидирования, наблюдаемый с помощью инфракрасной спектроскопии (ИК-спектроскопии), представляет собой динамическое изменение молекулярной структуры, отражающееся в изменении интенсивности различных полос поглощения. На начальных этапах реакции мы наблюдаем нарастание интенсивности характерных полос поглощения, присущих амидному фрагменту молекулы. Эти полосы появляются в области 1560 и 1640 см^{-1} . Появление этих полос свидетельствует об образовании амидных связей ($-\text{CONH}-$). Однако, по мере протекания реакции, интенсивность этих полос не только прекращает расти, но и начинает уменьшаться. Это указывает на то, что амидный фрагмент претерпевает дальнейшие превращения.

Одновременно с уменьшением интенсивности полос амидного фрагмента, мы наблюдаем увеличение интенсивности других полос, характерных для имидного фрагмента. Эти полосы расположены в областях 1703 и 1773 см^{-1} . Появление этих новых полос указывает на образование циклических имидов, в частности, пятичленных циклов ($-\text{CO-N-CO}-$), которые являются продуктами дальнейшей реакции. Структура этих циклов предполагает присутствие карбонильных групп (C=O), поглощение которых в ИК-спектре и проявляется в указанных диапазонах. Важным подтверждением этого превращения служит также усиление полосы поглощения в области 1145 см^{-1} , которое соответствует валентным колебаниям связи C-N . Рост интенсивности этой полосы однозначно указывает на увеличение числа связей C-N , что является прямым следствием перехода от амидной к имидной структуре.

Литература

1. Силин М.А. и др. Синтез и испытание полиалкенилсукцинимидов как компонентов моющих присадок к моторному топливу // Нефтехимия. – 2012. – Т. 52. – №. 4. – С. 304-304.

2. Майорова Е.И., Бакунин В.Н. Инфракрасная спектроскопия как метод исследования структуры присадок сукцинимидного типа //Вестник Полоцкого государственного университета. Серия В. Промышленность. Прикладные науки. – 2023. – №. 1 (47). – С. 88-94.

© Хаметчина А.Р., Алексанян Д.Р., Савеленко В.Д.,
Ершов М.А., 2025

УДК 577.113.3

СИНТЕЗ И АНТИПРОЛИФЕРАТИВНАЯ АКТИВНОСТЬ
N⁶-[3-(ТРИФТОРМЕТИЛ)АНИЛИН]-5'-ДЕЗОКСИ-5'-[4-АРИЛ-(1,2,3)-
ТРИАЗОЛ-1-ИЛ]-β-D-РИБОФУРАНОЗИЛПУРИНОВ

Ханчевский М.А.

Институт биоорганической химии НАН Беларуси, Минск, Беларусь

Производные 1,2,3- и 1,2,4-триазолов обладают широким спектром биологической активности, включая противоопухолевую, антивирусную и антимикробную [1].

Daligaux, Р. с соавторами получили новые 5'-триазолсодержащие конъюгаты гуанозина с арилалклинами, как потенциальные ингибиторы гуанозин-дифосфо-d-маннозо пирофосфорилазы (GDP-MP). Значение IC₅₀ 4-(3-нитробензил)-1,2,3-триазол-5'-замещенного гуанозина в отношении *Leishmania donovan*, составило 8.6 μM [2].

Цель работы разработать подход к синтезу и провести оценку антипролиферативной активности конъюгатов N⁶-замещенных пуриновых рибонуклеозидов с 4-арил-1,2,3-триазолами при C5'-атоме фуранозы.

В ходе исследования использовались сухие и перегнанные растворители. Выделение соединений осуществляли методом колоночной хроматографии на силикагеле. Полученные производные были охарактеризованы методами ЯМР-спектроскопии и масс-спектрометрии. Оценка антипролиферативной активности проводили в отношении опухолевой клеточной линий человека К-562. В качестве соединения сравнения использовали 5-фторурацил (5-FU).

Из легкодоступного инозина (1) ацилированием и последующим хлорированием получен 6-хлор-рибонуклеозид 2 с выходом 90% [3]. Нуклеофильным замещением хлора 3-(трифторметил)анилином синтезирован N⁶-арил-рибонуклеозид 3. Удалением ацетильных защит у производного 3 и последующей защитой 2',3'-гидроксильных групп получен рибонуклеозид 5. Мезилирование 5 давало промежуточный рибонуклеозид 6 из которого в результате нуклеофильного замещения мезилата азидом натрия в ДМФА синтезирован азид 7 с выходом 72%. Азид

7 использовали для синтеза конъюгатов с 4-арил-1,2,3-триазолом (**8a-c**) с использованием реакций CuAAC. В качестве катализатора был использован комплекс бромида (I) меди с трифенилфосфинем в дихлорметане [4]. Особенность используемого катализатора $\text{CuBr}(\text{PPh}_3)_3$ заключается в отсутствии основания либо аскорбата натрия (в классическом катализе Шарплеса-Фокина), что позволяет избежать побочных реакций.

Удалением в кислых условиях 2',3'-изопропилиденовой защитной группы у производных **8a-c** получены целевые рибонуклеозиды **9a-c** (Рис.1).

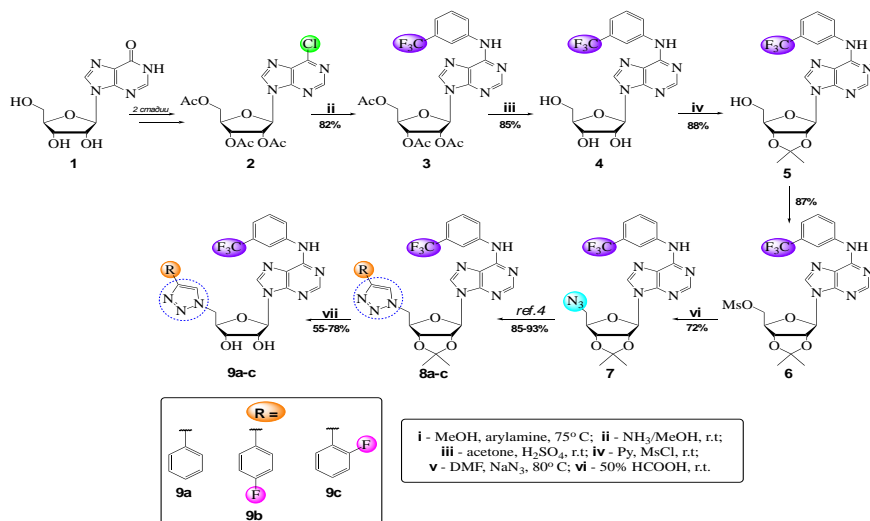


Рис. 1. Схема синтеза N^6 -[3-(трифторметил)анилин]-5'-деокси-5'-[4-арил-(1,2,3)-триазол-1-ил]- β -D-рибофуранозилпуринов

Результаты оценки антипролиферативной активности рибонуклеозидов **9a-c** представлены в таблице 1.

Таблица 1

Значения IC_{50} для полученных нуклеозидов **9a-c**

Соединения	9a	9b	9c	5-FU
IC_{50} (μM)	33.54	25.59	30.40	27.34

В результате многостадийного синтеза были получены 4-арил-1,2,3-триазолсодержащие конъюгаты модифицированного пуринового рибонуклеозида. Оценка антипролиферативной активности показала, что полученные соединения обладают умеренной антипролиферативной

активностью в отношении клеточной линии K-562. Значение IC_{50} конъюгата **9b** ниже, чем у 5-фторурацила.

Литература

1. Dheer, D. Medicinal attributes of 1,2,3-triazoles: Current developments / D. Dheer, V. Singh, R. Shankar // Bioorg. Chem. – 2017. – Vol. – P. 30-54.
2. Daligaux, P. Simple and efficient synthesis of 5'-aryl-5'-deoxyguanosine analogs by azide-alkyne click reaction and their antileishmanial activities / P. Daligaux [et al.] // Mol. Divers. – 2016. – Vol. 20. – P. 507-519;
3. Ikehara, M.A Versatile Method for Replacement of 6-Hydroxyl Group of Purine Nucleoside / M. Ikehara, H. Uno, F. Ishikawa // Chem. Pharm. Bull. – 1964. – Vol. 12, № 3. – P. 267-271.
4. Lal, S. $[CuBr(PPh_3)_3]$ for azide-alkyne cycloaddition reactions under strict click conditions / S. Lal, S. Diez-Gonzalez // J. Org. Chem. – 2011. – Vol. 76. – P. 2367-2373.

© Ханчевский М.А., 2025

УДК 547.781 + 577.112.34

ПОЛУЧЕНИЕ И МОДИФИКАЦИЯ 2-МЕТИЛБЕНЗИМИДАЗОЛА

Цикалова В.Н., Поддубов А.И., Чалова Е.С.

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

Синтез биологически активных веществ получил широкое распространение во второй половине 20 века. Бензимидазол и его производные представляют интерес поскольку обладают достаточно высокой биологической активностью. И хотя синтез бензимидазолов достаточно хорошо изучен, новые подходы в его получении представляют интерес и в настоящее время.

В данной работе за основу метода получения 2-метилбензимидазола был взят синтез 1,2-фенилендиамина **1** с уксусной кислотой, проходящий в присутствии неорганической кислоты [1]. Это частный случай получения 2-замещенных бензимидазолов на основе карбоновых кислот или их производных. В качестве сравнения были использованы соляная и фосфорная кислоты. Уксусная кислота в обоих синтезах была использована в 1,5-кратном избытке относительно 1,2-фенилендиамина (рис.1). Концентрированная соляная и борная кислоты были взяты в каталитических количествах. После обработки синтезов выходы 2-метилбензимидазола **2** составили 70% и 84% соответственно.

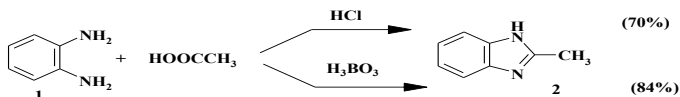


Рис. 1. Схема синтеза 2-метилбензимидазола 2

На основе полученного 2-метилбензимидазола был синтезирован 1,2-диметилбензимидазол. Реакция алкилирования бензимидазолов, как и имидазолов возможна в щелочной среде. В качестве алкилирующих средств применяют как галогеналкилы, так и диалкилсульфаты. В нашей работе был использован диметилсульфат, взятый в эквимольных количествах по отношению к исходному 2-метилбензимидазолу 1. Реакцию проводили в среде 40%-ного раствора гидроксида натрия (рис.2). После выделения целевого вещества 3 его выход составил 77%.

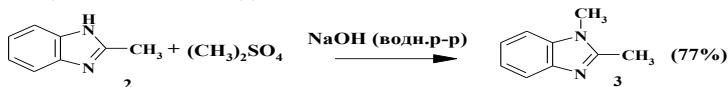


Рис. 2. Схема получения 1,2-диметилбензимидазола 3

Литература

1. Пожарский А.Ф., Анисимова В.А., Цупак Е.Б. Практические работы по химии гетероциклов. – Ростов-на-Дону: Изд-во Ростовского университета, 1988. – С. 78–101.

© Цикалова В.Н., Поддубов А.И., Чалова Е.С., 2025

УДК 547.72:547.796.1

СИНТЕЗ И ФУНГИЦИНАЯ АКТИВНОСТЬ ТЕТРАЗОЛИЛСУЛЬФАНИЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 2(5H)-ФУРАНОНА И 3-ПИРРОЛИН-2-ОНА

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

Казанский (Приволжский) федеральный университет, Казань, Россия

Разработка подходов к синтезу и создание новых гибридных молекулярных систем, содержащих несколько фармакофорных фрагментов, находится в фокусе внимания современной органической и медицинской химии. Целью данной работы явился синтез новых тетразолильных производных 2(5H)-фуранона из простых и доступных исходных субстратов, а также исследование их антибактериальной и противогрибковой активности.

На первой стадии получена серия псевдоэфиров из коммерчески доступной мукохлорной кислоты по реакции этерификации различными спиртами в условиях кислотного катализа. Тетразолилсульфанильный фрагмент был введен в лактонный цикл путем региоселективного тиолирования с участием 1-фенил-5-меркаптотетразола в присутствии

эквиволярных количеств триэтиламина. В результате с высокими выходами получены 5-алкокси-4-[(1-фенил-1*H*-тетразол-5-ил)сульфанил]-3-хлор-2(5*H*)-фураноны, которые далее при взаимодействии с аммиаком, первичными алифатическими аминами и аминоспиртами превращены в соответствующие тетразолилсульфанильные производные *N*-гетероцикла ряда 3-пирролин-2-она. Строение всех новых синтезированных соединений охарактеризовано методами спектроскопии ИК, ЯМР ^1H и ^{13}C , для кристаллических образцов нескольких тетразолов ряда фуранона и пирролинона получены данные метода рентгеноструктурного анализа.

Изучена способность синтезированных тетразолов подавлять рост бактерий *S. aureus* и *E. coli*, дрожжей *C. albicans* и ряда мицелиальных грибов, являющихся причиной биодеструкции строительных материалов, влажных поверхностей в бытовых и промышленных помещениях. Определены МПК соединений в отношении бактериальных и грибковых культур. Выявлены 4 соединения, которые проявили фунгицидную активность по отношению к *Aspergillus niger*, *Fusarium solani* и *Candida albicans*, 2 тетразола показали активность также в отношении грибов *Alternaria alternata*. Все соединения обладают цитотоксичностью в отношении клеток млекопитающих, однако могут представлять интерес в качестве промышленных фунгицидов и антисептиков для строительных материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 23-73-10182.

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

УДК 547.297:547.572

КОНДЕНСАЦИИ ХЛОРИСТОГО ХЛОРАЦЕТИЛА С 4-АМИЛФЕНОЛОМ И 4-Трет-АМИЛФЕНОЛОМ

Чориев А.У.¹, Абдушукуров А.К.²

¹Каршинский государственный университет, Карши, Узбекистан

²Национальный университет Узбекистана им.М. Улугбека,
Ташкент, Узбекистан

Для осуществления конденсации хлористого хлорацетила с 4-амилфенолом необходимо применять большой избыток AlCl_3 (1,3-2 г/мол. на 1 мол. хлористого хлорацетила) и вести реакцию при более высокой температуре (110-140°).

В результате многих опытов найдены оптимальные условия для каждой конденсации, дающие очень хорошие выходы (80-94 % теории) смеси ацилированных 4-амилфенолов. Увеличение количества трифламид кобальта (II) и повышение температуры реакции всегда вызывают накопление полиацилированных продуктов. Очень характерно, что при

образовании диацилированных фенолов мы всегда получали смесь орто-изомеров.

Конденсации с 4-трет-амилфенолом идут легче, чем с 4-амилфенолом, и дают лучшие выходы. Следует особо остановиться на опытах с хлорацетилхлоридом. На этом же основании мы считаем, что многие полиацилированные фенолы, полученные при конденсациях, являются вторичными продуктами изменения моно- ацилфенолов.

Так, при конденсации хлористого хлорацетила с 4-амилфенолом кроме 2-гидрокси-5-амилхлорацетафенона выделены: полиацилированные фенолы. Строение этих фенолов, нами установлено ИК- и ЯМР- спектроскопии.

Опыты, проведенные в две стадии (получение смешанного алкоголята кобальта и нагревание его с 4-амилфенолом или 4-трет-амилфенолом), дали положительные результаты, хотя выходы ацилированных продуктов и были пониженными. Ни в одном случае нами не наблюдалось образования неопределенных углеводов. Необходимость более жестких условий для проведения конденсаций хорошо согласуется с большей устойчивостью фенолятов кобальта фенолов [1].

Ацилирование 4-амилфенола или 4-трет-амилфенола хлорацетилхлоридами в присутствии трифламид кобальта (II) возможно. В оптимальных условиях образуется смесь ацилированных фенолов с выходами 80-94% теории.

Литература

1. Кучин А.В., Шумова О.А., Чукичева И.Ю. Алкилирование фенола а- и б-пиненами с участием фенолята алюминия // Известия Академии наук. Серия химическая. 2013. № 2. С. 451-455.

© Чориев А.У., Абдушукуров А.К., 2025

УДК 547.94;843.2

1,3-ДИПОЛЯРНОЕ ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЕ АЗОМЕТИНИЛИДОВ В РЯДУ ПРОИЗВОДНЫХ МЕТИЛЦИТИЗИНА

Шайдуллин Д.Ф.², Ковальская А.В.¹, Лобов А.Н.¹, Цыпышева И.П.¹

¹Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

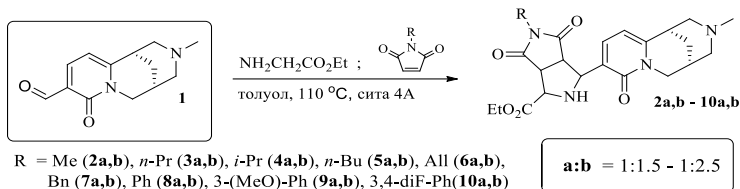
²Уфимский университет науки и технологий (Бирский филиал),
Бирск, Россия

Одним из эффективных способов синтеза замещенных пирролидинов, являющихся составной частью многих природных и биологически активных соединений [1, 2], является реакция 1,3-диполярного циклоприсоединения азометинилидов к подходящим диполярофилам. Многокомпонентный подход, основанный на *one pot* взаимодействии альдегидов, аминокислот и имидов малеиновой кислоты, позволяет в одну стадию получать соответствующие бициклические тетрагидропирроло[3,4-с]пиррол-

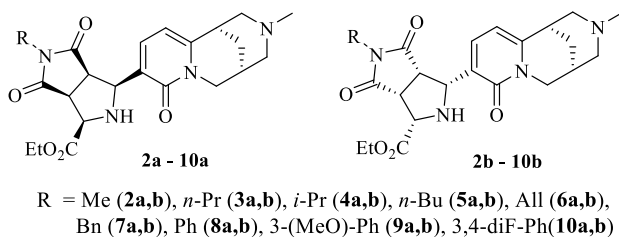
1,3(2H,3aH)-дионы в мягких условия, без предварительного выделения исходных азометинов [3].

С целью синтеза новых производных хинолизидинового алкалоида метилцититизина, несущих в 2-пиридоновой части молекулы гетероциклические фрагменты, осуществлено взаимодействие 9-формилметилцититизина **1**, полученного согласно [4], с этиловым эфиром глицина и *N*-замещенными имидами малеиновой кислоты в кипящем толуоле в присутствии молекулярных сит 4Å (схема 1).

Схема 1.



Пары диастереомерных производных метилцититизина **2a,b-10a,b**, содержащих в 9 положении 2-пиридонового ядра 2-замещенные тетрагидропирроло[3,4-с]пиррол-1,3(2H,3aH)-дионовые гетероциклические фрагменты получены с выходами от 72 до 98%; соотношение диастереомеров **a:b** \approx 1:1.5÷1.2.5. Диастереомеры **a** и **b** выделены в индивидуальном виде с помощью колоночной хроматографии. Стереохимия новых асимметрических центров установлена на основании данных ЯМР спектроскопии ^1H , ^{13}C и ^{15}N (рис. 1). Для диастереомеров аллильного производного **6** с помощью рентгеноструктурного анализа была установлена абсолютная конфигурация хиральных центов.



По результатам анализа данных ЯМР для выборки соединений **2a,b-10a,b** были предложены спектральные критерии дифференциации стереохимической структуры продуктов циклоприсоединения.

Литература

1. Poyraz S., Döndas H.A., Döndas N.Y., Sansano J.M. Recent insights about pyrrolidine core skeletons in pharmacology // Front. Pharmacol. – 2023. – Vol. 14. – P. 1239658.

2. Bhat C., Tilve S.G. Recent advances in the synthesis of naturally occurring pyrrolidines, pyrrolizidines and indolizidine alkaloids using proline as a unique chiral synthon // RSC Adv. – 2014. – Vol. 4. – P. 5405.
3. Sengupta T., Khamaru S., Samanta S., Mait D. K. Synthetically useful noncatalytic strategy: A stereocontrolled rapid cyclization of a three-component assembly to hexahydropyrrolizines // Chem. Commun. – 2013. – Vol. 49. – P. 9962.
4. Petrova P. R., Kovalskaya A. V., Lobov A. N., Tsypysheva I. P. Direct formylation of 2-pyridone core of 3-N-methylcytisine via Duff reaction; synthesis of 9-enyl, 9-ynyl and 9-imino derivatives // Nat. Prod. Res. – 2019. – Vol. 33. – P. 1897.

© Шайдуллин Д.Ф., Ковальская А.В., Лобов А.Н., Цыпышева И.П., 2025 г.

УДК 547.729.21.

СИНТЕЗ АМИДА НА ОСНОВЕ N,N'-ДИМЕТИПРОПИЛЕНДИАМИНА-1,3 И 4-ХЛОРМЕТИЛ-1,3-ДИОКСОЛАНА

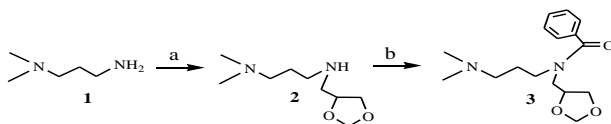
Шарифов М.Х., Медведева Н.И.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа,
Россия*

Синтез новых органических потенциально биологически активных веществ (БАВ), изучение их активности и взаимосвязи, структура, биологическое действие является актуальной задачей современной химии [1]. Весьма перспективным направлением является поиск новых БАВ в ряду замещенных амидов. В данной работе, за основу был взят N,N'-диметилпропилендиамин-1,3 (**1**), который используется в синтезе широко известного бактерицидного соединения мирамистина [2].

В связи с этим, представлял интерес синтез амида соединения (**1**), содержащего 1,3-диоксациклоалкановый фрагмент, обладающий биологической активностью [3].

Схема 1



Условия и реагенты: а. C₆H₆, 90 °С, 24 ч; б. C₆H₅COCl, CH₂Cl₂, 50 °С, 20 ч.

Первая стадия (схема 1) заключалась в образовании вторичного амина (**1**) конденсацией с 4-хлорметил-1,3-диоксоланом (**2**), выход составил 90%. Далее был проведен синтез амида (**3**) с использованием хлорангидрида бензойной кислоты (83%). Строение производных (**2-3**) подтверждено данными ЯМР ¹³С и ¹Н.

Таким образом, нами был получен амид, на основе N,N'-диметилпропилендиамин-1,3 и 4-хлорметил-1,3-диоксолана, потенциально обладающий бактерицидной активностью.

Литература

1. Бояршинов В.Д., Михалев А.И., Ухов С.В., Юшкова Т.А., Махмудов Р.Р. Фундаментальные исследования, - 2014.- №9.- С.606-610.
2. Чупахин Е.Г., Шамин И.В. Universum: химия и биология : электрон. научн. журн. - 2021. – 6(84). DOI 10.32743/UniChem.2021.84.6.11843
3. Raskil'dina G.Z., Sultanova R.M., Zlotskii S.S. Rev. and Adv. in Chem. – 2023. – No.13. – P. 15-27.

© Шарифов М.Х., Медведева Н.И., 2025

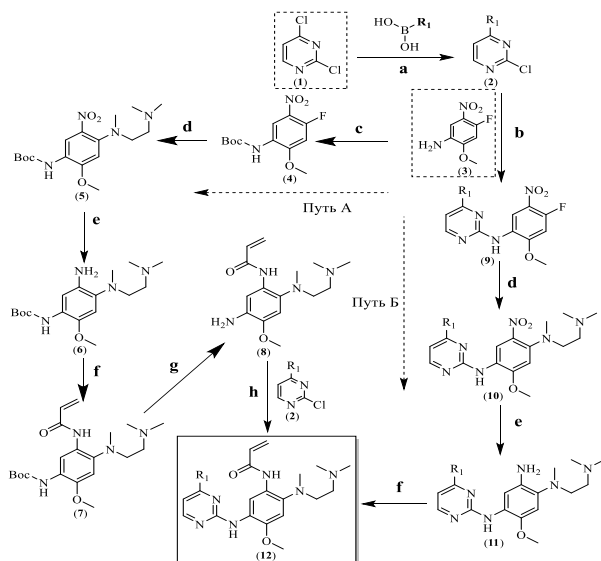
УДК 615.277.3: 547.853

ВЫБОР ОПТИМАЛЬНОГО МЕТОДА СИНТЕЗА ОСИМЕРТИНИБА И ЕГО АНАЛОГОВ

Швецов А.Б., Семёнов А.В.

Мордовский государственный университет, Саранск, Россия

Осимертиниб и его аналоги относятся к третьему поколению препаратов, применяемых при лечении лекарственно-устойчивого немелкоклеточного рака легких. За счёт особенностей структуры они способны ингибировать активность рецептора EGF с двойной мутацией L858R/T790M по механизму образования ковалентной связи с цистеином 797. Их оптимальный синтез может быть реализован по двум основным путям, представленным на схеме:



Реагенты и условия:

a. R_1 = арил или (гет)арил; $Pd(PPh_3)_4$ кат, Na_2CO_3 , диоксан-вода, 75-90 °C, выход: 50–80% [1].

b. HCl кат, изобутанол, 95-105 °C, выход: 80-90% [2].

c. Woc_2O , NEt_3 , 4-диметиламинопиридин, метиленхлорид, 0 °C, выход: 60–70% [3].

d. N^1, N^1, N^2 -триметилэтан-1,2-диамин (или другой вторичный амин), NEt_3 , диметилформамид, 60-70°C, выход: 90–100% [3].

e. H_2 , Pd/C, метанол, 30-35 °C, выход: 90–100% [3].

f. (1) 3-Хлопропаноил хлорид, ацетон-вода, (2) NEt_3 , 35-40 °C, хроматографическая очистка на силикагеле, выход: 30–50% [4].

g. CF_3COOH , метиленхлорид, 0→25 °C, выход: 70–80% [3].

h. $TsOH \cdot H_2O$, изобутанол, 80-90 °C, хроматографическая очистка на силикагеле, выход: 50–60% [3].

К преимуществам пути А можно отнести то, что при разовой наработке достаточного количества интермедиата (8) сокращается время при наработке серии целевых соединений (12). К его недостаткам относятся: необходимость проведения двух хроматографических очисток, необходимость введения и снятия защитной группы и использование метиленхлорида - хлорированного токсичного растворителя. Преимуществом пути Б является применение однократной хроматографической очистки на финальном этапе. Однако при наработке серии соединений (12) приходится каждый раз воспроизводить всю синтетическую цепочку. Суммарно выход и чистота конечных продуктов, получаемых по пути Б, выше, что делает этот синтетический путь предпочтительным для масштабирования.

Литература

1. Almond-Thynne J., Blakemore D.C., Pryde, D. et al. Site-selective Suzuki–Miyaura coupling of heteroaryl halides – understanding the trends for pharmaceutically important classes // Chem. Sci. – 2017. – Vol. 8. – № 1. – P. 40-62. doi:10.1039/c6sc02118b
2. Finlay M.R.V., Anderton M., Ashton S. et al. Discovery of a Potent and Selective EGFR Inhibitor (AZD9291) of Both Sensitizing and T790M Resistance Mutations That Spares the Wild Type Form of the Receptor // J. Med. Chem. – 2014. – Vol. 57. – № 20. – P. 8249-8267. doi:10.1021/jm500973a
3. Пат. 3173412 A1 EP. 2,4-disubstituted 7h-pyrrolo[2,3-d]pyrimidine derivative, preparation method and medicinal use thereof / Jin Y., Zhou F., Lei J., Wen C., Zhang Z., He X. Заявл. 24.07.2015. Оpubл. 31.05.2017.
4. Пат. 4119551 A1 EP. 2-(2,4,5-substituted-anilino)pyrimidine compounds / Ward R., Finlay M., Kadambar V., Chintakuntla C., Murugan A., Chuaqui C., Redfearn H. Заявл. 25.07.2012. Оpubл. 18.01.2023.

© Швецов А.Б., Семёнов А.В., 2025

ИССЛЕДОВАНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИЙ, ДОПИРОВАННЫХ β -ДИКЕТОНАТОМ ДИФТОРИДА БОРА

Щёлоков А.И.^{1,2}, Заводянский М.А.¹¹Институт химии ДВО РАН, Владивосток, Россия²Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия

β -дикетонаты дифторида бора – это класс органических люминофоров, представляющих собой хелаты, в которых в качестве лиганда выступает енольная форма β -дикетона, а в качестве комплексообразователя — катион дифторида бора. Различные подклассы β -дикетонатов дифторида бора, такие как куркуминоиды, обладают высокими квантовыми выходами и биологической совместимостью с организмами [1], что делает их полезными в фотонике и биовизуализации. Включение люминофора в полимерную матрицу способно еще больше увеличить интенсивность люминесценции и повысить фотостабильность [2]. Таким образом, получение полимерных люминесцентных композиций открывает новые возможности использования люминофоров.

Целью работы является исследование спектральных свойств полимерных композиций, допированных несимметричным β -дикетонатом дифторида бора с метокси-группой. В качестве полимерных матриц использованы полистирол (ПС), поликарбонат (ПК), полиметилметакрилат (ПММА) и полилактид (ПЛА), различающиеся величиной полярности. Полярность полимерной матрицы оценена по значению диэлектрической проницаемости и изменяется в ряду: ПС (2,6) < ПК (2,8) < ПММА (3,3) < ПЛА (3,95). В качестве люминофора использован 2,2-дифтор-6-(4'-метоксифенил)-4-метил-1,3,2-диоксаборин (Рис. 1).

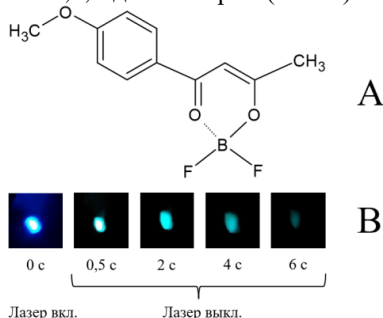


Рис. 1. Структурная формула 2,2-дифтор-6-(4'-метоксифенил)-4-метил-1,3,2-диоксаборина (А) и фотографии ПЛА пленки (В) при концентрации люминофора 0,5 % под облучением лазера ($\lambda=405$ нм) и после удаления облучения

Все пленки характеризуются интенсивной синей флуоресценцией (≈ 400 нм) и имеют максимумы поглощения в области 360 нм. При изменении полимерной матрицы максимумы люминесценции практически не изменяются, что указывает на отсутствие сольватохромизма. ПЛА пленка обладает длительным визуально наблюдаемым (≈ 7 секунд) зеленым послесвечением ($\lambda = 506$ нм), индуцируемым лазером ($\lambda = 405$ нм) при комнатной температуре в течение 1-2 секунд (Рис. 1). Послесвечение является проявлением замедленной флуоресценции Р-типа, вызванной образованием эксимеров, чему способствует плоское строение β -дикетонатов [3] и высокая концентрация люминофора в полимерной матрице. Кинетика затухания послесвечения приблизительно описывается экспоненциальной зависимостью. Учитывая высокую растворимость и биологическую совместимость ПЛА, данный материал может быть полезен для медицинских приложений, например, биовизуализации.

Литература

1. Fluorescent boron difluoride curcuminoides as perspective materials for bio-visualization / A.G. Mirochnik [et al.] // *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. – 2023. – Vol. 291. – P. 122319.
2. Xing, D. Synthesis and fluorescence properties of some difluoroboron β -diketonate complexes and composite containing PMMA / D. Xing, Y. Hou, H. Niu // *Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy*. – 2018. – Vol. 193. – P. 71-77.
3. Borondifluoride complexes of hemicurcuminoids as bio-inspired push–pull dyes for bioimaging / E. Kim [et al.] // *Organic & Biomolecular Chemistry*. – 2016. – Vol. 14, № 4 – P. 1311-1324.

© Щёлоков А.И., Заводянский М.А., 2025

УДК 66.094.942:66.095.132

СИНТЕЗ МЕТИЛОВЫХ ЭФИРОВ ЖИРНЫХ КИСЛОТ ИЗ РАСТИТЕЛЬНОГО МАСЛА

Щербатова Д.С.¹, Алексанян Д.Р.^{1, 2}, Савеленко В.Д.^{1, 2}, Ершов М.А.^{1, 2}

¹РГУ нефти и газа (НИУ) им. И.М. Губкина, Москва, Россия

²ЦМНТ, Москва, Россия

В настоящее время судоходство считается одним из самых масштабов видов транспорта, на долю которого приходится около 3% от общего объема выбросов парниковых газов [1]. Метилловые эфиры жирных кислот можно использовать в качестве биокomпонентов судового топлива, что поможет снизить зависимость от ископаемых источников энергии и уменьшить выбросы парниковых газов.

Оптимальным сырьем для производства биокomпонентов являются растительные масла, в частности подсолнечное масло, смешанное с жирными кислотами таллового масла для увеличения содержания свободных жирных кислот в сырье. Синтез включает реакции этерификации

и перееэтерификации в присутствии метанола. Схемы реакций приведены на рисунке 1. В качестве гетерогенных катализаторов были протестированы КУ-23-ФПП-А, КУ-2ФПП, катионит ЭМ, Amberlyst 15. Наибольшая конверсия (~90%) была достигнута при использовании Amberlyst 15. К основным преимуществам гетерогенных катализаторов относится высокая активность, стабильность, селективность, легкость отделения от реакционной массы.

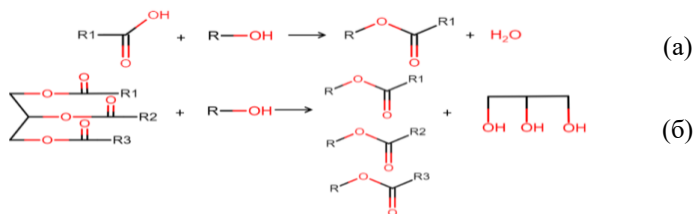


Рис. 1. Схема реакций этерификации (а), перееэтерификации (б)

Была проведена этерификация, перееэтерификация в двугорлой колбе, оснащенной обратным холодильником и термометром, при постоянном перемешивании. Условия этерификации – 60°C, 5 ч, 4% масс. Amberlyst 15, перееэтерификации – 60°C, 6 ч, 2% масс. Amberlyst 15. Температура реакции ограничивалась температурой кипения метанола. Реакции отличались молярным соотношением спирта к сырью. Необходимо было подобрать такое соотношение, чтобы сместить равновесие реакции в сторону образования продуктов. Избыток метанола приводит к разбавлению реакционной смеси, тем самым снижая скорость реакции. Полученные продукты отделяли от катализатора с помощью центрифуги 3000 об/мин в течение 20 минут. Для удаления воды, непрорегировавшего метанола использовали ротационный испаритель. Метилловые эфиры жирных кислот исследование с помощью ЯМР-спектроскопии, потенциометрического титрования. Результаты экспериментов представлены в таблице 1.

Таблица 1

Экспериментальные данные и полученные результаты в реакциях этерификации, перееэтерификации

№	Тип реакции	Молярное соотношение сырье:спирт	Кислотное число, мг КОН/г	Конверсия, %
1	этерификация	1:6	5,00	71
2	этерификация	1:8	1,99	88
3	этерификация	1:10	9,46	45
4	перееэтерификация	1:9	6,94	63
5	перееэтерификация	1:12	5,92	68
6	перееэтерификация	1:15	2,94	83

Для увеличения скорости переэтерификации необходимо добавлять метанол дозированно, что становится возможным при использовании испарительной колбы, соединенной через капилляр с основной реакционной колбой, в которую загружается катализатор и смесь растительного масла с жирными кислотами таллового масла с заданным кислотным числом. Для протекания реакции в основной колбе поддерживается температура на уровне 100-110°C, она ограничивается температурой деструкции сырья, спекания катализатора. Удаление непрореагировавшего спирта происходит при помощи атмосферной перегонки в течение 1 часа при 70°C. При содержании катализатора 1% масс. и времени реакции 1 час была достигнута конверсия 82%.

Далее планируется проведение этерификации, переэтерификации на проточной установке с неподвижным слоем катализатора.

Литература

1. 2023 IMO Strategy on Reduction of GHG Emissions from Ships (2023 IMO GHG Strategy)

© Щербакова Д.С., Алексанян Д.Р., Савеленко В.Д., Ершов М.А., 2025

УДК 547.235+547.7

ДЕСТРУКЦИЯ ЗАМЕЩЕННЫХ ЭТИЛ (1,2,3-ТРИАЗОЛ-4-ИЛ) ДИНИТРОАЦЕТАТА В УСЛОВИЯХ КИСЛОТНОГО ГИДРОЛИЗА

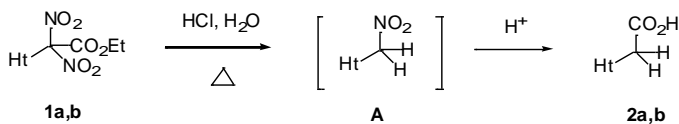
Юртаева Е.А.¹, Утяганова Е.В.¹, Тырков А.Г.²

¹ *Пятигорский медико-фармацевтический институт – филиал Волгоградского государственного медицинского университета, Пятигорск, Россия*

² *Астраханский государственный университет им. В.Н. Татищева, Астрахань, Россия*

Исследован процесс деструкции замещенных этил(1,2,3-триазол-4-ил)динитроацетата **1a,b** в 18% растворе соляной кислоты при нагревании.

Установлено, что реакция сопровождается выделением оксидов азота и приводит к замещенным 4-триазолилкарбоновым кислотам **2a,b** с выходом 62-65%, схема.



1a,b; 2a,b Ht= 2-метил-1,2,3-триазол-4-ил (**a**), 1-метил-1,2,3-триазол-4-ил (**b**)

Возможно предположить, что процесс протекает в соответствии со схемой Каплана [1], заключающейся в денитрации 1,2,3-триазолов **1a,b** до моонитроалканов **A**, которые подвергаются гидролизу по обычной схеме гидролиза моонитросоединений [2] с образованием целевых соединений **2a,b**.

Строение полученных соединений **2a,b** установлено методами ИК и ЯМР ^1H спектроскопии, а состав данными элементного анализа.

Синтез реагентов **1a,b** осуществляли по методике [3].

Литература

1. Kaplan L. Michael addition of nitroform. III. The C_9 precursor, potassium methyl 4,4-dinitro-2-hydroxybutyrate / L. Kaplan // J. Org. Chem. – 1964. – V. 29, № 8. – P. 2256-2261.
2. Новиков С.С. Химия алифатических и алициклических нитросоединений. / С.С. Новиков, Г.А. Швехгеймер, В.В. Севостьянова, В.А. Шляпочников. – Москва: Химия, 1974. – 418с.
3. Ладыжникова Т.Д. Взаимодействие цианодинитроэтоксикарбонилметана с алифатическими диазосоединениями. / Т.Д. Ладыжникова, А.Г. Тырков, К.В. Алтухов, Г.А. Беркова // Журнал органической химии. – 1993, – Т. 29, № 1. – С. 61-65.

© Юртаева Е.А., Утяганова Е.В., Тырков А.Г., 2025

УДК 547.31+547.841

ВЛИЯНИЕ ДОБАВОК ЦЕОЛИТА Н-ВЕТА НА СЕЛЕКТИВНОСТЬ ОБРАЗОВАНИЯ 4,4-ДИМЕТИЛДИОКСАНА-1,3 ПО РЕАКЦИИ ПРИНСА

Янсарина А.И., Сайфутдинов А.А., Исмагилов Р.Р., Тухватшин В.С.,
Фаттахов А.Х., Талипов Р.Ф.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Основным методом получения изопрена-мономера в промышленности является диоксановый способ: на первой стадии происходит конденсация формальдегида с *трет*-бутанолом / 2-метилпропеном в условиях кислотного катализа с образованием 4,4-диметил-1,3-диоксана (ДМД), на втором этапе – ДМД подвергается разложению до целевого изопрена [1]. Ключевым недостатком указанного метода получения целевого изопрена считается низкая селективность первой стадии с образованием до 30% побочных продуктов, таких как гидрированные пираны и 1,3-диола, что, вероятно, связано с многоканальностью реакции Принса [1]. Известно, что пористые материалы способствуют формированию и стабилизации циклического переходного состояния реакции Принса, а, следовательно, селективному образованию 1,3-диоксанов [2, 3]. В связи с этим, нами были проведены опыты по однофакторной оптимизации с целью выявления влияния добавок цеолита Н-ВЕТА на избирательность образования целевого

ДМД при взаимодействии *трет*-бутанола с формальдегидом. В результате были установлены оптимальные параметры синтеза ДМД: температура - 130°C, содержание цеолита – 3%, время реакции – 120 минут. Так, максимальное значение селективности по ДМД достигает 50-52%, по причине образования ряда побочных продуктов - изопренола (~ 10% мас.), изопентилдиола (~ 12% мас.) и пирана (~ 20% мас.). Данный факт, по-видимому, связан с величиной (6-7 Å) диаметра пор цеолита H-BETA и согласуется с принципом shape selectivity [4].

Литература

1. Платэ Н.А., Сливинский Е.В. Основы химии и технологии мономеров. – М: Наука, 2002. – 696 с.
2. Латыпов А.Х., Фаттахов А.Х., Аллагузин И.Х., Талипов Р.Ф. Селективность образования 4,4-диметил-1,3-диоксана в присутствии синтетических цеолитов в реакторе проточного типа. – Бутлеровские сообщения, 2024. – Т.79, №8. – С. 21-28.
3. Латыпов А.Х., Талипов Р.Ф., Фаттахов А.Х. Влияние силикагелей марок АСКГ и ШСМГ на селективность образования 4,4-диметил-1,3-диоксана. – Вестник Технологического университета, 2023. – Т.26, №7. – С. 57-60.
4. Ovchinnikov G.A., Tukhvatshin V.S., Ilibaev R.S., Talipov R.F. Kinetics of the reaction of 2-methylpropene with formaldehyde in the presence of synthetic zeolites. – Kinetics and Catalysis. 2022. – Т. 63. № 4. – С. 394-398.

© Янсарина А.И., Сайфутдинов А.А., Исмагилов Р.Р., Тухватшин В.С.,
Фаттахов А.Х., Талипов Р.Ф., 2025

СЕКЦИЯ
«АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЛИНКОМИЦИНА НА ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОМ
СЕНСоре НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ИМПРИНТИРОВАННОГО
ПОЛИ-3,4-ЭТИЛЕНДИОКСИТИОФЕНА

Абдуллин И.И., Абдуллин Я.Р., Назыров М.И.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Одним из перспективных подходов к определению биологически активных веществ является использование вольтамперометрических сенсоров на основе молекулярно-импринтированных полимеров (МИП). В пример можно привести поли-3,4-этилендиокситиофен (ПЭДОТ), выделяющийся среди других материалов благодаря своим свойствам таким как химическая устойчивость, механическая гибкость, высокая удельная проводимость [1]. Формирование МИП включает в себя образование комплексов между молекулой-шаблоном и мономерами, за которым следует процесс полимеризации. Удаление молекулы-шаблона приводит к образованию в полимерной матрице специфических полостей, комплементарных целевой молекуле по размеру и структуре. Эти полости обеспечивают высокую селективность и чувствительность МИП-сенсоров, позволяя им эффективно распознавать и связывать целевые молекулы [2].

В рамках данной работы был разработан вольтамперометрический сенсор на основе молекулярно-импринтированного ПЭДОТ. Электроосаждение пленки ПЭДОТ осуществлялось на стеклоуглеродном электроде методом циклической вольтамперометрии в течение 5 циклов в заданном диапазоне потенциалов от 0.5 В до 1.2 В со скоростью развертки потенциала 20 мВ/с. Раствор для полимеризации содержал 0.1 М LiClO_4 , 0.0005 М мономера ЭДОТ и 0.0001 М аналита. В ходе исследования была проведена оценка морфологии, электрохимических свойств и аналитических возможностей полученного сенсора. Методика формирования МИП была опробована с использованием линкомицина в качестве молекулы-шаблона и целевого аналита. Разработанный сенсор продемонстрировал исключительную способность селективно распознавать и точно определять линкомицин, что подтверждает его высокую эффективность в аналитических приложениях.

Литература

1. Yarkaeva Yu.A., Dymova D.A., Nazzyrov M.I., Zagitova L.R. [et al.] Voltammetric sensor based on molecular imprinted polymer for lincomycin detection. – *Chim. Tecno Acta*, 2023. – V.10., No. 202310210.
2. Yarkaeva Yu. A, Nazzyrov M.I., Abdullin Ya. R. [et al.] Enantioselective voltammetric sensor based on mesoporous graphitized carbon black Carboxypack X and fulvene derivative. – *Chirality*, 2023. – Vol. 1, P. 11.

© Абдуллин И.И., Абдуллин Я.Р., Назыров М.И., 2025

ПРИМЕНЕНИЕ ПЛАНАРНЫХ ЭЛЕКТРОДОВ В СОЧЕТАНИИ
С ТЕХНОЛОГИЕЙ МОЛЕКУЛЯРНОГО ИМПРИНТИНГА:
НАСТОЯЩЕЕ И ПЕРСПЕКТИВЫ

Абдуллин Я.Р., Назыров М.И.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Комбинация планарных электродов и молекулярного импринтинга открывает новые возможности в разработке высокоселективных и чувствительных сенсорных систем. Планарные электроды, благодаря компактности и легкости интеграции в портативные и легкие устройства, обеспечивают экспрессное определение, а молекулярно импринтированные полимеры, формирующие специфические сайты связывания, повышают селективность по отношению к целевым молекулам (например, белкам, токсинам, пестицидам).

Технология уже применяется в биосенсорах для медицинской диагностики (определение биомаркеров, гормонов), экологического мониторинга (детекция загрязнителей) и пищевой безопасности. Плёнки молекулярно импринтированных полимеров на электродах демонстрируют стабильность и низкие пределы обнаружения, что делает их альтернативой дорогостоящим методам анализа.

Данная комбинация имеет ряд таких преимуществ и возможностей, как:

1. Интеграция с гибкой электроникой — создание носимых сенсоров для непрерывного мониторинга здоровья.
2. Использование наноматериалов (наночастицы, графен) для усиления сигнала и увеличения активной поверхности.
3. Мультиплексные системы — одновременное определение нескольких аналитов за счет паттернирования электродов.
4. ИИ-оптимизация синтеза полимеров для ускорения разработки сенсоров.

Такое сочетание было апробировано при определении линкомицина с использованием модифицированных молекулярно импринтированным электрохимически синтезированным полиакриламидом планарных электродов. Благодаря такому подходу удалось снизить время анализа с 10 минут до 3 и уменьшить расход реактивов в 5 раз из-за уменьшения рабочего объёма раствора. Такой подход также может использоваться в полевых условиях, если использовать портативный потенциостат-гальваностат с предварительно модифицированными электродами.

Литература

1. Trojanowicz M., Pyszynska M. Flow-Injection Methods in Water Analysis - Recent Developments / Molecules. 2022. Vol. 27. N 4. 1410.

© Абдуллин Я.Р., Назыров М.И. 2025

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ФРАГМЕНТОВ
МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЛАПРОЛОВ
МЕТОДОМ ИК - СПЕКТРОСКОПИИ

Амангельда А.А., Васильева А.В., Бикмеева А.Х., Ширяева Р.Н.
*Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Уфа, Россия*

В настоящее время более 90% объема нефти на месторождениях Российской Федерации добывается с применением заводнения. Длительное заводнение пласта приводит к образованию устойчивой водонефтяной эмульсии, высокой коррозии оборудования, осложнению в результате осаждения минеральных солей и АСПО на внутренней поверхности скважины, насосов. Одним из путей решения этой проблемы является создание высокоэффективных деэмульгаторов. В последнее время одним из распространенных способов увеличения эффективности реагентов-деэмульгаторов является использование неионогенных ПАВ на основе простых полиэфиров оксидов этилена и пропилена различного строения и молекулярной массы [1-3].

Целью работы являлась разработка композиционного состава на основе лапрола 6003-2Б-18 и оценка его деэмульгирующей и антикоррозионной способности.

Для улучшения свойств лапрола использовали вспомогательные вещества – активную основу деэмульгатора DeKemix и соль алкилбензолсульфокислоты (АБСК). Деэмульгирующую эффективность композиционного деэмульгатора оценивали на водонефтяной эмульсии с обводненностью 50%.

ИК-спектры модифицированных деэмульгаторов снимали на ИК-Фурье спектрометре «i-Red 7800 u-L» в диапазоне 650-4000 см^{-1} .

По стандартным методикам были определены спектральные коэффициенты для нефтяной эмульсии : ароматичности (A_{1600}/A_{720}) – 1,2283, окисленности (A_{1710}/A_{1460}) – 0,6064, разветвленности (A_{1380}/A_{1460}) – 0,7576, алифатичности ($A_{720} + A_{1380}/A_{1600}$) – 1,4868 и осерненности (A_{1030}/A_{1460}) – 0,5409.

О протекании процесса модифицирования судили по спектральному коэффициенту разветвленности, который представляет собой отношение оптических плотностей при волновых числах 1380 и 1460 см^{-1} . Коэффициенты разветвленности для лапрола, модифицированных лапролов (I) и (II) составляют 0,7803; 0,9823; 1,2395 соответственно.

Установлено, что полученные деэмульгаторы также проявляют свойства ингибиторов коррозии.

По результатам проведенных лабораторных испытаний установлено, что полученные модифицированные дезэмульгаторы за счет проявления синергизма компонентов, входящих в состав композиции, обеспечивают более высокую степень разрушения эмульсии, чем лапрол, а также проявляют свойства ингибиторов коррозии.

Литература

1. Ширяева Р.Н., Сагитова Ч.Х. Композиционный реагент на основе лапрола для разрушения водонефтяной эмульсии // Вестник Башкирского университета. 2022. Т.27. №4. С. 966-974.
2. Сафина Л.Р. Простые полиэфиры для разрушения водонефтяных эмульсий. Автореф. дис.канд.техн.наук. Казань, 2013. 18 с.
3. Ага-заде А.Д., Самедов А.М., Алсафарова М.Э., Акперова А.Ф. Исследования по подбору эффективных дезэмульгаторов для первичной подготовки нефти и обезвоживания трудноразрушаемой водонефтяной эмульсии // Socar Proceedings. 2019. № 1.

©Амангельда А.А., Васильева А.В., Бикмеева А.Х., Ширяева Р.Н., 2025

УДК 543.544

ИЗУЧЕНИЕ СПОСОБНОСТИ К ХИРАЛЬНОМУ РАСПОЗНАВАНИЮ ЦЕОЛИТОПОДОБНОГО МАТЕРИАЛА $\text{Co}_{1,28}(\text{NH}_4)_{0,44}(\text{BP}_2\text{O}_8) \cdot (\text{H}_2\text{O})_{2,41}$

Ахмадеева Э.Э., Изибаева Д.В., Утеева Ж.Д.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Все живое состоит из хиральных молекул белков и сахаров. Эта особенность обуславливает избирательную чувствительность организма человека к лекарственным средствам, демонстрирующим различную биологическую активность. Один энантиомер может оказывать положительное влияние на организм человека, а второй – оставаться биологически инертным или даже негативным. Вследствие технологической сложности разделения энантиомеров, большинство современных лекарственных средств представляют собой рацемические смеси. Поэтому актуальной задачей является разработка новых хиральных неподвижных фаз.

В настоящем исследовании в качестве тест-адсорбатов применялись R-, S-энантиомеры лимонена. Были получены адсорбционные изотермы для данных соединений в различных температурных режимах. Изотермы адсорбции измерялись методом обращённой газовой хроматографии при конечной концентрации.

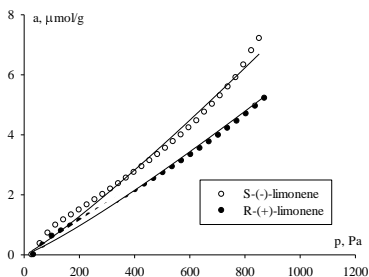


Рис. 1. Изотерма адсорбции лимонена при 65⁰С

На рисунке приведён пример полученных изотерм адсорбции при 65⁰С. Изотерма имеет III тип по классификации БЭТ. Коэффициент энантиоселективности составил 1,54. Как видно из рисунка, сильнее адсорбируется S-(-)-limonene. По объемам удерживания различие наблюдалось незначительное ($\alpha=1,02$). Различие изотерм подтверждалось статистическим анализом значений адсорбции с помощью t-критерия. Значимые различия наблюдались как при низких, так и при высоких значениях парциальных давлений.

© Ахмадеева Э.Э., Изибаева Д.В., Утеева Ж.Д., 2025

УДК 543.552.054.669.669.213

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК МЕДИ(II) НА МОДИФИЦИРОВАННОМ УГЛЕРОДИСТОМ ЭЛЕКТРОДЕ

Ахмадова Д.У.¹, Эргашов С.А.¹, Атакулона Н.А.²

(руководитель: Кутлимуротова Н.Х.¹)

¹Национальный университет Узбекистана им.М.Улугбека,Ташкент, Узбекистан

²Ташкентский Государственный Технический университет им. Ислама Каримова, Ташкент, Узбекистан

Медь – один из наиболее востребованных металлов в современной промышленности благодаря своим уникальным свойствам: высокой электро- и теплопроводности, пластичности, коррозионной стойкости и антибактериальным свойствам. Поэтому совершенствование методов анализа и извлечения меди из сырья остается актуальной задачей, направленной на повышение точности определения и эффективности выделения этого металла. Для оптимизации методики катодной вольтамперометрии для определения меди (II) на углеродистом электроде в присутствии ЭДТА [1]. Разработана методика одновременного определения

меди, свинца и кадмия в морской воде с помощью дифференциальной импульсной катодной –вольтамперометрии [2].

Для усовершенствования методики определения меди был модифицирован графитовый электрод с использованием реагента 4-амино-5-(4-аминофенил)-1,2,4-триазол-3-тиона (D278). Для кинетической и термодинамической оценки химических реакций, происходящих на поверхности модифицированного электрода, первоначально был проведён циклический вольтамперометрический анализ. Полученная вольтамперограмма представлена на рис.1.

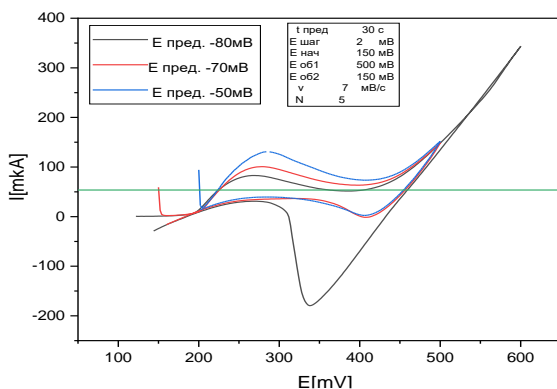


Рис. 1. Циклическая вольтамперограмма меди. W-модифицированный графитный электрод с D278

Анодный пик: $E_{pa}=266,0\text{ мВ}$; $I_{pa}=83,00\text{ }\mu\text{А}$. Катодный пик: $E_{pc}=336,0\text{ мВ}$; $I_{pc}= -180,0\text{ }\mu\text{А}$. Разность пиковых потенциалов (ΔE_p): $70,0\text{ мВ}$. На поверхности модифицированного электрода при $t_{пред}=30\text{ сек.}$ и скорости сканирования $v=7\text{ мВ/с}$ установлено, что $E_{1/2}$ составляет $0,300\text{ В}$. Соотношение $I_{pc}/I_{pa}=2,14$ свидетельствует о квазиобратимом характере электрохимического процесса восстановления меди (II). Анализ вольтамперограммы показал, что при более отрицательных значениях предзарядного потенциала ($E_{пред}$) электрохимическая активность возрастает. Это проявляется в увеличении максимального тока и площади под вольтамперометрической кривой, что свидетельствует о более интенсивном восстановлении ионов меди. Исследование влияния $E_{пред}$ на обратимость процесса показало, что при $E_{пред}=-80\text{ мВ}$ значение ΔE_p составляет 70 мВ , что близко к значениям, характерным для обратимых процессов. При менее отрицательных значениях $E_{пред}$ наблюдается увеличение ΔE , что указывает на снижение степени обратимости электрохимического восстановления меди (II). Полученные результаты подтверждают, что предложенная методика на основе модифицированного

графитового электрода позволяет обеспечить точное и воспроизводимое определение ионов меди (II), а также обладает высокой чувствительностью и аналитической значимостью.

Проведённые исследования показали, что модификация графитового электрода реагентом D278 приводит к образованию комплексных соединений с ионами меди (II). После изменения потенциала комплекс полностью разрушается, и медь восстанавливается в раствор в форме ионов Cu(II). Установлено, что данный процесс обладает окислительным характером, при этом его электрохимическая активность возрастает с увеличением отрицательного значения предразрядного потенциала. Полученные результаты подтверждают эффективность предложенной методики для точного и воспроизводимого определения меди (II).

Литература

1. Лейтес Е.А., Усова Т.В. Вольтамперометрическое определение меди (II) // Известия Алтайского государственного университета. – 2011. – №. 3-1. – С. 130-132.
2. Van Den Berg C. M. G. Determination of copper, cadmium and lead in seawater by cathodic stripping voltammetry of complexes with 8-hydroxyquinoline // Journal of electroanalytical chemistry and interfacial electrochemistry. – 1986. – Т. 215. – №. 1-2. – С. 111-121.

© Ахмадова Д.У., Эргашов С.А.,
Атакулона Н.А., 2025

УДК 543.552.054.1

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ ЯЗЫК НА ОСНОВЕ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНОГО КОМПЛЕКСА ХИТОЗАНА И АЛЛОТРОПНЫХ ФОРМ УГЛЕРОДА ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПРОИЗВОДИТЕЛЕЙ ПРЕПАРАТОВ НАПРОКСЕНА

Булышева Е.О., Тарханова Ю.Р., Терес Ю.Б., Зильберг Р.А.
Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Мультисенсорные системы типа «электронный язык» [1-5] представляют собой массив электрохимических сенсоров с перекрестной чувствительностью, способные одновременно определять несколько соединений в анализируемом растворе с последующим использованием методов хеометрики для обработки данных. Они сочетают в себе простоту, высокую эффективность и чувствительность, открывая новые возможности для контроля качества лекарственных средств, диагностики заболеваний, мониторинга окружающей среды и др.

Разработана мультисенсорная система типа «электронный язык» из четырёх композитных сенсоров [6] на основе полиэлектролитного комплекса хитозана и N-сукцинилхитозана (ПЭК) с однослойными углеродными нанотрубками (ОУНТ), оксидом графена (ОГ),

углеродсодержащими сорбентами различной удельной поверхностью CarboblackC и Carborack для идентификации лекарственных средств с действующим веществом напроксен трех производителей: «Налгезин» (АО «КРКА», Словения), «Тералив» (АО «Байер Биттерфельд», Германия) и «Нексемезин» (АО «Фармасинтез», Россия). Исследования проводили с помощью дифференциальной импульсной вольтамперометрии (ДИВ). По полученным результатам для композитов ПЭК@ОУНТ, ПЭК@ОГ, ПЭК@CarboblackC и ПЭК@Carborack можно сделать вывод, что препараты напроксена незначительно различаются по форме ДИВ кривой, высотам пиков и потенциалам, что не позволяет провести однозначную идентификацию по производителю. Для установления сходств и различий между препаратами была использована хемометрическая обработка полученных вольтамперограмм методами главных компонент (МГК) и независимого моделирования аналогии классов (СИМКА). Оптимальное количество основных компонент было выбрано таким образом, чтобы сумма объясненной дисперсии составляла не менее 90%. В случае одно- двух- и трехсенсорных систем наблюдаются пересекающиеся эллипсоиды на плоскости ГК, однако в случае четырехсенсорной системы эллипсоиды хорошо разделяются. Результаты СИМКА-классификации препаратов напроксена с использованием четырехсенсорной системы указывают на их однозначную идентификацию. При этом доля неверно распознанных образцов сводится к минимуму за счет перекрестной чувствительности, что позволяет провести идентификацию препаратов напроксена по производителю.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ, грант № 23-73-00119

Литература

1. Zilberg R.A., Bulysheva E.O., Teres Y.B. [et al.] Voltammetric electronic tongue for identification of naproxen pharmaceuticals by manufacturer // *Chimica Techno Acta.* – 2025. – Vol. 12, No. 2. – P. 12204.
2. Sidel'nikov A.V., Zil'berg R.A., Yarkaeva Y.A. [et al.] Voltammetric identification of antiarrhythmic medicines using principal component analysis // *Journal of Analytical Chemistry.* – 2015. – Vol. 70, No. 10. – P. 1261-1266.
3. Зильберг Р.А., Яркаяева Ю.А., Дубровский Д.И. [и др.] Вольтамперометрическая мультисенсорная система на основе модифицированных полиарилефталатами стеклоуглеродных электродов для распознавания и определения варфарина // *Аналитика и контроль.* – 2019. – Т. 23, № 4. – С. 546-556.
4. Зильберг Р.А., Сидельников А.В., Яркаяева Ю.А. [и др.] Идентификация лекарственных средств на основе биспролола с использованием вольтамперометрического «электронного языка» // *Вестник Башкирского университета.* – 2017. – Т. 22, № 2. – С. 356-363.
5. Yarkaeva Y.A., Dubrovskii D.I., Zil'berg R.A., Maistrenko V.N.. Voltammetric Sensors and Sensor System Based on Gold Electrodes Modified with Polyaryleneftalides for

Cysteine Recognition // Russian Journal of Electrochemistry. – 2020. – Vol. 56, No. 7. – P. 544-555.

6.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. – Vol. 11, No. 3. – P. 202411302.

© Булышева Е.О., Тарханова Ю.Р., Терес Ю.Б., Зильберг Р.А., 2025

УДК 543.552

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР НА ОСНОВЕ ЭЛЕКТРОПОЛИМЕРИЗОВАННОГО ПИРРОЛА И НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТРИПТОФАНА

Вальшина А.Р., Абдуллин Я.Р., Назыров М.И.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В последние десятилетия наблюдается значительный рост интереса к проводящим полимерам, обусловленный их уникальными электрохимическими и механическими свойствами. Среди них особое место занимает полипиррол (ППу), выделяющийся своей высокой проводимостью, стабильностью, простотой синтеза и биосовместимостью [1]. В свою очередь, модификация поверхности электрода наноматериалами, в частности наночастицами золота (НЧ-Au), представляет собой перспективный путь для дальнейшей оптимизации свойств электрополимеризованного Ппу.

Наночастицы золота обладают уникальными свойствами, включая высокую электропроводность, химическую инертность и способность катализировать ряд реакций, что делает их привлекательными для использования в качестве модификаторов электродов.

Цель нашего исследования заключалась в изучении влияния наночастиц золота на процесс электрополимеризации пиррола и на свойства получаемого композитного материала при определении молекулы триптофана (Трп).

Сенсор был получен электрополимеризацией пиррола на поверхности стеклоглеродного электрода (СУЭ) с последующей иммобилизацией наночастиц золота. Синтез ППу проводили с помощью циклической вольтамперометрии в диапазоне потенциалов от 0 до 1 В при скорости развертки 100 мВ/с в течение пяти циклов в растворе, содержащем 100 мМ LiClO₄ и 1.5 мМ пиррола. Электрохимические свойства сенсора и его чувствительность к триптофану исследовались методами циклической вольтамперометрии, дифференциальной импульсной вольтамперометрии. Модификация пиррола наночастицами золота значительно увеличила электропроводность и площадь поверхности сенсора, что привело к улучшению электрохимического отклика на триптофан. Сенсор

продемонстрировал высокую чувствительность, селективность и стабильность при определении триптофана в широком диапазоне концентраций.

Литература

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

© Вальшина А.Р., Абдуллин Я.Р., Назыров М.И., 2025

УДК 541.14:547.551.2

ХИРАЛЬНЫЙ СЕНСОР НА ОСНОВЕ ПАСТОВОГО ЭЛЕКТРОДА, МОДИФИЦИРОВАННОГО КОМПЛЕКСНЫМ СОЕДИНЕНИЕМ НИКЕЛЯ (II) ДЛЯ КОНТРОЛЯ ЭНАНТИОМЕРНОЙ ЧИСТОТЫ НАПРОКСЕНА

Волкова А.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Напроксен (Nap) относится к классу эффективных нестероидных противовоспалительных препаратов, оказывающих выраженное противовоспалительное, анальгезирующее и жаропонижающее действие. Он существует в двух оптически изомерных формах: R- и S-энантиомеры. Фармацевтическая активность S-Nap в 28 раз сильнее, чем у R-изомера и в отличие от других высоко потребляемых нестероидных противовоспалительных препаратов, которые распространяются в виде рацемических смесей. В связи с этим, необходимо проводить контроль энантиочистоты напроксен-содержащих препаратов [1]. Для этих целей широко применяют хроматографические методы, однако они требуют очень дорогого оборудования и расходных материалов, высококвалифицированных специалистов и длительной пробоподготовки [2-3]. На сегодняшний день все больше приобретают популярность электрохимические методы анализа, которые позволяют быстро определить энантиомеры Nap при низких затратах [4-6].

Цель нашего исследования заключалась в разработке энантиоселективного вольтамперометрического сенсора на основе пастового электрода из графитированной термической сажи Carboblack C (ГПЭ) [7], модифицированной комплексным соединением никеля (II) с оптически активными лигандами, для определения и распознавания энантиомеров напроксена.

По данным дифференциально-импульсных вольтамперометрических кривых для энантиомеров Nap сенсор показал хороший результат. Коэффициент его энантиоселективности составил $i_{p1S}/i_{p1R} = 1.43$, $i_{p2S}/i_{p2R} =$

1.27 для первого/второго пиков соответственно и $\Delta E_p = 10$ мВ. Из концентрационной зависимости определили линейный диапазон, который составляет от $5.0 \cdot 10^{-5}$ до $1 \cdot 10^{-3}$ М для (S)- Nap, от $2.0 \cdot 10^{-4}$ до $1 \cdot 10^{-3}$ М для (R)- Nap, где пределы обнаружения по первому и второму пикам составляют $5.31 \cdot 10^{-7}$ М и $4.96 \cdot 10^{-7}$ М для (S)- Nap, $7.40 \cdot 10^{-7}$ и $6.79 \cdot 10^{-7}$ для (R)- Nap. Наибольшую чувствительность сенсор продемонстрировал к S-энантиомеру. Относительное стандартное отклонение не превышает 4.7%. Представленный в работе сенсор стабилен в условиях эксперимента и при хранении.

Литература

1. Voltammetric electronic tongue for identification of naproxen pharmaceuticals by manufacturer / R.A. Zilberg, E.O. Bulysheva, Y.B. Teres [et al.] // *Chimica Techno Acta.* – 2025. – Vol. 12, No. 2. – P. 12204. –
2. Майстренко В.Н., Евтюгин Г.А., Зильберг Р.А. Энантиоселективные вольтамперометрические сенсоры. – Уфа: Башкирский государственный университет, 2018. – 189 с.
3. Майстренко, В.Н. Энантиоселективные вольтамперометрические сенсоры на основе хиральных материалов / В.Н. Майстренко, Р.А. Зильберг // *Журнал аналитической химии.* – 2020. – Т. 75. – № 12. – С.1080-1096/
4. A Voltammetric Sensor Based on Aluminophosphate Zeolite and a Composite of Betulinic Acid with a Chitosan Polyelectrolyte Complex for the Identification and Determination of Naproxen Enantiomers / R. A. Zilberg, V. N. Maistrenko, Yu. B. Teres [et al.] // *Journal of Analytical Chemistry.* – 2023. – Vol. 78, No. 7. – P. 933-944.
5. 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.
6. Voltammetric sensor for naproxen enantiomers based on a paste electrode 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.
7. Chiral octahedral cobalt(III) complex immobilized on Carbolblack 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.

© Волкова А.А., 2025

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ВЫДЕЛЕНИЯ КОМПЛЕКСОВ
НАНОЧАСТИЦ-БЕЛОК МЕТОДОМ ЭКСКЛЮЗИОННОЙ
ХРОМАТОГРАФИИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ БЕЛКОВОЙ КОРОНЫ

Гуляев И.А.¹, Сокол М.Б.¹, Камаева О.Е.^{1,2}, Клименко М.А.¹,
Моллаева М.Р.¹, Яббаров Н.Г.¹, Чиркина М.В.¹, Никольская Е.Д.¹

¹ИБХФ им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия

²НИИУ МИФИ, Москва, Россия

В последние десятилетия наблюдается бурный рост количества исследований, направленных на создание эффективных полимерных наноразмерных систем доставки лекарственных веществ (ЛВ).

Полимерные частицы на основе сополимера молочной и гликолевой кислот (PLGA) для доставки, в частности, противоопухолевых или антибактериальных ЛВ отличаются высокой биосовместимостью, биodeградируемостью и возможностью модификации поверхности [1].

Основной способ введения полимерных биомедицинских частиц – внутривенный. При данном способе введения коллоидные частицы попадают в кровяное русло и подвергаются опсонизации с образованием белковой короны. Процесс опсонизации является одним из наиболее значительных барьеров, ограничивающих терапевтическую эффективность полимерных частиц. Белки-опсоны, присутствующие в сыворотке крови, быстро связываются с частицами, позволяя макрофагам мононуклеарной фагоцитарной системы легко распознавать и удалять данные системы доставки ЛВ до того, как они смогут выполнить свою терапевтическую функцию [2].

В настоящее время большинство научных работ сосредоточено на изучении закономерностей формирования белковой короны металлических частиц и липосом [3]. Это привело к возникновению пробелов в знаниях о поведении коллоидных полимерных систем (в частности, полимерных частиц PLGA) в биологических средах. Точные и надежные неразрушающие методы выделения и определения характеристик белковой короны крайне важны для разработки более эффективных и безопасных полимерных систем доставки ЛВ.

Одним из эффективных методов выделения белковой короны является эксклюзионная хроматография (SEC). Таким образом, цель настоящей работы заключалась в разработке препаративной методики разделения частиц на основе PLGA и фетальной бычьей сыворотки (FBS) методом SEC для выделения комплексов полимерных частиц со сформировавшейся белковой короной.

Разработанные оптимальные условия хроматографического разделения проинкубированных частиц PLGA и FBS (при температуре +37°C) были достигнуты в хроматографической колонке Cytiva GE XK 16/20 Column,

заполненной неподвижной фазой Sepharose CL-4B. Элюирование осуществлялось изократически (скорость потока 0,3 мл/мин) с помощью подвижной фазы, состоявшей из фосфатно-солевого буфера (50 мМ, рН=6.80). Детекция аналитического сигнала проводилась с помощью УФ-детектора Waters 2487 Dual λ Absorbance Detector на длинах волн 214/280 нм (рис. 1).

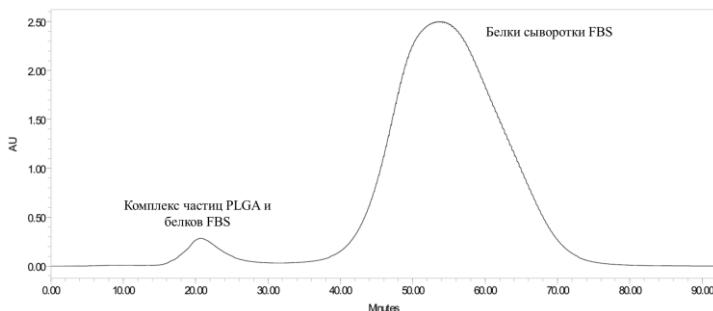


Рис. 1. Хромотограмма (длина волны детекции 280 нм) метода SEC полимерных частиц PLGA, проинкубированных с FBS

Разработанная препаративная методика разделения частиц на основе PLGA и FBS методом SEC позволяет эффективно выделять комплексы коллоидных частиц с образовавшейся белковой короной, что открывает широкие перспективы для изучения закономерностей ее образования. Более глубокое понимание вышеуказанного явления имеет решающее значение для разработки более эффективных и безопасных полимерных систем доставки ЛВ.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №24-25-00095, <https://rscf.ru/project/24-25-00095/>.

Литература

1. Narmani A. et al. Biomedical applications of PLGA nanoparticles in nanomedicine: advances in drug delivery systems and cancer therapy //Expert opinion on drug delivery. – 2023. – Т. 20. – №. 7. – С. 937-954.
2. Mehta P., Shende P. Evasion of opsonization of macromolecules using novel surface-modification and biological-camouflage-mediated techniques for next-generation drug delivery //Cell Biochemistry and Function. – 2023. – Т. 41. – №. 8. – С. 1031-1043.
3. Berrecoso G., Crecente-Campo J., Alonso M. J. Unveiling the pitfalls of the protein corona of polymeric drug nanocarriers //Drug delivery and translational research. – 2020. – Т. 10. – С. 730-750.

© Гуляев И.А., Сокол М.Б., Камаева О.Е., Клименко М.А.,
Моллаева М.Р., Яббаров Н.Г., Чиркина М.В., Никольская Е.Д., 2025

КОМПЛЕКС НИКЕЛЯ (II) КАК ХИРАЛЬНЫЙ СЕЛЕКТОР
ДЛЯ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ
ЭНАНТИОМЕРОВ НАПРОКСЕНА

Ишмакаева Г.И

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Напроксен (Nap) широко применяемый обезболивающий и противовоспалительный препарат. Он существует в виде двух изомерных форм - R- и S-энантиомеры. Однако из-за гиптоксичности R-энантиомера, на фармацевтическом рынке выпускаются исключительно S-энантиомеры Nap и его энантиочистота строго контролируется [1-5].

В данной работе разработан новый энантиоселективный вольтамперметрический сенсор [6-7], основанный на пастовом электроде из CarbolblackC (CBPE), модифицированный хиральным комплексом никеля Ni(II). Сенсор продемонстрировал хорошую селективность по отношению к энантиомерам Nap. При этом аналитические сигналы (R)- Nap и (S)- Nap различались для двух пиков электроокисления: $ip_1S/ip_1R = 1,43$, $ip_2S/ip_2R = 1,27$ (для первого и второго пика соответственно). Диапазон концентраций высоты пиков окисления линейно увеличивался от $5,0 \times 10^{-5}$ до 1×10^{-3} М для S-Nap и от $2,0 \times 10^{-4}$ до 1×10^{-3} М для (R)-Nap, а пределы обнаружения составили $7,40 \times 10^{-7}$ и $5,31 \times 10^{-7}$ М для первого пика и $6,79 \times 10^{-7}$ и $4,96 \times 10^{-7}$ М для второго пика для R- и S-Nap, соответственно. Сенсор CBPE@(S)-Ni демонстрирует наибольшую чувствительность к S-Nap (6,44 и 6,90 мкА/мМ для первого и второго пиков). Данный сенсор был успешно апробирован для определения энантиомеров Nap в смесях, биологических жидкостях и лекарственных формах. Относительное стандартное отклонение не выше 4,7%, а правильность определения находится в диапазоне 99,2-101,3%.

Исследование выполнено при поддержке Российского научного фонда (грант № 23-23-00340), <https://rscf.ru/project/23-23-00340/>

Литература

1. Вольтамперметрический сенсор на основе алюмофосфатного цеолита и композита бетулиновой кислоты с полиэлектrolитным комплексом хитозана для распознавания и определения энантиомеров напроксена / Р.А. Зильберг, В.Н. Майстренко, Ю.Б. Терес [и др.] // Журнал аналитической химии. – 2023. – Т. 78, № 7. – С. 648-661.
2. Chiral selectors in voltammetric sensors based on mixed phenylalanine/alanine Cu(II) and Zn(II) complexes / R.A. Zilberg, T.V. Berestova, R.R. Gizatov [et al.] // Inorganics. – 2022. – Vol. 10, No. 8. – P. 117.

3. Voltammetric sensor for naproxen enantiomers based on a paste electrode modified with a Chiral nickel complex / R. A. Zilberg, Y. B. Teres, I. V. Vakulin [et al.] // Chirality. – 2025. – Vol. 37, No. 2. – P. e70025.
4. Voltammetric electronic tongue for identification of naproxen pharmaceuticals by manufacturer / R.A. Zilberg, E.O. Bulysheva, Y.B. Teres [et al.] // Chimica Techno Acta. – 2025. – Vol. 12, No. 2. – P. 12204.
5. Rational design of highly enantioselective composite voltammetric sensors using a computationally predicted chiral modifier / R.A. Zilberg, I.V. Vakulin, Yu. B. Teres [et al.] // Chirality. – 2022. – Vol. 34, No. 11. – P. 1472-1488.
6. Майстренко, В.Н. Энантиоселективные вольтамперометрические сенсоры / В.Н. Майстренко, Г.А. Евтюгин, Р.А. Зильберг. – Уфа: Башкирский государственный университет, 2018. – 189 с. – ISBN 978-5-7477-4754-8.
7. Maistrenko, V.N. Enantioselective Voltammetric Sensors: New Solutions / V.N. Maistrenko, A.V. Sidel'nikov, R.A. Zil'berg // Journal of Analytical Chemistry. – 2018. – Vol. 73, No. 1. – P. 1-9.

© Ишмакаева Г.И., 2025

УДК 543.054.2/9

ОПРЕДЕЛЕНИЕ АНТИБИОТИКОВ ХЛОРАМФЕНИКОЛОВОЙ ГРУППЫ В МЯСЕ МЕТОДОМ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНОЙ ЖИДКОСТНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Ишпаева А.Н., Соколова Л.И.

Дальневосточный федеральный университет (ДФУ), Владивосток, Россия

Антибиотики хлорамфениколовой группы на сегодняшний день используются в сельскохозяйственных предприятиях, как добавка к кормам для животных, так и для лечения животных, рыб и птиц. Наиболее широкое применение нашел антибиотик левомицетин. Антибиотики обычно определяют хроматографическими и иммуноферментными методами, которые позволяют определять один препарат в анализируемой пробе. Хроматографические методы анализа для определения нескольких антибиотиков при их совместном присутствии используются в практике анализа достаточно редко.

Методы определения должны включать стадию пробоподготовки, предусматривающую очистку от балластных веществ. Сложность этого процесса состоит в том, что мясо содержит вещества, которые значительно затрудняют определения антибиотиков. Поэтому поиск путей и способов увеличения селективности методики за счет концентрирования анализа и удаления балластных веществ является важной и актуальной задачей.

Исследуемую пробу мяса измельчили в мясорубке, затем в коническую колбу на 250 мл внесли навеску пробы 5.0 г, добавили 10 мл ацетонитрила, затем 0,1 мл муравьиной кислоты (конц.). Колбу поместили на механическую мешалку, установили скорость – 145 об/мин, на 30 минут.

После механического перемешивания взяли аликвоту 5 мл, поместили в коническую колбу на 250 мл, затем добавили 0,2 г кремнезема (прокаленный), также установили на механическую мешалку на 20 минут. Полученный раствор фильтровали через фильтр синяя лента. Отобрали 1 мл отфильтрованного раствора и поместили в колбу на 25 мл, довели объем до метки дистиллированной водой.

В анализируемой пробе наблюдали смещение их максимумов поглощения антибиотика, что может свидетельствовать о присутствии в пробе посторонних веществ и их взаимном влиянии соединений на спектральные характеристики. Предположено, что в пробе, по-видимому, присутствует еще один часто используемый антибиотик – тиамфеникол.

Методом добавок определили содержание левомицетина, которое составило 0,018 мг/кг.

Образцы анализировали методом ВЭЖХ. Идентификацию антибиотиков проводили путем сравнения времен удерживания стандартных веществ и разделенных пиков. Показано, что в представленном образце присутствуют оба антибиотика (хлорамфеникол и тиамфеникол).

Таким образом, в результате проведенного исследования показано, что спектрофотометрический метод может быть использован для экспрессной оценки содержания антибиотиков хлорамфениколовой группы в мясных продуктах.

Литература

1. Панин А.Н., Комаров А.А. Проблемы аналитического контроля безопасности кормов и продукции животноводства // Журнал Российского химического общества им. Д.И. Менделеева. – 2005. – Т. XLIX, № 3. – С. 71-82.
2. Одновременное определение остаточных количеств амфениколов в пищевых продуктах методом ВЭЖХ с УФ – детектированием / В.Г. Амелин, Н.М. Волкова, Н.А. Репин [и др.] // Журнал аналитической химии. – 2015. – Т. 70, № 10. – С. 1114-1120.

© Ишпаева А.Н., Соколова Л.И., 2025

УДК 543.552.054.669.669.213

ВЛИЯНИЕ НИТРОЗОФЕНОЛА НА ЦИКЛИЧЕСКО-ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИОНОВ Ni(II)

Карабаева Г.Б.¹, Яхшиева З.З.¹, Кутлимуротова Н.Х.², Атакулова Н.³

¹Джизакский государственный педагогический университет,

Джизак, Узбекистан

²Национальный университет Узбекистана, Ташкент, Узбекистан

³Алмаликский филиал Ташкентского политехнического университета,

Алмалик, Узбекистан

Никель - один из элементов, естественно существующих в природе, однако его распространение в значительной мере обусловлено

антропогенной деятельностью, что позволяет контролировать и изменять его присутствие. Никель и его соединения широко распространены в продуктах питания, напитках и промышленных сточных водах. Поэтому нарушение его баланса в организме может привести к различным проблемам со здоровьем. Повышенная концентрация никеля обладает тератогенными и канцерогенными эффектами для млекопитающих, тогда как для растений нормальным считается содержание 1 мкг/г, но значения выше 50 мкг/г считаются токсичными 1. Поэтому сегодня важно определять следовые количества никеля и предсказывать его потенциальное негативное воздействие на биологическую активность. В этом контексте использование плёночных электродов для обнаружения ионов никеля может значительно повысить точность его определения. Также известно, что использование электрода с покрытием из серебряного амальгамы (Hg(Ag)FE) в вольтамперометрии обеспечивает высокую чувствительность при определении следовых количеств никеля 2, **Ошибка! Источник ссылки не найден..**

В данной работе разработан метод определения ионов никеля (II) с использованием циклической вольтамперометрии на электроде с покрытием из серебряной амальгамы. В качестве комплексообразующего реагента использован о-нитрозофенол. Высокая чувствительность и избирательность данного метода обеспечивают его высокую эффективность, что способствует улучшению чувствительных измерений в практике аналитической химии. Кроме того, использование циклической вольтамперометрии позволяет делать выводы о составе комплекса: можно получить точные данные о количестве электронных обменов в комплексе, коэффициенте диффузии и кинетических процессах. Эти данные позволяют лучше понять и оптимизировать электрохимические реакции, что в свою очередь повышает эффективность применения метода в практике.

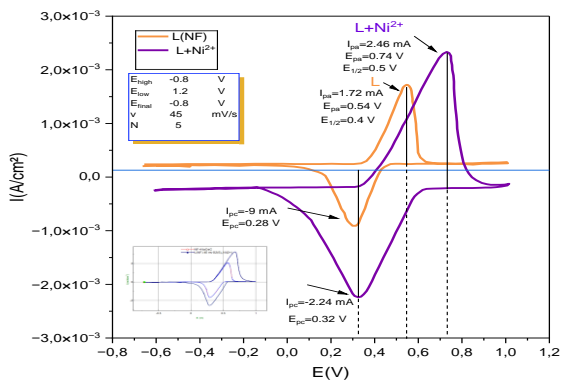


Рис. 1. Циклическая вольтамперограмма взаимодействия ионов никеля (II) с о-нитрозофенолом.

В экспериментах полупотенциал о-нитрозофенола при скорости сканирования 45 мВ/с был определен равным 0,400 В в диапазоне потенциалов от -0,8 В до +1,2 В. Когда в электрохимическую ячейку добавили 1,0 мл стандартного раствора с содержанием ионов Ni^{2+} 5 мг/л, 5,0 мл ацетатного буфера с $\text{pH}=5.1$ в качестве фонового электролита (ГСО 7265-96) и 2,0 мкМ о-нитрозофенола, наблюдалось смещение потенциала в положительную область, а полупотенциал изменился до 0,500 В. Взаимодействие о-нитрозофенола с ионами Ni(II) подтверждено смещением полупотенциала с 0.400 В до 0.500 В, что указывает на процесс формирования комплекса. Это явление позволяет определять малые концентрации ионов Ni(II) с помощью о-нитрозофенола.

Литература

1. Barceloux, D.G. (1999). Nickel. Journal of Toxicology Clinical Toxicology, 37(2), 239–258.
2. Kapturski, P., & Bobrowski, A. (2008). The silver amalgam film electrode in catalytic adsorptive stripping voltammetric determination of cobalt and nickel. Journal of Electroanalytical Chemistry, 617(1), 1–6.
3. Малахова, Н.А., Ивойлова, А.В., Малышева, Н.Н., [и др.]. (2019). Потенциометрические и вольтамметрические методы исследования и анализа: учебное пособие. Екатеринбург: Издательство Уральского университета. ISBN 978-5-7996-2617.

© Карабаева Г.Б., Яхшиева З.З., Кутлимуротова Н.Х., Атакулова Н., 2025

УДК 543.554.6

ИЗГОТОВЛЕНИЕ ПОТЕНЦИОМЕРИЧЕСКОГО ДАТЧИКА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СПАЗМОЛИТИКОВ

Коринецкая Е.И., Кулешова Н.В.

*Нижегородский государственный университет им. Н.И. Лобачевского,
Нижний Новгород, Россия*

Определение содержания основного компонента в фармацевтических препаратах имеет важное значение для обеспечения их эффективности и безопасности при лечении различных заболеваний. На основе точного определения основного действующего вещества в препарате формируются рекомендации по дозировке и режиму применения, что существенно влияет на результаты лечения.

Были изготовлены и исследованы по принятым методикам пленочные потенциометрические датчики твёрдоконтактные и с жидкостным заполнением для определения некоторых спазмолитиков. Синтезированы и исследованы электродноактивные вещества папаверин, дротаверин и мебеверин с тетрафенилборатом натрия (ТФБNa). Аналитические

характеристики приведены в таблице. В ходе экспериментов было выявлено, что для определения некоторых спазмолитиков, входящих в нитропную группу, лучшими характеристиками обладает датчик на основе электродноактивного вещества мебеверин с ТФБНа.

Таблица 1

Аналитические характеристики потенциометрического датчика с электродноактивным веществом мебеверин ТФБНа.

Определяемое вещество	Линейный участок графика	Предел обнаружения, моль/л	Крутизна электродной функции, мВ/рС
Мебеверин	От 2 до 5 рС	$2 \cdot 10^{-6}$	50 ± 2
Дротаверин	От 2 до 4,5 рС	$1 \cdot 10^{-5}$	65 ± 3
Папаверин	От 2 до 4,5 рС	$3 \cdot 10^{-5}$	40 ± 2

Правильность определения действующего вещества в лекарственных препаратах мебеверин ретард, ниспам, но-шпа дуо, спазмалгон эффект, папаверин таблетированный и ампульный, способами ионометрии (градуировочного графика, ограничивающих растворов и стандартных добавок) подтверждена методом потенциометрического титрования препаратов раствором ТФБНа. Погрешность определения способами ионометрии не превышает 7,5%, потенциометрического титрования 1%.

Литература

1. Плетенева, Т.В., Успенская, Е.В. Контроль качества лекарственных средств: учебник. 3-изд. перераб./под ред. Плетнева Т.В. Москва: ГЭОТАР-Медиа, 2023 – 560 с.

© Коринецкая Е.И., Кулешова Н.В., 2025

УДК 541.14:547.551.2

ВЛИЯНИЕ PH ФОНОВОГО ЭЛЕКТРОЛИТА НА ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТИМОЛОЛА НА КОМПОЗИТНОМ СЕНСОРЕ НА ОСНОВЕ СТЕКЛОУГЛЕРОДНОГО ЭЛЕКТРОДА

Круглова А.А., Волкова А.А., Зильберг Р.А.
Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Тимолол (Tim) – это неселективный блокатор β -адренорецепторов, широко применяемый в офтальмологии для снижения внутреннего давления при лечении глаукомы в форме глазных капель [1]. Тимолол выпускается в концентрациях 0,5% и 0,25%. Механизм действия: блокирует как β -1, так и β -2 адренорецепторы, снижает внутриглазное давление за счет уменьшения

образования или, возможно, оттока водянистой влаги. Снижает кровяное давление за счет блокирования адренорецепторов и уменьшения симпатического оттока, оказывает отрицательное хронотропное и инотропное действие по неизвестному механизму. Одними из методов контроля качества и количественного определения тимолола [2] в лекарственных средствах являются спектрофотометрический, кулонометрический и хроматографические методы, однако они требуют очень дорогого оборудования и расходных материалов, высококвалифицированных специалистов и длительной пробоподготовки. На сегодняшний день все больше приобретают популярность электрохимические методы анализа [3-7], которые позволяют быстро определить содержание электроактивных действующих веществ при низких затратах.

Цель нашего исследования заключалась в разработке композитного сенсора на основе стеклоуглеродного (СУЭ) электрода, модифицированного цеолитом типа MFI и полиэлектrolитным комплексом (ПЭК), для определения тимолола в растворах с различным значением pH.

В ходе работы изучалось влияние pH фонового электролита на аналитический сигнал тимолола. Были приготовлены буферные растворы Бриттена-Робинсона со значениями pH от 2 до 11. На основе дифференциально-импульсных вольтамперометрических кривых было установлено, что наилучшие результаты сенсор демонстрирует при значении pH=7. Именно в этих условиях наблюдается максимальная чувствительность к Tim, что также обусловлено стабильным состоянием композитного сенсора MFI@ПЭК.

Предложенный сенсор продемонстрировал высокую стабильность как в условиях эксперимента, так и при хранении. Пределы экспериментального обнаружения тимолола находятся в пределах, соответствующих требованиям фармацевтическому контролю.

Литература

1. О.Г. Парахневич, Т.М. Ермоленко, Т.В. Трухачева. Разработка технологии и оценка качества глазных капель тимолол. – Минск, РУП Белмедпрепараты, 2009. – 43 с.
2. Turkdemir, M.H. Voltametric Determination of Timolol Maleate: b Ayad, M.M. Spectrophotometric methods for determination of enalapril and timolol in bulk and in drug formulations / M.M. Ayad, A. Shalaby, H.E. Abdellatef // J. Anal Bional Chem. – 2003. № 375. – P. 556-560.
3. Voltammetric sensor for naproxen enantiomers based on a paste electrode modified with a Chiral nickel complex / R.A. Zilberg, Y.B. Teres, I.V. Vakulin [et al.] // Chirality. – 2025. – Vol. 37, No. 2. – P. e70025.
4. Вольтамперометрический сенсор на основе алюмофосфатного цеолита и композита бетулиновой кислоты с полиэлектrolитным комплексом хитозана для распознавания и определения энантиомеров напроксена / Р.А. Зильберг,

В.Н. Майстренко, Ю.Б. Терес [и др.] // Журнал аналитической химии. – 2023. – Т. 78, № 7. – С. 648-661.

5. Voltammetric electronic tongue for identification of naproxen pharmaceuticals by manufacturer / R.A. Zilberg, E.O. Bulysheva, Y.B. Teres [et al.] // *Chimica Techno Acta*. – 2025. – Vol. 12, No. 2. – P. 12204.

6. Voltammetric determination of bisoprolol on a glassy carbon electrode modified by poly(arylene phthalide) / R.A. Zil'berg, Y.A. Yarkaeva, A.V. Sidel'nikov [et al.] // *Journal of Analytical Chemistry*. – 2016. – Vol. 71, No. 9. – P. 926-931.

7. Идентификация лекарственных средств на основе бисопролола с использованием вольтамперометрического «электронного языка» / Р.А. Зильберг, А.В. Сидельников, Ю.А. Яркая [и др.] // Вестник Башкирского университета. – 2017. – Т. 22, № 2. – С. 356-363. – EDN ZAOSZR.

© Круглова А.А., Волкова А.А., Зильберг Р.А., 2025

УДК 544.77.03

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СОДЕРЖАНИЯ АСФАЛЬТЕНОВ С ПОМОЩЬЮ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ И МЕТОДА PLS-РЕГРЕССИИ

Кувшинов А.С., Бикмеева А.Х., Бикмеев Д.М.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет,
Уфа, Россия*

В составе нефти, помимо основных углеводородов, присутствуют соединения с полициклическими ароматическими или нафтоароматическими ядрами, содержащие гетероатомы и боковые заместители. Эти компоненты объединяются в группу смолисто-асфальтеновых веществ, наиболее полярной и высокомолекулярной частью которых являются асфальтены. Их содержание оказывает существенное влияние на коллоидную стабильность нефти и формирование асфальтосмолопарафиновых (АСПО) отложений, затрудняющих добычу, транспортировку и переработку [1]. В этой связи определение концентрации асфальтенов важно для оценки поведения нефти при изменении термобарических условий и разработки мер по предупреждению отложений.

Инфракрасная спектроскопия зарекомендовала себя как быстрый и эффективный метод анализа нефтяных систем, позволяющий получать информацию о групповых составах на основе совокупности полос поглощения [2]. Обработка спектров с помощью методов хемометрики, таких как PLS-регрессия, позволяет строить модели для прогнозирования содержания компонентов, включая асфальтены [3].

В данной работе были исследованы образцы нефти с помощью ИК- Фурье спектрометра «i-Red 7800 u» в диапазоне частот 4000-400 см⁻¹ с использованием пластинок из KBr. Для каждой нефти дополнительно было проведено определение содержания асфальтенов методом SARA.

С помощью метода PLS была построена регрессионная модель для прогнозирования содержания асфальтенов в нефти. Коэффициент

детерминации составил 0,920, среднеквадратичная ошибка калибровки – 1,22 % масс.

Литература

1. Бикмеев Д.М., Бикмеева А.Х., Бадикова А.Д. Физико-химические свойства асфальтенов. – У.: Аэтерна, 2024. – 110 с.
2. Balabin R.M., Safieva R.Z. Capabilities of near Infrared Spectroscopy for the Determination of Petroleum Macromolecule Content in Aromatic Solutions // Journal of Near Infrared Spectroscopy. – 2007. – V. 15. – P. 343-349.
3. Wold S., Sjöström M., Eriksson L. PLS-regression: a basic tool of chemometrics // Chemometrics and Intelligent Laboratory Systems. – 2001. – V. 58. – P. 109-130.

© Кувшинов А.С., Бикмеева А.Х., Бикмеев Д.М., 2025

УДК 541.14:547.551.2

ИЗУЧЕНИЕ ИЗОТЕРМ АДсорбции ЭНАНТИОМЕРОВ ПИНЕНА НА МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКОЙ КАРКАСНОЙ СТРУКТУРЕ Zn-Thr(HCl)

Кузнецова П.В.¹, Баландина К.С.¹, Маминева Я.В.¹, Zhihui Zhang²

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Changzhou University, Changzhou, Jiangsu Province, China

Современные хиральные сорбенты, которые применяются в хроматографии, основаны на принципах, предложенных Даванковым и для разделения энантиомеров используют молекулярное распознавание [1]. Эти сорбенты, как правило, обеспечивают хиральное разделение за счет трехточечного связывания с хиральным селектором. Однако, их ограниченная селективность и необходимость использования высоких концентраций для эффективного разделения, затрудняют их широкое применение в препаративной хроматографии.

Хиральность не ограничивается молекулярным уровнем и проявляется в более сложных системах. Кристаллы, полученные методом Вьедмы, содержащие только одну хиральную форму, способны распознавать и разделять хиральные молекулы, в частности при высоких концентрациях. Однако невысокая удельная поверхность таких неподвижных фаз является недостатком. Поэтому, важным направлением является конструирование материалов с развитой поверхностью, способных к формированию надмолекулярных хиральных структур, для увеличения эффективности хирального разделения.

Сегодня большим интересом с точки зрения способности к хиральному распознаванию пользуются металлоорганические каркасные структуры (MOF), которые имеют значительную поверхностную площадь и высокую пористость [2].

В работе исследовали MOF Zn-Thr(HCl) и его способность к хиральному распознаванию с помощью газовой хроматографии. В качестве

адсорбируемых веществ были выбраны энантиомеры пинена, с объемами проб от 0,1 мкл до 1 мкл.

В ходе эксперимента было выявлено, что наиболее высокое значение коэффициента селективности $\alpha=1,07$ достигается при больших разбавлениях при низкой температуре, равной 50 °С.

Однако при последовательном повышении температуры с шагом 10 °С было видно по снятым изотермам снижение коэффициента энантиоселективности вплоть до температуры 100°С.

Все полученные данные были засвидетельствованы статистическим анализом значений адсорбции методом t-критерия.

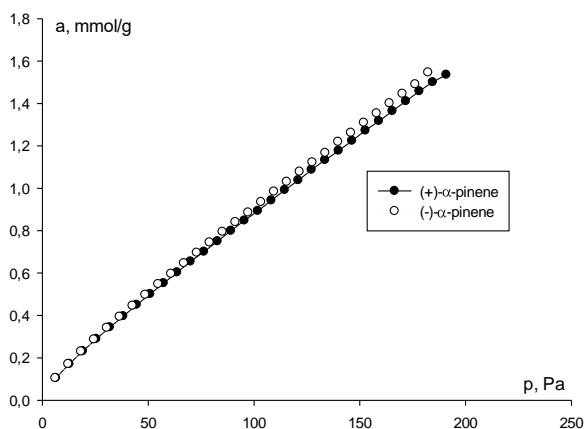


Рис. 1. Изотермы адсорбции энантиомеров лимонена при 50 °С.

Хиральный MOF Zn-Thr(HCl) представляет большую возможность для будущих исследований, открывая прогрессивные перспективы в области хирального распознавания и раздельного анализа рацемической смеси.

Литература

1. Davankov V.A., Chirality, 1997, 9, 99-102
2. Sharafutdinova Yu.F., Balandina K.S., Pavlova I.N., Agliullin M.R., Guskov V.Yu. New J. Chem, 2023, 47, 11086.

© Кузнецова П.В., Баландина К.С., Маминева Я.В., Zhihui Zhang, 2025

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОБОПОДГОТОВКИ ОБРАЗЦОВ КРОВИ
МЕТОДОМ ЛИПОФИЛЬНОГО ИЗВЛЕЧЕНИЯ БУТАНОЛОВОЙ
СМЕСЬЮ ПРИ АНАЛИЗЕ МЕТОДОМ АТОМНО-ЭМИССИОННОЙ
СПЕКТРОМЕТРИИ С ИНДУКТИВНО-СВЯЗАННОЙ ПЛАЗМОЙ

Купцова А.П., Вариошкин П.Н.

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

В настоящее время атомно-эмиссионная спектроскопия с индуктивно-связанной плазмой (далее АЭС-ИСП) является самым применяемым методом качественного и количественного определения элементов. Для анализа методом АЭС-ИСП важным этапом является пробоподготовка.

Пробоподготовка играет ключевую роль в исследованиях. Она позволяет разрушить сложные матричные компоненты и выделить целевые аналиты в биологических образцах. Проблема методов пробоподготовки биообразцов заключается в том, что большинство из них трудоемкие, длительные и недостаточно стерильны.

В данной работе будет предложен метод пробоподготовки с использованием бутаноловой смеси. Ранее этот способ при АЭС-ИСП не применялся. Основан он на извлечении элементов растворителем. Органические растворители эффективно извлекают липофильные вещества, и проводят разделение фаз для дальнейшего анализа компонентов. Образец крови (0,2 мл) помещают в пластиковые цилиндры и разбавляют раствором бутаноловой смеси в соотношении 1:30 после чего сразу отправляют на анализ [1].

В качестве образца крови использовался сертифицированный стандартный образец ClinChek Whole Blood Control for Trace Elements, Level I, II, III (Recipe Chemicals + Instruments GmbH, Германия). Для определения содержания химических элементов использовали атомно-эмиссионный спектрометр Optima 2000DV (PerkinElmer Inc., США). Для проведения работы были выбраны такие металлы как марганец, алюминий, кадмий, кобальт и свинец.

По результатам исследования провели сравнительный анализ метода пробоподготовки образцов крови с использованием бутаноловой смеси и сделали вывод о том, что данный метод позволяет существенно сократить время на процесс пробоподготовки и провести извлечение элементов в пределах аттестованного значения стандартного образца крови.

Литература

1. Грабеклис А.Р., Шемаев М.Е., Морозова Г.Д., Стрижнева В.К. «Методика измерений массовых концентраций химических элементов в пробах крови методом

УДК 543.552

СЕНСОР НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ИМПРИНТИРОВАННОГО ПОЛИАКРИЛАМИДА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЛИНКОМИЦИНА

Кутепова П.Р., Попова А.А., Абдуллин Я.Р., Назыров М.И.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В данной работе был разработан сенсор на основе стеклоуглеродного электрода (СУЭ), модифицированного электрохимически синтезированным молекулярно-импринтированным полиакриламидом (ПАА) для определения линкомицина. Электрохимический синтез ПАА проводился с помощью циклической вольтамперометрии в диапазоне потенциалов от 0.5 до 1.8 В и со скоростью развертки потенциалов 25 мВ/с в течении 10 циклов в растворе, содержащем 5 мМ мономера АА, 1 мМ линкомицина и 0.1 М LiClO_4 . В качестве растворителя для извлечения молекул шаблона из полимерной матрицы применялся 1 М раствор HCl , продолжительность смывки составляла 3 минуты при постоянном перемешивании.

Была изучена чувствительность сенсора к линкомицину в диапазоне концентраций от 0.03 мМ до 0.5 мМ. Результаты исследований по определению антибиотиков на разработанном сенсоре, представленные на рис. 1, свидетельствуют о высокой селективности сенсора по отношению к молекуле линкомицина. Более того, сенсор продемонстрировал увеличение тока пика в сравнении с чистым СУЭ. Во всех случаях при определении линкомицина RSD составило не более 8.5%, что говорит о применимости разработанного инструмента для дальнейшего определения антибиотика.

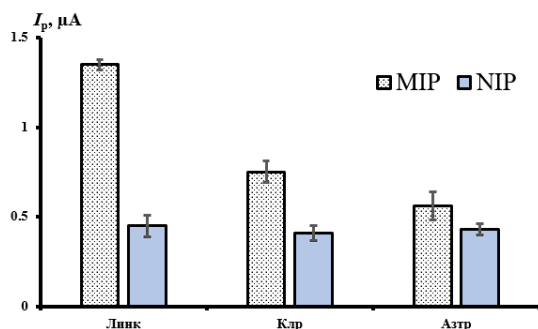


Рис. 1. Определение на МИП и НИП сенсоре 0.5 мМ растворов линкомицина, кларитромицина и азитромицина.

Литература

1. Yarkaeva Yu.A, Nazyrov M.I., Abdullin Ya.R. [et al.] Enantioselective voltammetric sensor based on mesoporous graphitized carbon black Carbopack X and fulvene derivative. – Chirality, 2023. – Vol. 1, P. 11.

© Кутепова П.Р., Попова А.А., Абдуллин Я.Р., Назыров М.И., 2025

УДК 543.27:543.635

О ВЛИЯНИИ ДОБАВОК НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЛЕЙ В ПОКРЫТИЕ ПЬЕЗОСЕНСОРОВ НА СОРБЦИЮ ЛЕТАЧИХ СОЕДИНЕНИЙ

Левченко В.А.¹, Шуба А.А.¹, Падня П.Л.², Стойков И.И.²

¹Воронежский государственный университет инженерных технологий,
факультет экологии и химической технологии, Воронеж, Россия

²Казанский (Приволжский) федеральный университет, Химический
институт им. А.М. Бутлерова, Казань, Россия

Методы анализа с применением различных типов сенсоров, основным рабочим элементом которых является чувствительный слой, все чаще становятся частью современных технологий. Изучение процессов, формирующих аналитический сигнал, в зависимости от состава и структуры этого слоя является актуальной задачей.

Цель работы – исследование влияния добавления неорганических солей (хлориды железа, цинка и сурьмы) к тиакаликс[4]арену в конфигурации *частичный конус* в различных мольных соотношениях на эффективность сорбции летучих соединений методом пьезокварцевого микровзвешивания.

Исследовали сорбцию равновесной газовой фазы над двадцатью восьмью летучими органическими и неорганическими соединениями (спирты, альдегиды, кетоны, аммиак (10% масс. раствор) и амины, вода) на тонких покрытиях методом пьезокварцевого микровзвешивания на приборе «МАГ-8». Покрытия на электродах пьезокварцевых резонаторов формировали методом статического испарения капли из ацетоновых растворов: 1) тиакаликс[4]арена в конфигурации *частичный конус* (расо), 2) расо с добавлением хлоридов железа (III), цинка, сурьмы в мольных соотношениях от 1:2 до 1:22, по два покрытия для каждой соли. Эффективность сорбции летучих соединений исследуемыми покрытиями оценивали по величине удельной массовой чувствительности микровзвешивания $S_m^{уд}$ (Гц·см³/мкг²) паров веществ.

Установлено, что величины $S_m^{уд}$ в 2-10 раз больше для покрытий, сформированных из растворов тиакаликс[4]арена с добавлением солей, чем для покрытий из тиакаликс[4]арена без добавок. Закономерно наблюдалось увеличение $S_m^{уд}$ с увеличением мольной доли соли в растворе, из которого формировали покрытие. При этом для покрытий, сформированных из

растворов тиакаликс[4]арена и соли цинка в мольном соотношении более 1:10, $S_m^{уд}$ паров веществ растёт незначительно, не более чем в два раза. Наиболее значительное изменение $S_m^{уд}$ (от 1,5 до 8 кратного увеличения) наблюдалось для покрытий, сформированных из растворов с добавлением соли железа (в соотношениях от 1:2 до 1:10). Для покрытий на основе тиакаликс[4]арена с добавлением хлорида сурьмы изменение $S_m^{уд}$ в большей степени зависит от образования надмолекулярных структур в растворе.

© Левченко В.А., Шуба А.А., Падня П.Л., Стойков И.И., 2025

УДК 541.14:547.551.2

ИЗУЧЕНИЕ СПОСОБНОСТИ MOF AG-Zn(HCl)-0,4 К ХИРАЛЬНОМУ РАСПОЗНАВАНИЮ

Маминева Я.В.¹, Баландина К.С.¹, Кузнецова П.В.¹, Zhihui Zhang²

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Changzhoy University, Changzhoy, Jiangsu Province, China

Металлоорганические каркасы (MOF) продолжают привлекать внимание исследователей благодаря своим выдающимся свойствам. Эти структуры представляют собой современный класс гибридных материалов, состоящих из кристаллической решётки, образованной соединением неорганических узлов и органических лигандов, что позволяет точно контролировать их химический состав. Благодаря этой гибкости и универсальности, MOF считаются одними из наиболее перспективных материалов для широкого спектра задач [2].

В настоящее время металлоорганические каркасные структуры (MOF) активно изучаются с точки зрения их потенциала в области хирального распознавания, поскольку они обладают высокой пористостью и большой удельной поверхностью. Область распознавания энантимеров очень важна, так как один из энантимеров может положительно влиять на организм человека, а другой - отрицательно [1].

В данной работе исследовался хиральный металлоорганический каркас AG/Zn(HCl)-0.4 и его способность к хиральному распознаванию методом газовой хроматографии.

Оценку эффективности хирального разделения неподвижной фазы проводили путем снятия изотерм адсорбции при различных температурах. В качестве тестовых соединений использовались энантимеры лимонена. Способность к хиральному распознаванию оценивалась по данным изотерм адсорбции, полученных при разных температурных режимах.

Получено, что наибольшая энантиоселективность достигалась при 90 °С (рис.1). Ее значение было равно 1.2. Различие подтверждалось статистическим анализом значений адсорбции методом t-критерия.

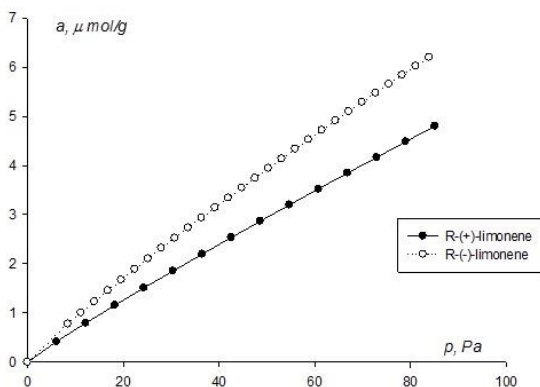


Рис. 1. Изотермы адсорбции энантимеров лимонена при 90 °С.

Таким образом, хиральный MOF AG/Zn(HCl)-0.4 демонстрирует высокий потенциал для последующих исследований, создавая перспективные возможности в области хирального распознавания и разделения рацемических смесей.

Литература

1. Davankov V.A., Chirality, 1997, 9, 99-102
2. Sharafutdinova Yu.F., Balandina K.S., Pavlova I.N., Agliullin M.R., Guskov V.Yu. New J. Chem, 2023, 47, 11086.

© Маминева Я.В., Баландина К.С., Кузнецова П.В., Zhihui Zhang., 2025

УДК 543.554

ИЗУЧЕНИЕ АДсорбЦИИ ХИРАЛЬНЫХ ФОРМ ТРИПТОФАНА НА ЦЕОЛИТОПОДОБНОМ МАТЕРИАЛЕ БОРФОСФАТ МЕДИ $\text{LiCu}_2[\text{BP}_2\text{O}_8(\text{OH})_2]$

Мансурова Э.Р., Изибаева Д.В., Утеева Ж.Д.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Главным аспектом в стереохимии является понятие хиральность, описывающее молекулы, которые не совпадают со своими зеркальными отражениями, подобно левой и правой рукам. Такие молекулы, называемые энантиомерами, представляют собой стереоизомеры с идентичными физическими и химическими свойствами, за исключением хиральных сред, где их взаимодействия – например, с поляризованным светом или биологическими системами – существенно различаются[1]. При равных

пропорциях эти пары образуют рацемическую смесь, которая не проявляет оптического вращения из-за взаимной компенсации эффектов.

Применение рацемических смесей в фармацевтических препаратах способно провоцировать нежелательные последствия для организма. Например, L-эналаприл – применяется для лечения гипертонии, а D – эналаприл не проявляет терапевтической активности[2]. В связи с этим необходимо синтезировать хиральные сорбенты, применяемые в хроматографии, которые способны к дифференциации оптических изомеров благодаря стереоспецифическому распознаванию. Такими сорбентами могут служить энантиоморфные кристаллы, например, металлоорганические каркасы и цеолитоподобные материалы.

В рамках исследования был изучен синтезированный из ахиральных прекурсоров хиральный борофосфат меди $\text{LiCu}_2[\text{BP}_2\text{O}_8(\text{OH})_2]$, стереохимия которого подтверждена методом кругового дихроизма[3]. В рамках эксперимента изучали процесс сорбции оптических изомеров триптофана в жидкой фазе при динамических условиях. Мониторинг концентрационных изменений в растворах осуществляли спектрофотометрическим методом в реальном времени.

На рис. 1 представлена кинетическая кривая при 40°C. Наблюдается аномальная конфигурация кривой. D – триптофан демонстрирует более высокие значения адсорбции и переходит в равновесную область раньше на 30 минут (D-триптофан выходит на 150 минуте, L-триптофан на 180 минуте). Значение коэффициента энантиоселективности составляет 2.5 в кинетической, и 1.3 в равновесной области. Энантиоселективность повышена в равновесной области при данной температуре, что указывает на возможность использовать данную температуру как рабочую. Значимость в различиях в величинах адсорбции проверялась по t критерию (табл. 1)

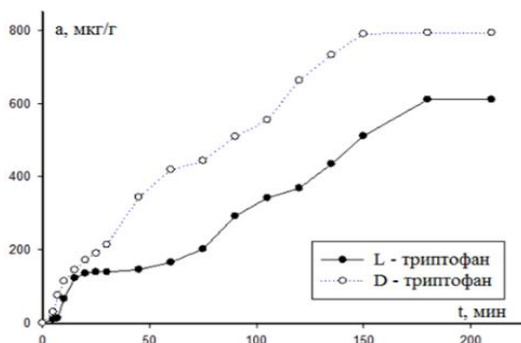


Рис.1. Кинетическая кривая адсорбции энантиомеров триптофана при температуре 40°

Таблица 1

Значение доверительной вероятности p , рассчитанной при выполнении t -критерия, при температуре 40°C ($\alpha=0.05$)

t, мин	p	t, мин	p
5	$2,6 * 10^{-9}$	75	$6,8 * 10^{-9}$
7	$1,0 * 10^{-9}$	90	$2,0 * 10^{-8}$
10	$2,2 * 10^{-8}$	105	$3,3 * 10^{-8}$
15	$1,7 * 10^{-6}$	120	$1,7 * 10^{-8}$
20	$4,7 * 10^{-7}$	135	$2,5 * 10^{-8}$
25	$1,6 * 10^{-7}$	150	$4,7 * 10^{-8}$
30	$5,0 * 10^{-8}$	180	$3,1 * 10^{-7}$
45	$5,2 * 10^{-9}$	210	$3,1 * 10^{-7}$
60	$4,2 * 10^{-9}$		

Литература

1. Ariëns, E.J.(1984). Stereochemistry and Biological Activity of Drugs. // Biochemical Pharmacology, 33(8), pp. 1181-1186.
2. Редди И.К., Мехвар Р. Хиральность в дизайне и разработке лекарств / под ред. И.К. Редди, Р. Мехвар. – Нью-Йорк: Marcel Dekker, 2004. – Гл. 5. – С. 112-145.
3. MiaoYang, XinjieLi, Jihong Yu, Jingran Zhu, Xiaoxia Liu, Genfu Chene and Yan Yanc. // Dalton Trans., 2013, T. 42, С. 6298-6301.

© Мансурова Э.Р., Изибаева Д.В., Утеева Ж.Д., 2025

УДК 544.543

КИНЕТИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ АДСОРБЦИИ ЭНАНТИОМЕРОВ МЕНТОЛА НА ХИРАЛЬНЫХ КРИСТАЛЛАХ $CsCuCl_3$ С СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОЙ ХИРАЛЬНОСТЬЮ

Минлибаева А.А., Альмухаметова Э.И., Колоскова А.М., Белоногов Э.В.
Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Актуальность разделения рацемических смесей растёт вследствие широкого применения энантиочистых соединений в фармацевтике и химической промышленности. Энантиомеры одного вещества могут

проявлять как лечебные, так и токсические свойства, что требует эффективных методов их разделения. Одним из перспективных подходов является использование хиральных фаз на основе энантиоморфных кристаллов с супрамолекулярной хиральностью, таких как кристаллы CsCuCl_3 . Целью данной работы является исследование кинетики адсорбции ментола на поверхности CsCuCl_3 для оценки их способности к хиральному распознаванию.

Модифицированный CsCuCl_3 образец силикагеля массой 0,04 г добавлялся в раствор D- и L- ментола, растворенного в н-гептане. Общий объем раствора составлял 50 мл. При интенсивном размешивании каждые 20 секунд отбирались пробы для последующего анализа.

Ранее была показана принципиальная способность полученных кристаллов к хиральному распознаванию. По полученным данным на изотерме адсорбции наблюдается три области. В I области (область Генри) при низких заполнениях адсорбция энантиомеров одинакова. Во II области (область нелинейной изотермы до монослоя и несколько выше) наблюдаются различия в адсорбции. В III области (область полислойной адсорбции) различие снова не наблюдается. На примере кристаллов CsCuCl_3 изучена кинетика адсорбции ментолов в трёх областях изотермы.

По полученным данным наблюдается необычный феномен. Так, в I и III областях наблюдается энантиоселективность, несмотря на отсутствие хирального распознавания в равновесной области, в кинетической области значения адсорбции различались. Максимальный коэффициент энантиоселективности составлял 2,28 при концентрации 20 мкг/мл (область Генри) и 3,41 при концентрации 800 мкг/мл (III область на изотерме адсорбции). Наблюдаемая энантиоселективность только в кинетической области доказывает различие в скоростях адсорбции ментолов на изучаемых хиральных кристаллах.

Обнаруженный феномен может быть использован в процессах хроматографического энантиоселективного разделения, асимметрическом катализе сенсорах для достижения более высокой энантиоселективности.

© Минлибаева А.А., Альмухаметова Э.И., Колоскова А.М.,
Белоногов Э.В., 2025

ОЦЕНКА СТАБИЛЬНОСТИ ЛВ МНН ФАВИПИРАВИР
В ЛЕКАРСТВЕННОЙ ФОРМЕ В УСЛОВИЯХ ВОЗДЕЙСТВИЯ
УФ- ИЗЛУЧЕНИЯ

Минькин В.С., Климашина А.А., Ускова Е.Н.
ФГБОУ ВО «МГУ им. Н.П. Огарёва», Саранск, Россия

Ультрафиолетовое излучение способно существенно влиять на стабильность и эффективность лекарственных препаратов. Фотохимические реакции приводят к разрушению активных ингредиентов, образованию побочных продуктов, что обуславливает снижение терапевтической активности лекарственных препаратов, так и образование токсичных примесей.

Фавипиравир, являющийся активным действующим веществом лекарственного препарата «Ареплевир», достаточно сильно подвержен фотодеструкции, что ставит перед производителем серьёзные вызовы касательно обеспечения стабильности выпускаемой продукции [1].

Для оценки устойчивости ЛВ МНН Фавипиравир в составе лекарственной формы целесообразно использовать метод УФ-спектрофотометрии, так как фавипиравир за счет наличия пиазинового фрагмента в сочетании с оксо- и карбоксо-группами, имеет способность поглощать излучение в центральной и ближней области УФ-области.

Объектом исследования стала лекарственная форма «Ареплевир, таблетки» с аттестованным содержанием действующего вещества 200,0 мг. Растворы реагентов готовились с применением реактивов квалификации х.ч. Спектры растворов снимали на спектрофотометре «Shimadzu UV-1800» в УФ-диапазоне 190 – 400 нм.

Для приготовления серии растворов использовались две разные партии лекарственного препарата «Ареплевир», из каждой партии было взято по 5 таблеток после перемешивания партии из 20 таблеток. Каждую таблетку взвешивали и измельчали до состояния однородного порошка. После чего рассчитывали массу навески порошка растертых таблеток, содержащую 20 мг фавипиравира. Навески помещали в сухие колбы вместимостью 25,0 мл, и проводили перевод фавипиравира в раствор в лабораторном шейкере в течение 1,5 часов до полного извлечения действующего вещества, затем отделяли вспомогательные вещества фильтрованием. Фильтраты разбавляли в колбе вместимостью 25,0 мл, в результате получая раствор с концентрацией фавипиравира 0,1 мг/мл.

В структуре электронного спектра поглощения в области от 190 до 600 нм в водном растворе фавипиравира наблюдалось три выраженных максимума при λ 226 нм, 322 нм и 361 нм, идентичные результаты были получены нами и для самой субстанции МНН Фавипиравир [2]

Затем, растворы фавипиравира, извлеченного из таблеток из каждой партии были подвержены УФ-облучению в фотолизной камере. Длительность облучения составляла 5, 10, 15 и 25 минут, после каждого времени экспозиции были получены соответствующие спектры поглощения. Для всех испытуемых образцов в обеих сериях были получены результаты с высокой воспроизводимостью аналитических сигналов (рис. 1).



Рис. 1. Влияние УФ-облучения на поглощающую способность МНН Фавипиравир, извлеченного из лекарственной формы, в УФ-области (1– исходный, 2 – время экспозиции 5 мин, 3 – время экспозиции 10 мин, 4 – время экспозиции 15 мин, 5 – время экспозиции 25 мин)

Облучение образцов заметно сказывалось на структуре электронных спектров поглощения фавипиравира, что выражалось в уменьшении интенсивности пика при $\lambda = 226$ нм, а при времени экспозиции 25 мин он пропадал. Спустя сутки после облучения, также был снят спектр каждого из растворов, но в этом случае заметных изменений не наблюдалось. Выявленные изменения свидетельствуют как об уменьшении концентрации активного вещества фавипиравра в исследуемых растворах, так и его фотолитической деструкции.

Литература

1. Kelemen, K. Photosensitivity Reactions Induced by Photochemical Degradation of Drugs / K. Kelemen, G. Hancu, E. Kacsó // *Advanced Pharmaceutical Bulletin*. – 2022. – Т. 12, Iss. 1. – Р. 77-85.
2. Минькин В.С., Зотова М.А., Ускова Е.Н. Влияние УФ-излучения на стабильность лекарственного препарата МНН Фавипиравир. В кн. *Достижения молодых ученых: химические науки. Сб. тез. IX Всероссийской молодежной конференции*. Уфа, 2024. – С. 151-152

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХИРАЛЬНОЙ СПОСОБНОСТИ ЦЕОЛИТОПОДОБНОГО МАТЕРИАЛА $\text{Co}_{1,28}(\text{NH}_4)_{0,44}(\text{BP}_2\text{O}_8)(\text{H}_2\text{O})_{2,41}$

Нуретдинова А.Ш., Яндавлетова А.Д., Утеева Ж.Д.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В настоящее время существует значительный интерес к разработке универсальной методики для разделения энантиомеров, потому что это является важным аспектом для обеспечения безопасности и эффективности различных веществ, включая фармацевтические препараты. В данном исследовании рассматривается способность хирального распознавания цеолитоподобного материала $\text{Co}_{1,28}(\text{NH}_4)_{0,44}(\text{BP}_2\text{O}_8)(\text{H}_2\text{O})_{2,41}$ [1], хиральность которого была определена с помощью спектров кругового дихроизма.

Для энантиомеров α -пинена наивысший коэффициент селективности был зафиксирован при температуре 70°C ($\alpha = 1,18$), лучше адсорбировался (-)- α -пинен, а изотерма адсорбции соответствует III типу по классификации БЭТ.

Таблица 1

Параметры аппроксимации изотерм адсорбции α -пинена уравнением
Фрейндлиха

T	n		K		r	
	(-)- α -pinene	(+)- α -pinene	(-)- α -pinene	(+)- α -pinene	(-)- α -pinene	(+)- α -pinene
60	0.67	0.61	$9.7 \cdot 10^{-5}$	$3.0 \cdot 10^{-5}$	0.97	0.98
65	0.66	0.64	$6.1 \cdot 10^{-5}$	$5.1 \cdot 10^{-5}$	0.99	0.99
70	0.68	0.69	$7.1 \cdot 10^{-5}$	$6.5 \cdot 10^{-5}$	0.99	0.99
75	0.74	0.73	$1.0 \cdot 10^{-4}$	$9.0 \cdot 10^{-5}$	0.99	0.99
80	0.72	0.72	$6.8 \cdot 10^{-5}$	$6.9 \cdot 10^{-5}$	0.99	0.99

Коэффициент n отражает отклонение участка изотермы адсорбции от линейной зависимости. Коэффициент K соответствует значению адсорбции при концентрации адсорбтива, равной одному. По данным таблицы 1 коэффициенты n и K для (-)- α -пинена и (+)- α -пинена разные, следовательно, можно сделать вывод о различимости адсорбции энантиомеров.

Литература:

1. Min Li V. S., Magdalena Wilk-Kozubek, Yaroslav Mudryk, Tarek Alammam, Vitalij K. Pecharsky, and Anja-Verena Mudring. Open-Framework Manganese(II) and Cobalt(II)

УДК 543.554

ИЗУЧЕНИЕ MOF {AG-ZN(HCL)-0,4} В КАЧЕСТВЕ ХИРАЛЬНОГО СОРБЕНТА

Осокина Н.А.¹, Баландина К.С.¹, Zhihui Zhang²

¹Уфимский университет науки и технологии, Уфа, Россия

²Changzhoy University, Changzhoy, Jiangsu Province, China

Исследование пространственной организации молекулы представляет фундаментальное значение в фармацевтической науке, поскольку от стереохимических особенностей зависит взаимодействие оптических изомеров с живыми организмами. Общеизвестно, что оптические антиподы одного вещества могут демонстрировать противоположную биологическую активность, например, препарат талидомид. Его (R)- энантиомер обладает терапевтическим действием, тогда как (S)- энантиомер проявляет тератогенную активность [1]. Для минимизации токсичности препарата, возникает необходимость создания хиральной неподвижной фазы для разделения энантиомеров.

Несмотря на существование множества сорбентов, основанных на межмолекулярных взаимодействиях, их практическое использование ограничено низкой селективностью и узким диапазоном рабочих концентраций. Это обуславливает необходимость создания материалов с надмолекулярной хиральностью, характеризующихся высокой удельной поверхностью, способностью к разделению в условиях повышенных концентраций и обеспечивающих хорошую селективность. Одним из таких сорбентов является металлорганические каркасы (МОФ) [2].

В работе синтезирован и изучен MOF AG-Zn(HCl)-0,4. Способность к хиральному распознаванию изучалась методом газовой хроматографии при помощи снятия изотерм адсорбции. Размер пор хиральной структуры составляет 57,7Å. В качестве тест-сорбатов были использованы энантиомеры пинена.

Изучение адсорбции энантиомеров α-пинена проводилось в температурном диапазоне 90-120°C. Наилучший коэффициент селективности составил при температуре 100°C.

На рисунке 1 представлена изотерма адсорбции пинена при температуре 100°C. При данной температуре (-)-α-пинен адсорбируется лучше. Изотермы адсорбции демонстрируют линейную зависимость, описываемую

уравнением Генри. Различие подтверждалось статистическим анализом значений адсорбции методом t-критерия (таб. 1).

Полученные данные свидетельствуют, что данный сорбент селективен к распознаванию α -пиненов. Материал можно рассматривать для дальнейшего препаративного разделения изомеров.

Таблица 1

Значение доверительной вероятности, рассчитанной при выполнении t-критерия, для адсорбции α -пиненов при температуре 100°C ($\alpha=0.05$)

P, kPa	p	P, kPa	p
7.33	0.0002	119.97	0.0004
32.66	0.0001	127.30	0.0004
39.99	0.0001	159.96	0.0004
47.32	0.0011	167.29	0.0005
72.65	0.0003	174.62	0.0007
79.98	0.0007	199.90	0.0004

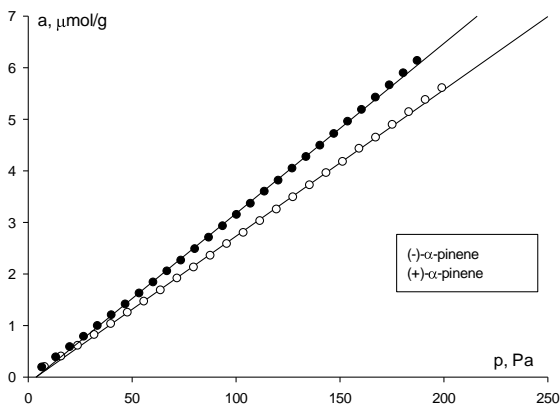


Рис. 1. Изотерма адсорбции пинена при температуре 100°C

Литература

- 1.Vargesson, N. Thalidomide-induced teratogenesis: History and mechanisms. – 2015. – Гл. 3 – С. 140-156.
- 2.Li, H., et al. Chiral Metal-Organic Frameworks for Enantiomer Separation // ACS Applied Materials & Interfaces. –2019. – С. 14425 – 14435.

© Осокина Н.А., Баландина К.С., Zhihui Zhang, 2025

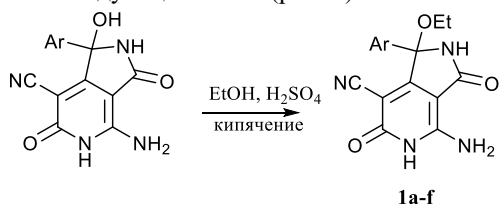
РАЗРАБОТКА НОВОГО АНАЛИТИЧЕСКОГО РЕАГЕНТА НА ОСНОВЕ ПИРРОЛОПИРИДИНА ДЛЯ КОЛИЧЕСТВЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИОНОВ РТУТИ (II)

Рамская Е.Н., Бардасов И.Н., Алексеева А.Ю.

ФГБОУ ВО «Чувацкий государственный университет им. И.Н. Ульянова»,
Чебоксары, Россия

С развитием промышленности некоторые токсичные металлы стали чрезмерно использоваться на различных предприятиях, и в результате в водные потоки попадает огромное количество загрязняющих веществ, содержащих металлы. Что касается токсичности, то ион ртути является наиболее опасным, с катастрофическими последствиями для биологических систем. В результате биоаккумуляции в организме человека ионы ртути могут вызывать ряд проблем со здоровьем, таких как неврологические нарушения, двигательные расстройства, почечная недостаточность, когнитивные расстройства и болезнь Минамата. Основным источником поступления ртути в организм человека считается ежедневный рацион, например, употребление в пищу зараженной рыбы [1].

Для выявления и количественного анализа ионов ртути (II) в образцах окружающей среды, включая природные и сточные воды, мы предлагаем использовать реагент на основе производных пирролопиридина, синтезированных по следующей схеме (рис. 1):



Ar = Ph (a); Ar = 4-MeC₆H₄ (b); Ar = 4-MeOC₆H₄ (c);
Ar = 4-BrC₆H₄ (d); Ar = 4-ClC₆H₄ (e); Ar = 4-NO₂C₆H₄ (f)

Рис. 1. Схема синтеза исследуемых соединений **1a-f**

В результате спектроскопического анализа флуоресценции соединений **1a-f**, было выявлено, что соединение **1d** демонстрирует наибольшее тушение флуоресценции при добавлении ионов ртути в сравнение с другими соединениями данного ряда. В связи с этим, соединение **1d** было выбрано для более углубленного исследования.

В ходе испытаний было установлено, что достижение термодинамического равновесия в системе не происходит мгновенно, а требует определенного временного интервала, поэтому все образцы выдерживались 40 минут после добавления ионов ртути (II).

Оптимальным значением pH для проведения анализа является pH, равный 6. Метод изомолярных серий показал, что соединение **1d** образует комплекс с ионами ртути в стехиометрическом соотношении близком к 1:2 (рис. 2).

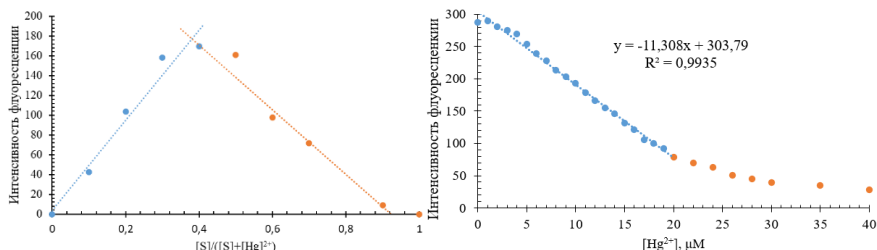


Рис. 2. График Джоба для определения стехиометрии комплекса между соединением **1d** и ионами ртути (слева) и линейная зависимость между интенсивностью флуоресценции и концентрацией ионов ртути (II) (справа)

Для количественной оценки эффективности работы сенсора было проведено флуориметрическое титрование в буферном растворе с pH 6, используя раствор соли ртути (II) (рис. 2). При добавлении ионов ртути наблюдалось линейное уменьшение флуоресценции до достижения двойного избытка, после чего снижение интенсивности флуоресценции замедлялось и практически достигало минимума при четырехкратном избытке ионов. Данное исследование показало низкий предел обнаружения, который составил $1,6 \cdot 10^{-6}$ моль/л. Также определили константы тушения и связывания, которые составили $5,35 \cdot 10^4 \text{ M}^{-1}$ и $9,87 \cdot 10^4 \text{ M}^{-1}$ соответственно.

В результате проведенного исследования был разработан реагент на основе пирролопиридина, который демонстрирует селективное взаимодействие с ионами ртути (II) и способен определять их в микромолярных концентрациях. Оптимальное значение pH для проведения анализов составляет 6,0. В процессе анализа растворы, после добавления ионов ртути (II), необходимо выдерживать примерно 40 минут для достижения равновесия.

Литература

1. Choudhury, N. Recent progress in pendant rhodamine-based polymeric sensors for the detection of copper, mercury and iron ions [Текст] / N. Choudhury, P. De // J. Macromol. Sci. Part A Pure Appl. Chem. Taylor & Francis, – 2021. – Vol. 58, – № 12. – P. 835-848.

ВЛИЯНИЕ КИСЛОТНОСТИ ФОНОВОГО ЭЛЕКТРОЛИТА
НА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОФЕИНА
МЕТОДОМ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИИ

Речкалов А.С., Агеенко Е.И.

Челябинский Государственный университет, Челябинск, Россия

Выбор фоновых растворов является важным аспектом для проведения электрохимических методов анализа, в том числе и вольтамперометрии. Правильно подобранный такой раствор способен повышать чувствительность электрода к определяемым компонентам, образуя формы, которые легче вступают в электрохимические реакции. Цель данной работы заключается в определении влияния кислотности фоновых электролитов на чувствительность количественного определения кофеина методом вольтамперометрии.

Для изучения влияния кислотности фона использовали электрод, модифицированный лигносульфонатом натрия. Модификация проводилась в несколько этапов:

1. Активация поверхности стеклоглеродного электрода в фосфатном буфере с pH 7,0, используя режим циклической развертки со скоростью 100 мВ/с от потенциала -200 мВ до +1200 мВ.
2. Электрод поместили в раствор лигносульфоната натрия (20 г/л) в присутствии смеси HNO_3 и H_2SO_4 . Модификацию проводили в потенциостатическом режиме при потенциале +900 мВ в течение 13,5 минут.
3. Модифицированный электрод стабилизировали в фосфатном буфере с pH 7,0. Стабилизация проводилась в режиме циклической развертки со скоростью 100 мВ/с от потенциала -200 мВ до +1000 мВ.

Вольтамперометрические определения проводили в трехэлектродной ячейке, состоящей из индикаторного стеклоглеродного электрода, хлоридсеребряного электрода сравнения и вспомогательного платинового электрода. Модифицированный электрод помещали в 0,1 М раствор фосфорной кислоты, с pH 1,65 и приливали стандартный раствор кофеина. Регистрацию пиков производили в диапазоне потенциалов от +1200 мВ до +1600 мВ, скорость развертки равна 50 мВ/с.

Изучили влияние кислотности фоновых электролитов на чувствительность определения кофеина. Значения pH варьировали в диапазоне от 1,65 до 5,0 (рис.1).

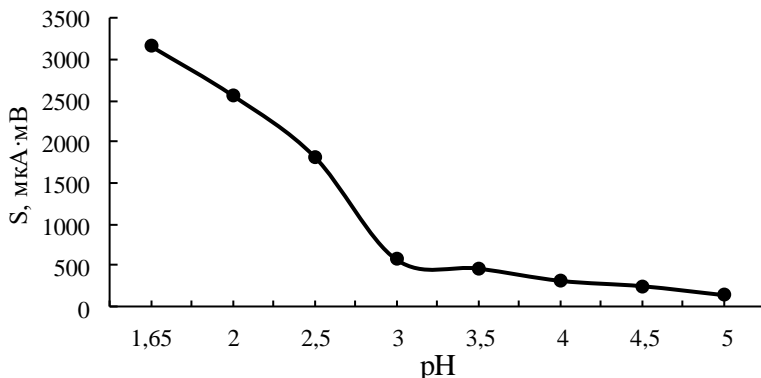
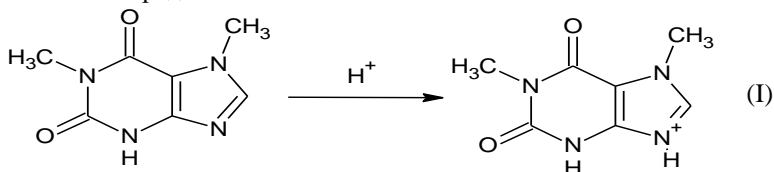


Рис. 1. Влияние кислотности фонового электролита на площадь пика окисления кофеина (S). Концентрация кофеина - 2 ммоль /л.

Из представленных данных следует, что наиболее выраженный аналитический сигнал наблюдается при использовании в качестве фонового электролита 0,1 М раствора фосфорной кислоты в качестве фонового электролита с pH 1,65 позволяет увеличить чувствительность методики. В кислой среде кофеин происходит протонирование иминного азота (I). При модифицировании лигносульфонатом на поверхности электрода образуется пленка с отрицательно заряженными функциональными группами. За счет электростатических сил происходит адсорбция протонированной формы кофеина, поэтому наблюдается увеличение интенсивности аналитического сигнала в кислой среде.



Применение 0,1 М раствора фосфорной кислоты в качестве фонового электролита с pH 1,65 увеличивает чувствительность количественного определения кофеина методом вольтамперометрии. В работе показано, что при смене фонового раствора с pH 5 до 1,65 происходит увеличение площади пика окисления более чем в 22 раза. Полученные результаты имеют важное практическое значение для разработки высокочувствительных методик анализа кофеинсодержащих объектов.

ВЛИЯНИЕ ДОБАВОК rGO В ТЕТРАБОРАТНЫЙ ЭЛЕКТРОЛИТ НА ЭЛЕКТРОАНАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОКСИДНЫХ СЛОЕВ НА ТИТАНЕ, ФОРМИРУЕМЫЕ ПЛАЗМЕННО-ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКИМ ОКСИДИРОВАНИЕМ

Салау И.О.¹, Васильева М.С.^{1,2}, Щитовская Е.В.^{1,2}, Ткачев В.В.¹

¹*Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия*

²*Институт химии ДВО РАН, Владивосток, Россия*

В качестве рН-сенсора для анализа водных объектов широко используют стеклянный электрод (СЭ), который имеет ряд недостатков, таких как хрупкость, сложность миниатюризации, ограничения при анализе сильноокислых, сильнощелочных и фтористых сред. В качестве альтернативы СЭ исследуют различные полупроводниковые электроды, которые лишены перечисленных недостатков. Особый интерес представляют сенсоры на основе TiO_2 , который имеет невысокую стоимость, низкую токсичность и высокую коррозионную стойкость [1]. Для улучшения электроаналитических свойств TiO_2 его модифицируют различными компонентами, включая rGO [2]. Одним из перспективных методов получения модифицированных оксидных слоев на титане является метод плазменно-электролитического оксидирования (ПЭО) - формирование оксидных слоев на металлах в условиях действия электрических искровых и микродуговых разрядов.

Целью настоящей работы являлось исследование влияния добавок частиц rGO в тетраборатный электролит на состав, морфологию и электроаналитические свойства оксидно-титановых слоев, формируемых на титане методом ПЭО.

Оксидные слои формировали методом ПЭО на титановых пластинах размером 2.0×2.0 см при плотности тока 0.1 А/см^2 в течение 10 мин в электролитах, содержащих $0.1 \text{ М Na}_2\text{B}_4\text{O}_7$ (Ti/TiO_2 образец) и $0.1 \text{ М Na}_2\text{B}_4\text{O}_7 + 0.25 \text{ г/л rGO} + 0.5 \text{ г/л лаурилсульфата натрия}$ ($\text{Ti/TiO}_2\text{-rGO}$ образец).

Рентгенофазовый анализ показал, что все сформированные покрытия содержат оксид титана в модификациях рутил и анатаз. Из рис. 1 видно, что оба образца имеют пористую поверхность. На поверхности $\text{Ti/TiO}_2\text{-rGO}$ образца наблюдаются частицы осажденного rGO.

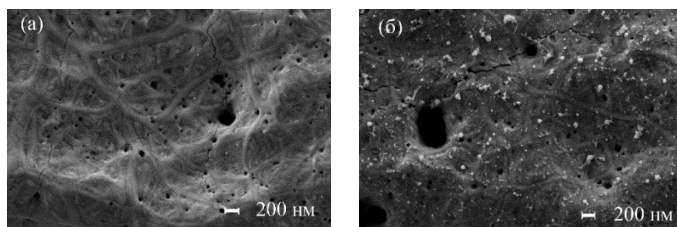


Рис. 1. СЭМ изображения Ti/TiO₂ (а) и Ti/TiO₂-rGO (б) образцов.

Исследование поведения ПЭО-сенсоров в прямой рН-метрии проводили в интервале рН 2÷12. Крутизна электродной функции для электрода Ti/TiO₂ составляет 50 мВ/рН, тогда как для Ti/TiO₂-rGO – 39 мВ/рН (рис. 2а). В то же время коэффициенты аппроксимации R^2 для Ti/TiO₂-rGO выше, чем для Ti/TiO₂, что может свидетельствовать о более высокой воспроизводимости результатов для модифицированного электрода.

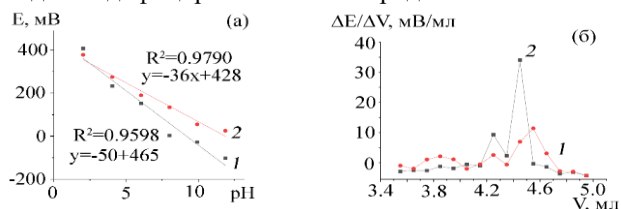


Рис. 2. E-(рН) зависимости (а) и дифференциальные кривые кислотно-основного титрования (б) для ПЭО-электродов: 1 – Ti/TiO₂; 2 – Ti/TiO₂-rGO.

На рис. 2б представлены дифференциальные кривые кислотно-основного титрования 0.1 М раствора NaOH 0.1 М раствором HCl. Кривые характеризуются ярко выраженными максимумами в точке эквивалентности для обоих ПЭО-электродов. Для Ti/TiO₂ электрода значение скачка потенциала несколько ниже, несмотря на более высокое значение крутизны электродной функции. Таким образом, модифицирование диоксидно-титановых ПЭО-слоев частицами rGO может привести к созданию стабильных и чувствительных рН сенсоров для анализа водных объектов.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института химии ДВО РАН FWFN (0205)-2025-0001.

Литература

1. Fog A., Buck R.P. Electronic semiconducting oxides as pH sensors // Sens. Actuators. 1984. V. 5. P. 137-146.
2. Wondimu T.H., Desissa T.D., Duma A.D. et al. Electrochemical deposition of reduced graphene oxide decorated with silver and nickel oxide nanoparticles for quantification of ascorbic acid in bottled fruit juice and vitamin C tablet // ECS Advances. 2023. V. 2

© Салау И.О., Васильева М.С., Щитовская Е.В., Ткачев В.В., 2025

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ АДсорбЦИИ
ЭНАНТИОМЕРОВ α -ПИНЕНА И ЛИМОНЕНА
НА МЕТАЛЛООГРАНИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ
НА ОСНОВЕ ОКСИДА ГЕРМАНИЯ

Самарина А.С., Шарафутдинова Ю.Ф., Гуськов В.Ю.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В современном научном мире растет спрос на оптически чистые соединения, поэтому множество значимых исследований были посвящены разработке новых типов неподвижных фаз с использованием пористых хиральных кристаллов. Начиная с 2011 года для хроматографического разделения были предложены металлоорганические структуры, обладающие высокой поверхностью и упорядоченной поровой структурой. В данной работе рассмотрена способность мофа на основе оксида германия и 2-метил-1,5-диаминопентана к хиральному распознаванию энантиомеров α -пинена и лимонена в процессе адсорбции.

Металлоорганическая структура была синтезирована с использованием гидротермального метода. Достоверность синтеза была подтверждена результатами порошковой рентгеновской дифракции и сканирующей электронной микроскопии, которые показали соответствие данным статьи [1]. Затем образец MOF был исследован в условиях обратной газовой хроматографии. Были получены и аппроксимированы изотермы адсорбции паров α -пинена при температурах 90-130 °С и лимонена при 110-160 °С. Изотермы для обоих тестируемых адсорбатов различались во всем диапазоне исследуемых температур, для оценки статистической значимости различий между изотермами адсорбции использовался метод t-теста. Максимальный коэффициент энантиоселективности составил 1.15 для энантиомеров α -пинена и 1.07 для лимонена.

Для выяснения физико-химических основ хирального распознавания были рассчитаны изостерические теплоты адсорбции. Показано, что большая энантиоселективность к α -пиненам была обусловлена различием изостерических теплот адсорбции.

Таким образом, полученный в гидротермальных условиях MOF $[(\text{H}_2\text{MPMD})_{5,5} (\text{H}_2\text{O})_x][(\text{Ge}_{10}\text{O}_{21}(\text{OH})_2)_2^*(\text{Ge}_7\text{O}_{14}\text{F}_3)]$, способен к хиральному распознаванию энантиомеров α -пинена и лимонена.

Литература

1. Xiaodong Zou T. C., Miia Klingstedt, Mike S. Dadachov, Michael O'Keeffe. A mesoporous germanium oxide with crystalline pore walls and its chiral derivative // Nature. – 2005. № 437. – С. 716-719.

© Самарина А.С., Шарафутдинова Ю.Ф., Гуськов В.Ю., 2025

ОПРЕДЕЛЕНИЕ Cs-137 В ПОВЕРХНОСТНЫХ И ПОДЗЕМНЫХ ВОДАХ

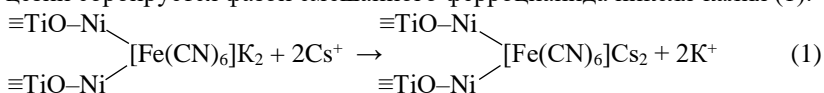
Сутина А.К., Воронина А.В.

*Уральский федеральный университет им.первого Президента России
Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*

Инциденты, связанные с деятельностью ГК Росатом, а также аварии на ПО «Маяк», Чернобыльской и Фукусимской АЭС, привели к загрязнению природных вод Cs-137. В связи с этим остро встает проблема мониторинга данного радионуклида в поверхностных и подземных водах.

Большинство природных вод имеют сравнительно низкую удельную активность, поэтому для их анализа необходимо концентрирование Cs-137. В качестве методов концентрирования используют метод упаривания, что является длительным и трудоемким процессом и сорбцию на селективных сорбентах. Наибольшая селективность к цезию характерна для неорганических сорбционных материалов, модифицированных гексацианоферратами переходных металлов. Требуемый предел обнаружения Cs-137 для разных типов вод составляет от 0,001 до 0,01 Бк/л. Обеспечение такого предела обнаружения требует разработки высокочувствительных, простых и экспрессных методов определения.

Предложен двухстадийный метод определения Cs-137 в поверхностных и подземных водах, состоящий из концентрирования радионуклида селективным сорбентом в динамических условиях и измерения полученного концентрата на гамма-спектрометре. В качестве сорбента использован ферроцианид никеля-калия на основе гидратированного диоксида титана (НКФ-ГДТ) [1]. В природных водах содержание цезия составляет 10^{-6} – 10^{-9} г/л, цезий сорбируется фазой смешанного ферроцианида никеля-калия (1):



Подобранные условия концентрирования (скорость пропускания воды, масса сорбента) позволяют достичь выхода цезия в концентрат $99,3 \pm 0,3\%$ и требуемый предел обнаружения. При различных концентрациях макрокомпонентов природных вод наблюдается воспроизводимость выхода цезия в концентрат, что свидетельствует о селективности сорбента.

Исследование выполнено при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (в рамках базовой части госзадания, проект № FEUZ-2023-0013).

Литература

1. Воронина А.В., Ноговицына Е.В., Семенищев В.С. Способ получения неорганического ферроцианидного сорбента (варианты). Патент на изобретение № 2746194.

© Сутина А.К., Воронина А.В., 2025

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКАЯ МУЛЬТИСЕНСОРНАЯ СИСТЕМА ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПРЕПАРАТОВ ТИМОЛОЛА ПО ПРОИЗВОДИТЕЛЮ

Сычева М.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Тимолола малеат, (S)-(-)-1-(трет-бутиламино)-3-[(4-морфолино-1,2,5-тиадиазол-3-ил)окси]-2-пропанола малеат, относится к классу тиадиазольных соединений и используется для лечения эссенциальной гипертензии, глазной гипертензии и хронической открытоугольной глаукомы, включая афакию. На фармацевтическом рынке в настоящее время можно встретить множество различных препаратов, содержащих тимолол, и их производство с каждым годом увеличивается. Возникает ряд проблем, связанных с качеством данной продукции [1].

Нами разработана мультисенсорная вольтамперометрическая система для идентификации препаратов тимолола разных производителей. В качестве сенсоров с перекрестной чувствительностью использовались стеклоглеродные электроды, модифицированные композитами ПЭК [2-5] с цеолитами AFI (диаметр сферы 8,3 Å), FAU (диаметр сферы 11,24 Å) и CHA (диаметр сферы 7,37 Å). Система обладает перекрестной чувствительностью к препаратам тимолола. По данным графиков счетов МГК-моделирования, вольтамперограммы, преобразованные в точки, образуют на плоскости главных компонент соответствующие кластеры, не пересекающиеся между собой, что позволяет идентифицировать препараты тимолола по производителю. Стоит отметить, что проводя МГК-моделирование, с использованием одно- или двухсенсорных систем, не удастся добиться разделения препаратов на плоскости главных компонент – кластеры различных препаратов совсем близки друг к другу или пересекаются. С помощью метода SIMCA были рассчитаны доли тестовых образцов препаратов, отнесенных к соответствующим образцам сравнения. Предложенная трехсенсорная система позволяет провести идентификацию препаратов тимолола по производителю с минимальными ошибками первого и второго рода.

Литература

1. Radcliffe N.M. The impact of timolol maleate on the ocular tolerability of fixed-combination glaucoma therapies. Clin. Ophthalmol. 2014;2541-2549.
2. Salikhov R.B., Zilberg R.A. [et al.]. Nanocomposite thin-film structures based on a polyelectrolyte complex of chitosan and chitosan succinamide with SWCNT. J. Mater. Sci. Lett. 2023;13:P. 132-137.
3. Zilberg R.A., Bulysheva E.O. [et al.]. Voltammetric electronic tongue for identification

УДК 543.552.054.1

КОМПОЗИТНЫЙ ВОЛЬТАМПЕРОМЕРИЧЕСКИЙ СЕНСОР НА ОСНОВЕ
ХИРАЛЬНОГО БОРОФОСФАТА МЕДИ $\text{LiCu}_2[\text{BP}_2\text{O}_8(\text{OH})_2]$
И НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ И РАСПОЗНАВАНИЯ
ЭНАНТИОМЕРОВ МЕТИОНИНА

Тарханова Ю.Р., Булышева Е.О., Зильберг Р.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Метионин – незаменимая аминокислота, играющая важную роль как в структуре белка, так и в метаболизме. Он участвует в различных клеточных функциях, включая реакции метилирования, поддержание окислительно-восстановительного баланса и синтез полиаминов. Поскольку метионин самостоятельно не синтезируется в организме, он должен поступать с продуктами питания или биологически активными добавками, при этом только L-форма проявляет биологическую активность. Способность распознавать энантиомеры метионина имеет большое значение в фармацевтической промышленности, где часто требуются энантиомерно чистые соединения из-за различной биологической активности каждого энантиомера. Поэтому разработка доступных, экспрессных методов распознавания и определения энантиомеров метионина [1-5], в том числе и с использованием энантиоселективных вольтамперометрических сенсоров [6-8] является актуальной задачей аналитической химии.

Разработан композитный вольтамперометрический сенсор на основе хирального борофосфата меди $\text{LiCu}_2[\text{BP}_2\text{O}_8(\text{OH})_2]$ и наночастиц золота Au для распознавания и определения энантиомеров метионина (Met). В качестве связующего вещества был выбран полиэлектролитный комплекс хитозана и N-сукцинилхитозана (ПЭК). По полученным данным дифференциальной импульсной вольтамперометрии (ДИВ) видно, что разница в аналитических сигналах на сенсорах без хирального селектора незначительна. Наибольшие различия между аналитическими сигналами Met энантиомеров наблюдались на сенсоре, модифицированном хиральным $\text{LiCu}_2[\text{BP}_2\text{O}_8(\text{OH})_2]$ и наночастицами Au ($ipD/ipL = 1.43$ и $\Delta E = 16$ мВ). Линейный характер зависимости тока пика окисления Met от его содержания в растворе сохраняется в диапазоне концентраций от 1.0×10^{-6} до 1.0×10^{-3} Моль \cdot л $^{-1}$ (для D-Met) и от 5.0×10^{-5} до 1.0×10^{-3} Моль \cdot л $^{-1}$ (для L-Met) с пределом обнаружения **0.291** мкМ и **0.417** мкМ и нижними границами определяемых концентраций 0.97 мкМ и 1.39 мкМ для D- и L-Met соответственно. Правильность определения энантиомеров Met в модельных растворах оценивали методом «введено–найдено». Для оценки

аналитических возможностей сенсоры были протестированы для определения энантиомеров Met в биологических жидкостях. Статистическая оценка результатов методом «введено–найдено» свидетельствует об отсутствии значимой систематической погрешности.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, грант № 23-73-00119

Литература

1. Shelkovnikov, V.V. Determination of Methionine in Medicines by Stripping Voltammetry / V.V. Shelkovnikov, A.M. Altyev, M.E. Vinogradov // Journal of Analytical Chemistry. – 2019. – Vol. 74, No. 12. – P. 1239-1244.
2. Аспекты улучшения метрологических характеристик сенсора на основе наночастиц палладия для определения метионина / Э.В. Горчаков, Д.О. Перевезенцева, Е.А. Вайтулевич, О.В. Дубинина // Известия Томского политехнического университета. Инжиниринг георесурсов. – 2025. – Т. 336, № 1. – С. 70-79.
3. Вольтамперометрический "электронный язык" для распознавания метионин содержащих препаратов / Р.А. Зильберг, Ю.А. Яркая, Д.И. Дубровский [и др.] // Бултеровские сообщения. – 2018. – Т. 56, № 11. – С. 32-37.
4. Вольтамперометрические сенсоры на основе композитов полиэлектролитного комплекса хитозана и α -, β -, γ -циклодекстринов для определения и распознавания энантиомеров метионина / Д.И. Дубровский, Л.Р. Кабирова, А.И. Хаблетдинова [и др.] // Вестник Башкирского университета. – 2018. – Т. 23, № 3. – С. 721-727.
5. Вольтамперометрическое определение метионина на модифицированном полиарилфталидом стеклоуглеродном электроде / Ю.Г. Файзуллина, Ю.А. Яркая, Р.А. Зильберг [и др.] // Доклады Башкирского университета. – 2017. – Т. 2, № 5. – С. 707-712.
6. Maistrenko, V.N. Enantioselective Voltammetric Sensors on the Basis of Chiral Materials 4. V.N. Maistrenko, R.A. Zil'berg // Journal of Analytical Chemistry. – 2020. – Vol. 75, No. 12. – P. 1514-1526.
7. Майстренко, В.Н. Энантиоселективные вольтамперометрические сенсоры / В.Н. Майстренко, Г.А. Евтюгин, Р.А. Зильберг. – Уфа: Башкирский государственный университет, 2018. – 189 с. – ISBN 978-5-7477-4754-8.
8. Rational design of highly enantioselective composite voltammetric sensors using a computationally predicted chiral modifier / R.A. Zilberg, I.V. Vakulin, Yu.B. Teres [et al.] // Chirality. – 2022. – Vol. 34, No. 11. – P. 1472-1488.

© Тарханова Ю.Р., Булышева Е.О., Зильберг Р.А., 2025

КОМПЛЕКСЫ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С ХИРАЛЬНЫМИ
ЛИГАНДАМИ КАК СЕЛЕКТОРЫ ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНЫХ
ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИХ СЕНСОРОВ

Терес Ю.Б., Булышева Е.О., Ишмакаева Г.И.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В современной аналитической химии и биомедицине энантиоселективные вольтамперометрические сенсоры (ЭВС) рассматриваются как перспективные инструменты, обеспечивающие экспресс-анализ и распознавание фармакологически активных компонентов в лекарственных средствах [1-2]. Энантиоселективность ЭВС достигается за счет модификации электрода хиральным селектором, который создает хиральное микроокружение, способствующее специфическому взаимодействию с энантиомерами. Несмотря на широкий спектр доступных хиральных селекторов, лишь немногие из них способны обеспечить оптимальное сочетание характеристик, необходимых для эффективной работы ЭВС: надежность распознавания энантиомеров, чувствительность, воспроизводимость, стабильность, доступность, и самое главное простоту изготовления ЭВС. В этом контексте особенно перспективны комплексы переходных металлов с органическими хиральными лигандами [3-5]. В таких комплексах структура хирального лиганда и координационное число металла-комплексобразователя определяют характеристики ЭВС. Важным преимуществом является возможность регулировать свойства комплексов при их синтезе, формируя лиганды с заданной структурой, геометрией и необходимым хиральным окружением. Это позволяет целенаправленно создавать высокоселективные, устойчивые и стабильные во времени ЭВС.

Представлены высокочувствительные, селективные и стабильные композитные сенсоры на основе пастовых электродов из графитированной термической сажи CarboblackC, модифицированной комплексными соединениями Co(III) и Ni(II) . В ходе исследования оптимизированы условия регистрации вольтамперограмм, а также состав хиральной фазы сенсора для достижения максимальной энантиоселективности. Сенсоры были успешно апробированы для определения энантиомеров ряда фармацевтических препаратов, включая триптофан, атенолол и напроксен. Посредством регистрации вольтамперограмм последовательно разбавленных растворов исследуемых аналитов были установлены следующие характеристики сенсоров: линейный диапазон определяемых концентраций, предел обнаружения и нижняя граница определяемых концентраций. Результаты исследования демонстрируют возможность применения разработанных сенсоров для количественного определения энантиомеров в сложных матрицах, таких как биологические жидкости,

таблетированные лекарственные формы, рацемические смеси и образцы с нестехиометрическим содержанием энантиомеров. Предложенные сенсоры могут быть использованы для контроля качества фармацевтических препаратов, что особенно важно для лекарственных средств, проявляющих разную биологическую активность для разных энантиомеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ, грант № 23-23-00340

Литература

1. Майстренко, В.Н. Энантиоселективные вольтамперометрические сенсоры / В.Н. Майстренко, Г.А. Евтюгин, Р.А. Зильберг. – Уфа: Башкирский государственный университет, 2018. – 189 с.
2. Майстренко, В.Н. Энантиоселективные сенсоры / В.Н. Майстренко, Г.А. Евтюгин. – Москва: Лаборатория знаний, 2023. – 262 с.
3. 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.
4. 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
5. Voltammetric sensor for naproxen enantiomers based on a paste electrode modified with a Chiral nickel complex / R.A. Zilberg, Y.B. Teres, I.V. Vakulin [et al.] // *Chirality*. – 2025. – Vol. 37, No. 2. – P. e70025.

© Терес Ю.Б., Булышева Е.О., Ишмакаева Г.И., 2025

УДК 614.7:66.028

К ВОПРОСУ ОБ ОЦЕНКЕ ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ БЕЗОПАСНОСТИ ПЫЛЕВОГО ФАКТОРА В ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ПОМЕЩЕНИЯХ ОАО «ФАРМСТАНДАРТ»

Тимербулатова И.М.¹, Вязьмина Т.В.¹, Диздар А.Э.¹, Дианов В.М.²

¹ ОАО «Фармстандарт-УфаВИТА», Уфа, Россия

² Башкирский Государственный Медицинский Университет, Уфа, Россия

Химико-фармацевтическое производство несет потенциальные опасности для его непосредственных участников, которые подвержены воздействию различных факторов, влияющих на самочувствие и в целом на здоровье сотрудников [1]. Основными источниками производственной пыли являются подготовительные и промежуточные операции производства, связанные с дроблением, измельчением, просеиванием, высушиванием фармацевтических субстанций. В процессе гранулирования, дражирования, сушки, фасовки и упаковки лекарств наблюдаются особенно высокие уровни загрязнения.

В производственных цехах готовых лекарственных форм «ОАО Фармстандарт» были проведены исследования с целью определения гигиенической безопасности пылевого фактора. Для измерения уровня производственной пыли был использован прибор ПА-20М-4 для отбора среднесменных проб воздуха рабочей зоны. В качестве фильтров использовали изделия типа АФА-ВП-10, АФА-ВП-20. Производственную пыль определяли спектрофотометрическим и весовым методом.

В производственном помещении по растариванию и загрузки сахара определяли взвешенные частицы сахарной пыли. Аспирацию воздуха выполняли со скоростью 2 л/мин в объеме 400 л в течение 20 мин. После просасывания воздуха через фильтр марки АФА-ВП-20 фильтр взвешивали и определяли массу навески пыли по разнице с массой чистого фильтра.

В цехе по приготовлению гранулята определяли взвешенные частицы никотиновой кислоты. Аспирацию воздуха производили со скоростью 10 л/мин в объеме 100 л в течение 10 мин. Элюирование никотиновой кислоты с фильтра осуществляли раствором соляной кислоты. Разведение производили 0,1 н раствором гидроксида натрия и измеряли оптическую плотность на спектрофотометре СФ-56 при длине волны 262 нм.

Концентрацию рутина на участке по подготовке сырья после аспирации воздуха в объеме 400 л со скоростью 20 л/мин в течение 20 мин определяли после элюирования пыли с фильтра раствором щелочи спектрофотометрически ($\lambda=279$ нм).

В цехе по приготовлению субстанции и таблетирования определяли взвешенные частицы Рибофлавин-5-фосфат моноватриевая соль дигидрата. Аспирацию воздуха проводили в течении 10 мин со скоростью 10 л/мин в объеме 100 л. Элюирование Рибофлавин-5-фосфат моноватриевая соль дигидрата с фильтра осуществляли раствором соляной кислоты. Разведение проводили раствором 0,1н гидроксида натрия и измеряли оптическую плотность на спектрофотометре СФ-46 при длине волны 262 нм.

Результаты измерений и допустимые нормы представлены в таблице 1.

Таблица 1

Наименование загрязнителя	Производственное помещение/участок подготовки сырья	Найденная концентрация, %	ПДК
Сахарная пудра	Цех/растаривание и загрузка сахара	$0,37 \pm 0,10$ мг/м ³	10 мг/м ³
Никотиновая кислота	Цех/приготовление гранулята	$0,37 \pm 0,10$ мг/м ³	1,0 мг/м ³
Рутин	Цех/подготовка крахмала	$1,01 \pm 0,15$ мг/м ³	0,1 мг/м ³
Рибофлавин-5-	Цех/таблетирование	$0,10 \pm 0,02$ мг/м ³	1,0 мг/м ³

фосфат мононатриевая соль дигидрат			
Рибофлавин-5- фосфат мононатриевая соль дигидрат	Цех/весовая ТЛФ, у весов	0,60±0,12 мг/м ³	1,0 мг/м ³
Рибофлавин-5- фосфат мононатриевая соль дигидрат	Цех/размол сырья ТЛФ, у микромельницы	0,77±0,12 мг/м ³	1,0 мг/м ³

На основании наших исследований установлено, что уровень производственной пыли по четырем позициям, на четырех производственных участках не превышает допустимых нормативных значений (таблица 1).

Литература

1. Факторы производственной деятельности, влияющие на условия труда фармацевтических работников / Д.М. Джангозина [и др.] // Международный журнал экспериментального образования. – 2009. – № 3. – С. 31-33.

© Тимербулатова И.М., Вязьмина Т.В., Диздар А.Э., Дианов В.М., 2025

УДК 541.14:547.551.2

ХИРАЛЬНЫЙ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР ДЛЯ РАСПОЗНАВАНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ АТЕНОЛОЛА

Траоре М., Зильберг Р.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Хиральная идентификация лекарственных препаратов [1-5] является ключевой задачей фармацевтического анализа из-за различий в биологической активности энантиомеров. Атенолол, широко применяемый β-адреноблокатор, является хиральным соединением, где (S)-энантиомер проявляет более выраженную фармакологическую активность по сравнению с (R)-энантиомером. Необходимость в быстром, недорогом и эффективном методе анализа энантиомеров привела к разработке электрохимического сенсора, модифицированного хиральным комплексом никеля(II), иммобилизованного на графитированной термической саже Carbolblack C.

Аналитические и электрохимические характеристики сенсора были оценены методами циклической вольтамперометрии, дифференциально-импульсной вольтамперометрии и электрохимической импедансной спектроскопии. Результаты показали различное окисление энантиомеров, со

смещением потенциала окисления ($\Delta E_p = 20$ мВ) и отношением пиковых токов ($iS/iR = 1,60$), что указывает на большую чувствительность к (S)-атенололу. Определены пределы обнаружения, составившие 2,76 мкМ для (S)-атенолола и 4,51 мкМ для (R)-атенолола, что свидетельствует о высокой чувствительности метода. Применимость сенсора была подтверждена анализом фармацевтических образцов, биологических жидкостей (кровь, моча) и модельных растворов, продемонстрировав отличную стабильность и воспроизводимость. Использование хемометрического анализа [6] с применением методов PCA и SIMCA-классификации позволило оптимизировать распознавание проб и обеспечить надежную идентификацию лекарственных препаратов по производителям. Высокая селективность и чувствительность разработанного энантиоселективного сенсора делают его полезным инструментом для контроля качества лекарственных препаратов и биомедицинских исследований. В дальнейших исследованиях планируется адаптация методики для других хиральных препаратов и разработка портативных устройств для экспресс-анализа в клинических и промышленных условиях.

Литература

1. Voltammetric sensor for naproxen enantiomers based on a paste electrode 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.
2. 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.
- Chiral voltammetric sensor on the basis of nanosized MFI zeolite for recognition and determination of tryptophan enantiomers / R. Zilberg, Yu. Teres, M. Agliulin [et al.] // *Electroanalysis*. – 2024. – Vol. 36, No. 5. – P. e202300375.
- 4.A Voltammetric Sensor Based on Aluminophosphate Zeolite and a Composite of Betulinic Acid with a Chitosan Polyelectrolyte Complex for the Identification and Determination of Naproxen Enantiomers / R.A. Zilberg, V.N. Maistrenko, Yu.B. Teres [et al.] // *Journal of Analytical Chemistry*. – 2023. – Vol. 78, No. 7. – P. 933-944.
5. Вольтамперометрическое определение энантиомеров тирозина в фармацевтических и биологических образцах / Р.А. Зильберг, Г.Р. Каримова, А.С. Терентьева [и др.] // *Вестник Башкирского университета*. – 2021. – Т. 26, № 1. – С. 84-92.
6. Voltammetric electronic tongue for identification of naproxen pharmaceuticals by manufacturer / R.A. Zilberg, E.O. Bulysheva, Y.B. Teres [et al.] // *Chimica Techno Acta*. – 2025. – Vol. 12, No. 2. – P. 12204.

© Траоре М., Зильберг Р.А., 2025

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АМИНОУКСУСНОЙ КИСЛОТЫ
НА ФОРМИРОВАНИЕ ВТОРИЧНЫХ БУФЕРНЫХ СИСТЕМ

Туйева О.Б., Кутлимуротова Н.Х.

*Национальный университет Узбекистана им. М. Улужбека,
химический факультет, Ташкент, Узбекистан*

Буферные растворы играют ключевую роль в химии, биологии и фармацевтике. Они необходимы для поддержания стабильного значения pH раствора. Разработка новых стандартных буферных систем с повышенной чувствительностью остаётся актуальной задачей. Кроме того, буферы широко применяются при калибровке pH-метров и кондуктометров. В научной литературе подробно описаны различные буферные растворы, используемые в химическом анализе и биомедицинских исследованиях. Классическим примером универсального буфера является буфер Бриттона–Робинсона, охватывающий широкий диапазон значений pH. Также были разработаны металлические буферы, применяемые для обнаружения ионов в низких концентрациях и калибровки ионоселективных электродов [1]. В литературе проанализированы плотность и вязкость буферного раствора с $\text{pH}=7.40$, содержащего водные растворы тринатриевой соли лимонной кислоты ($\text{Na}_3\text{ЦК}$), глицина и L-аланина в температурном диапазоне 298,15–318,15 K [2].

Одна из актуальных задач на сегодняшний день – создание буферных растворов, способных стабильно поддерживать значение pH в течение длительного времени. В рамках нашего исследования был приготовлен буферный раствор, содержащий глицин ($\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$), ортофосфорную кислоту (H_3PO_4), борную кислоту (H_3BO_3) и гидроксид натрия (NaOH). Были изучены его свойства, зависящие от времени и температуры.

Для приготовления раствора использовали следующие компоненты: 0,0826 г борной кислоты (H_3BO_3), 0,3 г глицина ($\text{NH}_2\text{CH}_2\text{COOH}$), которые помещали в мерную колбу объёмом 100 мл. Ортофосфорную кислоту брали в количестве 1 мл из 98% раствора H_3PO_4 и доводили объём до 250 мл. Из полученных растворов готовили 0,04 Н растворы. Далее, при помощи пипетки Мора отбирали по 33,3 мл каждого раствора, помещали в колбу объёмом 100 мл, формируя раствор, содержащий три компонента. Смешивая полученный раствор с 0,1000 Н раствором NaOH в различных соотношениях, были получены образцы с различными значениями pH: 2,48; 5,57; 8,04; 11,05; 12,35; 12,53.

Для каждого образца измеряли значения pH через 24, 48, 72 и 120 часов. Полученные результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1

Зависимость изменения рН буферного раствора от времени

Содержимое буфера обмена	Время, ч	рН	Т, °С
рН =2.48 (Смесь, состоящая из глицина, соли борной кислоты, фосфатной кислоты 14 ml + NaOH 0.1000 N 1 ml)	24	2,48	19,8
	48	2,49	20,6
	72	2,49	19,8
рН= 12.36 (Смесь, состоящая из глицина, соли борной кислоты, фосфатной кислоты 5 ml + NaOH 0.1000N 10 ml)	24	12,36	19,8
	48	12,31	20,7
	72	12,24	21,6
	120	12,19	22,5

В заключение следует отметить, что, как видно из приведённой выше таблицы, подготовленные буферные растворы полностью соответствуют требованиям, предъявляемым к вторичным буферным системам. Различия в значениях рН между образцами составляют не более $\pm 0,05$, что подтверждает их стабильность. Полученные результаты свидетельствуют о высокой надёжности буферов — значения рН практически не изменялись с течением времени.

Литература

1. Hulanicki A., Maj-Żurawska M., Głab S. Buffer solutions. Encyclopedia of Analytical Science. -2019.-Vol. 4. P.455-460.
2. Патяр П., Каур Г. Молекулярные взаимодействия буферных растворов глицина и L-аланин + цитрат при различных температурах: объемный, вискозиметрический и ИК-Фурье подходы. – 2022.

© Туйева О.Б., Кутлимуrowта Н.Х., 2025

УДК=543.544.

КИНЕТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ АДСОРБЦИИ ЭНАНТИОМЕРОВ
МЕНТОЛОВ НА СЕМИВОДНОМ СУЛЬФАТЕ МАГНИЯ $MgSO_4 \cdot 7H_2O$

Туркменова А.А., Бикметова М.Р., Аллаярова Д.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Хиральность играет ключевую роль в эволюции биологических систем. Однако вопрос о том, почему все живые организмы состоят из строго определённых энантиомеров (L-аминокислот и D-сахаров), остаётся одной

из главных загадок в исследованиях происхождения жизни. Многочисленные исследования были посвящены процессам, приводящим к энантиомерному обогащению – ключевому этапу эволюции пребиотического органического мира, изначально находившегося в рацемическом состоянии. Однако остаётся нерешённой главная загадка: каким образом хиральный дисбаланс на уровне простых молекул привёл к формированию высокоорганизованных структур – вплоть до первых живых клеток. Кроме того, непонятно, какие факторы обеспечили полную дерацемизацию органических соединений в условиях ранней Земли.

В частности, мало изучено стереоселективное взаимодействие между органическими молекулами и минералами, полностью покрывающими архейскую Землю и имеющими хиральную пространственную группу симметрии кристаллической решетки.

В настоящей работе исследован хиральный природный минерал – эпсомит, $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$, в качестве адсорбента для распознавания энантиомеров ментолов и некоторых аминокислот.

Коммерческий семиводный сульфат магния перекристаллизовывали при понижении температуры с 40 до 20 °С с интенсивным перемешиванием и с последующей фильтрацией полученных кристаллов. Для нанесения на силикагель «Силикагель АСКГ (ГОСТ 3956-76)» эпсомита готовили насыщенный раствор модификатора в воде с концентрацией 0,6 г/мл при 40 °С и добавляли силикагель в соотношении 1:2,5 чистого осадка. После охлаждения модифицированный силикагель сушили при температурах, не превышающих 45 °С, и доводили до постоянной массы в вакуумном эксикаторе.

Для определения принципиальной энантиоселективности проводили эксперимент по статической адсорбции энантиомеров ментолов из раствора с гептаном, модифицированным эпсомитом силикагели. Концентрации растворов ментолов варьировались в широком диапазоне: от 0,1 до 100 мг/мл.

В 30 мл Растворов L- и D- ментолов добавляли 0,5 г адсорбента. После одного часа интенсивного перемешивания отбирали пробы объемом 5 мл. Хроматографический эксперимент проводили на газовом хроматографе «Хроматэк-Кристалл». Объем вводимой пробы составлял 1 мкл. Количественные характеристики определяли по площадям хроматографических пиков.

Была установлена принципиальная энантиоселективность эпсомита по отношению к энантиомерам ментолов. Так при концентрациях 50 и 100 мг/мл L-ментол адсорбируется в 10 раз сильнее, чем D-ментол, а при концентрациях 0,1-0,3 мг/мл D-ментол не адсорбируется вообще, но и адсорбция L-ментолов погранично низкая. Наилучший диапазон

концентраций, при которых разница адсорбции статистически доказана, составляет 1-100 мг/мл.

Таким образом, природный хиральный минерал эпсомит показывает возможность создания энантиомерного избытка при адсорбции на его поверхности энантиомеров органических соединений.

Литература

1. Avnir D. Chiral Minerals // Minerals. 2024. Т. 14. №10. Pp. 995

© Туркменова А.А., Бикметова М.Р., Аллаярова Д.А., 2025

УДК 543.552

РАЗРАБОТКА СЕНСОРА НА ОСНОВЕ ГРАФИТИРОВАННОЙ САЖИ CARBORACK X И МОЛЕКУЛЯРНО-ИМПРИНТИРОВАННОГО ПИРРОЛА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ КЛОПИДОГРЕЛА

Ульмаскулова Л.Р., Абдуллин Я.Р., Назыров М.И.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Электрохимические сенсоры на основе молекулярно-импринтированных полимеров (МИП) являются инновационными и развивающимися инструментами для определения лекарственных препаратов. К преимуществам использования МИПов относят высокую селективность, возможность многократного использования и модификации, быстроту и простоту анализа.

В данной работе был создан сенсор на основе стеклоуглеродного электрода (СУЭ), модифицированного электрохимически синтезированным молекулярно импринтированным полипирролом (ППу) на подложке из графитированной сажи Carborack X (СрХ) для определения энантиомеров клопидогрела (Клп). Применение СрХ повысило чувствительность сенсора, улучшив физическую и химическую устойчивость по сравнению с сенсором, модифицированным исключительно ППу. Использование такого материала подложки диктуется такими его свойствами, как большая удельная площадь поверхности и высокая проводимость, а также физико-химическая устойчивость.

Синтез ППу проводился с помощью циклической вольтамперометрии в диапазоне потенциалов от 0 до 1 В со скоростью развертки 100 мВ/с в течение трех циклов в растворе, содержащем 100 мМ LiClO₄, 1.5 мМ пиррола и 0.5 мМ S-Клп. Полученную таким образом плёнку полипиррола исследовали с помощью методов циклической вольтамперометрии,

спектроскопии электрохимического импеданса и сканирующей электронной микроскопии. Были изучены аналитические характеристики сенсора, диапазон определяемых концентраций составил от 0.001 Мм до 0.5 Мм, а I_{ps}/I_{pr} составило 1.32. Также удалось провести анализ энантиомеров Клп в смеси, что имеет важное практическое значение. Во всех случаях RSD составило не более 8%, что подтверждает работоспособность разработанного сенсора.

Литература

1. Yarkaeva Yu.A., Dymova D.A., Nazzyrov M.I., Zagitova L.R. [et al.] Voltammetric sensor based on molecular imprinted polymer for lincomycin detection. – *Chim. Tecno Acta*, 2023. – V.10., No. 202310210.
2. Yarkaeva Yu. A., Nazzyrov M.I., Abdullin Ya. R. [et al.] Enantioselective voltammetric sensor based on mesoporous graphitized carbon black Carbopack X and fulvene derivative. – *Chirality*, 2023. – Vol. 1, P. 11.

© Ульмаскулова Л.Р., Абдуллин Я.Р., Назыров М.И., 2025

УДК 541.14:547.551.2

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ НИКОТИНА В ЖИДКОСТЯХ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СИГАРЕТ МЕТОДОМ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Фазлыева А.М., Гайнуллина Ю.Ю.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

На сегодняшний день электронные сигареты (или вейпы) стали популярной альтернативой традиционным табачным изделиям. Однако, несмотря на свою репутацию “менее вредной” альтернативы, вейпинг все же может представлять серьезную угрозу для здоровья, особенно если использовать некачественные или контрафактные жидкости. Ожидаемое снижение риска заболеваний, таких как рак легких или сердечно-сосудистые болезни, не всегда оправдывается, поскольку жидкости для электронных сигарет могут содержать множество скрытых опасностей, которые обычно не указываются на упаковке. Это делает необходимым тщательный контроль и изучение состава жидкостей, которые используются в электронных сигаретах.

В рамках настоящего исследования в качестве образца была использована коммерческая жидкость SKALA (salt) в соотношении компонентов PG/VG – 50/50, заявленное количество никотина - 20 мг. Научные исследования проводились на базе имеющегося в лаборатории Уфимского университета науки и технологий газового хроматографа.

Для построения калибровочного графика (рис. 1) никотина использовали растворы с различными концентрациями, проводя не менее 5 параллельных измерений для каждого значения.

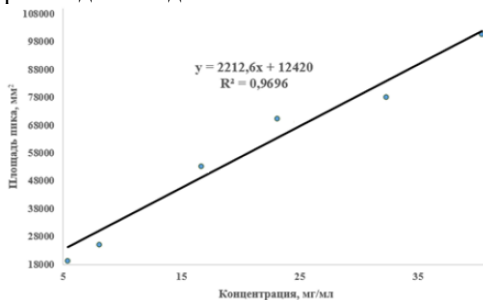


Рис. 1. Калибровочный график

Мы провели не менее пяти параллельных введений жидкости Scala с концентрацией никотина 20 мг/мл в хроматографический порт, чтобы обеспечить репрезентативность и точность получаемых данных. Результаты анализа показали, что при каждом из повторных введений был зафиксирован пик, соответствующий никотину, на времени удерживания 2,05 мин. Площадь этого пика варьировалась от введения к введению, что является нормальным для хроматографических анализов, где возможны небольшие колебания из-за изменений условий эксперимента.

Полученные площади пика для никотина были следующими:

Таблица 1

Время удерживания, мин	Площадь, мм ²
2,051	37194,25
2,041	39215,48
2,047	40812,17
2,054	38432,10
2,050	37945,93

Где среднее значение площади пиков – 38971,2 мм²

С помощью уравнения регрессии, найдём концентрацию никотина в исследуемой жидкости:

$$y = 2212,6x + 12420, \text{ где } y = 38971,2$$

$$\text{Отсюда, } x = 12 \text{ мг/мл}$$

Концентрация никотина, полученная по результатам анализа, составила 12 мг/мл, в то время как на упаковке указано 20 мг/мл.

Такие расхождения между заявленными и фактическими значениями никотина подтверждают наличие проблем в системе контроля качества продукции и регулирования рынка жидкостей для электронных сигарет. Существующие стандарты, а также механизм их соблюдения, явно

недостаточно эффективны, что приводит к значительным отклонениям в содержании активных веществ, которые могут иметь негативные последствия для здоровья.

Литература

1. Озерская И.В., Малахов А.Б., Седова А.Ю., Денисова В.Д., Барина В.А., Гребенева И.В. Вейп-ассоциированное поражение легких у подростка // Терапевтический архив. – 2024. – №1.
2. Пережогина Т.А., Дурунча Н.А., Остапченко И.М. Определение никотина в коммерческих образцах жидкостей для электронных сигарет // Новые технологии. – 2017. – № 1. – С. 55-63.
3. Garcia M., Lopez R. Determination of Nicotine and Additives in Vaping Liquids by GC-MS // Analytical Methods. – 2022. – Vol. 14, No. 2. – P. 190-196.
4. Richardson, P.C., Burke, A., Gotts, N., & Goodacre, R. Quantifying PG : VG ratio and nicotine content in commercially available e-liquids using handheld Raman spectroscopy // Royal Society of Chemistry. – 2023.

© Фазлыева А.М., Гайнуллина Ю.Ю., 2025

УДК 541.14:547.551.2

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОСТАВА В ЖИДКОСТЯХ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СИГАРЕТ МЕТОДОМ МАСС-СПРЕКТРОМЕТРИИ

Фазлыева А.М., Гайнуллина Ю.Ю

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В ходе проведенного исследования, направленного на анализ состава коммерческих образцов жидкостей для электронных сигарет, мы использовали высокоэффективный аналитический метод: масс-спектрометрию. Этот метод является одним из самых точных и надежных в области химического анализа, что позволило нам не только детально исследовать состав жидкостей, но и сделать выводы о потенциальных рисках, связанных с их использованием. Важно отметить, что наш подход был ориентирован на определение всех химических веществ, которые могут присутствовать в составе жидкости, что в конечном итоге позволяет более объективно оценить безопасность этой продукции.

В ходе исследования нами был выявлен ряд других химических веществ, которые присутствуют в составе жидкостей для электронных сигарет и не всегда указываются на упаковке.

Пропиленгликоль и глицерин являются основными компонентами жидкости для вейпов, которые обеспечивают образование пара. Эти вещества, сами по себе, не считаются крайне токсичными, однако их влияние на организм человека при длительном и регулярном вдыхании может быть негативным. Особое внимание стоит уделить компоненту, который был обнаружен в одном из исследованных образцов — ментолу (рис.1). Ментол используется для придания жидкостям охлаждающего

эффекта и улучшения вкуса, но этот компонент может быть источником аллергических реакций у чувствительных людей. Вдыхание ментола может вызвать раздражение слизистых оболочек дыхательных путей, что может привести к кашлю, боли в горле и даже к затрудненному дыханию.

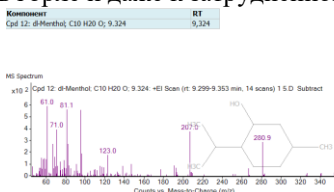


Рис. 1. Ментол

Еще нашлось соединение с молекулярной формулой $C_7H_{15}NO$ (рис. 2) – это органическое вещество, которое может быть представлено рядом различных химических соединений. Одним из возможных вариантов является N-метиламиноэтанол (или метиламиноэтанол), представляющее собой аминокпроизводное, содержащее аминогруппу ($-NH$) и гидроксильную группу ($-OH$), расположенные на этиленовой цепи. Этот компонент широко используется в промышленности, где требуется растворение или химическая активность. Вдыхание паров или аэрозолей, содержащих аминные соединения, может привести к ряду негативных эффектов на дыхательную систему. Аминогруппы могут раздражать слизистые оболочки дыхательных путей, что проявляется в виде кашля, затрудненного дыхания, боли в горле и других симптомов, характерных для воспаления или аллергических реакций. Дополнительным фактором риска является токсичность некоторых аминов. Хотя метиламиноэтанол в чистом виде не является сильно токсичным, его реакция с другими компонентами жидкости, а также возможность попадания в организм через вдыхание в виде аэрозоля, может усугубить ситуацию.

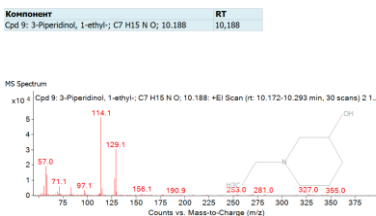


Рис. 2. Метиламиноэтанол

Так же были найдены различные вкусовые добавки и ароматизаторы, которые изначально указывались на упаковке, а именно – виноград и яблоко.

Таким образом, важно отметить, что наибольшие опасности для здоровья пользователей могут представлять не только низкое или высокое содержание никотина, но и другие компоненты жидкостей, которые, как

правило, остаются незамеченными при повседневном использованиивейпов. В ходе исследования нами был выявлен ряд других химических веществ, которые присутствуют в составе жидкостей для электронных сигарет и не всегда указываются на упаковке.

Литература

1. Озерская И.В., Малахов А.Б., Седова А.Ю., Денисова В.Д., Барина В.А., Гребенева И.В. Вейп-ассоциированное поражение легких у подростка // Терапевтический архив. – 2024. – №1.
2. Пережогина Т.А., Дурунча Н.А., Остапченко И.М. Определение никотина в коммерческих образцах жидкостей для электронных сигарет // Новые технологии. – 2017. – № 1. – С. 55-63.
3. Garcia M., Lopez R. Determination of Nicotine and Additives in Vaping Liquids by GC-MS // Analytical Methods. – 2022. – Vol. 14, No. 2. – P. 190-196.

© Фазлыева А.М., Гайнуллина Ю.Ю., 2025

УДК 543.544

ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ МАЗУТНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ МОРСКОЙ ВОДЫ С ПРИМЕНЕНИЕМ ХМС АНАЛИЗА МАРКЕРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ

Фаррахова А.А., Аллаярова Д.А., Ерастов А.С.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Загрязнение морской воды нефтепродуктами представляет собой одну из наиболее серьезных экологических проблем современности, обусловленную интенсивной добычей, транспортировкой и переработкой нефти, а также аварийными разливами. Актуальность мониторинга и выявления источников загрязнения нефтепродуктами в морской среде обусловлена необходимостью оперативного реагирования на инциденты и разработки эффективных стратегий предотвращения дальнейшего распространения загрязнения. Выявление источников имеет первостепенное значение для привлечения виновных к ответственности, разработки превентивных мер и снижения рисков будущих загрязнений.

Целью данной научно-исследовательской работы является определение содержания мазутного загрязнения морской воды и выявление отношения их концентраций (откликов). Мазут был собран при очередном выбросе с моря на песчаный берег из г. Анапа в феврале 2025 года. Для реализации поставленной задачи были решены следующие задачи: моделирование условий загрязнения морской воды нефтепродуктами, отбор проб, концентрирование примесей, хроматографирование концентрата на капиллярной колонке для селективного определения содержания маркерных соединений.

В качестве маркерных соединений были проанализированы: гетероциклические соединения (серо-, азот- и кислородсодержащие) так как сернистые соединения, такие как бензотиофены и дибензотиофены, устойчивы к биodeградации и могут использоваться для отслеживания нефтепродуктов в течение длительного времени; ароматические углеводороды (флуорен).

Для моделирования морской воды использовали: 10 л дистиллированной воды и 10 л воды из реки Уфа с добавлением морской соли в концентрации 18 г/л, смыв бактерий (10 мл) и смесь мазута с песком 1,5 г. Была проведена экстракция на 1, 3, 7, 14, 21 сутки. Пробу воды объемом 1,0 дм³ подкисляли 10% соляной кислотой до значения pH=2, добавляли 50 г хлорида натрия и 10 см хлористого метилена и встряхивали в течение 2 мин. Экстракт осушали сульфатом натрия, концентрировали в термостате до объема 50 мм³. Концентрат пробы исследовали хроматографически.

Количественное определение компонентов пробы в воде проводилось методом ГХ-МС с предварительным экстракционным концентрированием ограниченно-летучих органических примесей. Идентификацию компонентов концентрата примесей проводили с использованием газового хроматографа HP 6890N и масс-селективного детектора 5973 inert фирмы «Agilent» на капиллярной колонке HP-5MS (30 м × 0,25 мм × 0,25 мкм) при программировании температуры термостата колонок от 35°C со скоростью 20°C/мин до 60°C и со скоростью 6°C/мин до 280°C (10 мин), (Тисточник a=230°C, Ти сп=250°C), при методе ионизации - электронный удар (70 эВ) [1]. Расчет концентрации (площадь пика) реперных соединений вели по реконструированным хроматограммам селективных ионов (для дибензотиофена m/z=198, для флуорена m/z=165).

В результате было исследовано два модельных раствора имитирующих морскую воду, проведена экстракция, концентрирование и хроматографирование проб на 1,3,7,14,21-е сутки в режиме SIM и SCAN. Были обнаружены большие площади хроматографических пиков маркерных соединений не изменяющихся со временем экспозиции, что говорит об устойчивой биodeградации данных соединений и использовании их для отслеживания мазута в морской воде. В предлагаемой методике определения загрязнений водных источников нефтепродуктами показана необходимость обнаружения двух реперных органических соединений в концентрациях превышающих 1,47г/л для дибензотиофена и 0,006–0,2 мкг/дм³ для флуорена. В случае отсутствия одного из маркерных соединений можно сделать вывод о другом источнике загрязнения воды.

Литература

1. Кантор Лев Исаакович Способ определения времени контакта дизельных топлив с водой. Патент №RU 2 395 803 C1 2009 – 7 с.

© Фаррахова А.А., Аллаярова Д.А., Ерастов А.С., 2025

СОРБЦИЯ ТИРОЗИНА ВЫСОКООСНОВНЫМ МАКРОПОРИСТЫМ АНИОНООБМЕННИКОМ АМР-28

Харина Т.В., Елисеева Т.В.

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

Макропористые анионообменники играют важную роль в процессах извлечения биологически активных веществ, таких как тирозин, из водных сред. Данная аминокислота участвует в синтезе нейротрансмиттеров, таких как дофамин и норэпинефрин, что делает ее значимой для функционирования нервной системы и психического здоровья [1]. Кроме того, тирозин изучается на предмет потенциального использования в спортивной медицине для улучшения физической работоспособности и восстановления после нагрузок. Актуальность исследования процессов сорбции тирозина объясняется растущим интересом к его использованию в фармацевтике и нутрициологии, где высокое качество и эффективность извлечения этой аминокислоты имеют большое значение.

Взаимодействие высокоосновных анионообменников с тирозином основано, прежде всего, на перезарядке биполярных ионов аминокислоты в анионы в щелочной среде фазы сорбента. Кроме того, возможно необменное поглощение за счет образования водородных связей, стэкинг-эффекта и действия слабых физических взаимодействий. Это позволяет извлекать тирозин из водных растворов.

Для сравнения эффективности сорбции тирозина были исследованы высокоосновные анионообменники разных производителей А500Р, АМР-28 и АВ-17-2П (макропористые), АВ-17-8 (гелевый), а также неионогенный сорбент со стирол-дивинилбензольной матрицей FPX66 с целью оценки вклада стэкинг-эффекта.

Макропористый анионообменник АМР-28 показал наибольшую эффективность поглощения тирозина из насыщенного раствора ($1,35 \pm 0,02$ ммоль/г. ас.), что в 1,5-4,3 раза превышает емкость других исследованных высокоосновных анионообменников. При этом, доля тирозина, сорбированного за счет взаимодействий ароматических фрагментов аминокислоты и матрицы, составляет не более 13%. Макропористая структура обеспечивает высокую площадь поверхности, доступность активных центров и эффективность десорбции. Это делает АМР-28 перспективным материалом для извлечения тирозина из жидких сред в биотехнологических процессах.

Литература

1. Якубке Х.-Д. Аминокислоты, пептиды, белки / Х.-Д. Якубке, Х. Ешкайт; Пер. с нем. Н.П. Запеваловой, Е.Е. Максимова; под ред. Ю.В. Митина. – М.: Мир, 1985. – 455 с.

© Харина Т.В., Елисеева Т.В., 2025

ИМПЕДАНСНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ РАСТВОРОВ АСФАЛЬТЕНОВ В
ТОЛУОЛЕ

Ямова П.А., Бикмеева А.Х., Дубровский Д.И., Бикмеев Д.М.

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа,
Россия*

Проблема образования и выпадения асфальтено-смоло-парафиновых отложений (АСПО) остаётся актуальной задачей нефтяной отрасли. АСПО ухудшают фильтрационные характеристики коллектора, снижают дебит скважин и вызывают осложнения при транспортировке нефти [1]. В связи с этим разработка методов диагностики и мониторинга фазового поведения асфальтенов представляет важную задачи отрасли. Одним из перспективных методов исследования таких систем является импедансная спектроскопия, позволяющая описывать релаксационные свойства диэлектриков с проводящими фазами [2].

В данной работе исследованы растворы асфальтенов в толуоле с концентрациями от 0 до 10 % масс. Асфальтены были выделены из нефти по методу SARA: к нефти добавляли 40-кратный избыток гексана, осадок фильтровали через фильтр «Синяя лента», затем экстрагировали хлороформом на аппарате Сокслета и упаривали растворитель перегонкой.

Импедансные спектры регистрировались в диапазоне частот от 100 Гц до 50 кГц. Для каждой концентрации была построена эквивалентная схема вида $R_0 + (R_1 \parallel CPE_1)$, отражающая диэлектрический отклик системы.

Расчёт параметров модели позволил количественно охарактеризовать процессы структурной поляризации, а также влияние агрегации асфальтенов на электрофизические свойства раствора [3].

Полученные значения (R_0 , R_1 , Q_1 , n_1) могут быть использованы в качестве параметров при построении моделей для оценки содержания асфальтенов в нефтях и прогнозирования условий их агрегации и выпадения [4, 5].

Литература

1. Бикмеев Д.М., Бикмеева А.Х., Бадикова А.Д. Физико-химические свойства асфальтенов. – У.: Азтерна, 2024. – 110 с.
2. Goual L. Impedance Spectroscopy of Petroleum Fluids at Low Frequency // *Energy & Fuels*. – 2009. – V. 23. – P. 2090-2094.
3. Evdokimov I., Losev A. Electrical Conductivity and Dielectric Properties of Solid Asphaltenes // *Energy & Fuels*. – 2010. – V. 24. – P. 3959-3969.
4. Joonaki E. Insights into Asphaltene Stability, Aggregation, Deposition and Molecular Structure // *Heriot-Watt University*. – 2019. – 226 p.
5. Mansoori G.A. Modeling of Asphaltene and Other Heavy Organic Deposits // *Journal of Petroleum Science and Engineering*. – 1997. – V. 17. – P. 101-111

СЕКЦИЯ
«ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ
НАФТЕНОВЫХ КИСЛОТ МЕЖДУ ВОДНЫМИ РАСТВОРАМИ
ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА И УГЛЕВОДОРОДАМИ

Аврамович Д.Д., Андреев А.П., Зарифянова М.З.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия*

Нефтяные кислоты, входящие в состав среднестиллятных фракций, представлены в основном алифатическими, алициклическими (нафтеновыми), ароматическими кислотами. Подавляющее большинство нефтяных кислот являются нафтеновыми, которые по данным масс-спектропии и хроматографии состоят из пяти- и шестичленных нафтеновых колец, карбоксильная группа удалена от ядра несколькими метиленовыми группами.

Существует два метода извлечения нафтеновых кислот (НК) из средних нефтяных фракций: нейтрализацией раствором гидроксида натрия (метод омыления) и экстракцией полярными растворителями. Наибольшей избирательностью обладают протонодонорные экстрагенты, способные образовывать водородные связи с молекулами нафтеновых кислот, наиболее технологичным из которых является изопропиловый спирт (ИПС). Экстракционные свойства и четкость разделения нафтеновых кислот и углеводов повышается с добавлением воды к ИПС, также сокращается содержание неомыляемых углеводов в составе получаемых кислот из-за меньшей их растворимости в водной фазе.

Изучение влияния воды на термодинамические характеристики распределения нафтеновых кислот между водными растворами ИПС и углеводородами нефтяной фракции проводили на модельной системе, состоящей из н-декана и нафтеновой кислоты, выделенной из дизельной фракции азербайджанской нефти методом омыления. Образец нафтеновой кислоты имеет следующие показатели [1]: $\rho_4^{20} = 0,9857$; кислотное число – 360 мг КОН/г; молекулярная масса – 156; общая формула $C_8H_{15}COOH$.

Были приготовлены модельные растворы с содержанием НК в н-декане 0,06-0,52 моль/л с кислотными числами $KЧ = 16,8-41,13$ мг КОН/г. Содержание НК в углеводородной фазе (C_y , моль/л) описывается уравнением:

$$C_y = -0,26 + 0,019 KЧ$$

Исследовались водные растворы ИПС с содержанием воды 15-40 % об. Для определения коэффициентов распределения НК (K_0) между водными растворами ИПС и н-деканом в термостатированных воронках при температурах 298-328 К осуществляли одноступенчатые экстракции. Затем в равновесной углеводородной фазе (C_y) определяли $KЧ$ и содержание НК.

В фазе водного раствора ИПС (C_p) содержание НК определяли по разнице между содержанием его в исходном модельном растворе и углеводородной фазе. Коэффициенты распределения НК рассчитывали по формуле:

$$K_0 = \frac{C_p}{C_y}$$

Численные значения термодинамических характеристик распределения НК приведены в табл. 1.

С повышением обводненности значения коэффициентов распределения НК снижаются из-за большей гидратации молекул ИПС, которая препятствует их контакту с молекулами НК.

Таблица 1 – Термодинамические характеристики распределения нафтенных кислот между водными растворами изопропилового спирта и н-деканом, $T = 298 \text{ K}$

Содержание воды в ИПС, % об.	K_0	$-\Delta H_p$, кДж/моль	$-\Delta S_p$, кДж/моль	ΔG_p , кДж/моль
15	2,04	9,20	24,96	-1,76
20	1,59	4,32	10,62	-1,15
30	1,26	2,60	6,80	-0,58
40	0,60	2,50	12,72	1,29

Взаимодействие молекул НК с надмолекулярной структурой водного раствора ИПС сопровождается выделением тепла, с увеличением содержания воды в ИПС энтальпия распределения (ΔH_p) уменьшается.

До содержания воды 30 % об. свободная энергия распределения (ΔG_p) имеет отрицательные значения, что указывает на термодинамическую вероятность экстрагирования НК водными растворами ИПС. Минимальное значение ΔG_p имеет при объемном содержании воды, равном 15 %, что является наиболее оптимальным составом смешанного растворителя.

В результате исследований было установлено, что с понижением температуры увеличивается коэффициент распределения НК, термодинамическая возможность реализации процесса возрастает.

Литература

1. Зарифьянова М.З., Бочков М.А., Аврамович Д.Д., Андреев А.П., Мадзу Гантсу Е.Р., Харлампиди Х.Э. Образование нефтяных кислот в процессе окисления сернистых соединений дизельной фракции ашальчинской битуминозной нефти /Вестник технологического университета. – 2023 – Т. 26 – № 9 – С. 59-65.

© Аврамович Д.Д., Андреев А.П., Зарифьянова М.З., 2025

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ РЕГИОИЗОМЕРНЫХ БИС-АДДУКТОВ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ C₆₀ ПРОИЗВОДНЫМИ N-МАЛЕОПИМАРОВОЙ КИСЛОТЫ

Алексеева О.Л., Саттарова А.Ф.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Одним из перспективных аспектов реализации молекул C₆₀, является внедрение соответствующих соединений в фотоактивные слои фотогальванических установок [1]. Эффективность преобразования света в таких устройствах зависит от напряжения холостого хода. В органических солнечных элементах его максимальное значение определяется разницей между энергиями НОМО (материала-донора) и LUMO (материала-акцептора) [2]. Синтезированные ранее по методике Бингеля [3] диметил 2,2'-[1, 1'-(диметанофуллерен-3, 3'-ил)бис(4-метил-1-оксо-1,2-пентандиил)]бис[6, 9а-диметил-12-(1-метилэтил)-1,3-диоксогексадекагидро-3b,11-этенонафто[2,1-е]изоиндол-6-карбоксилат] имеют девять возможных положений для последовательной модификаций, представленные на рисунке 1.

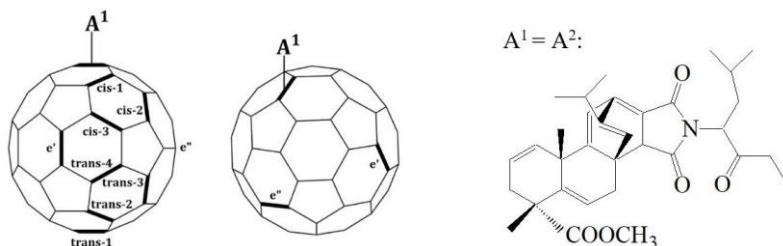


Рис. 1. Возможные позиции для присоединения функционализирующего субстрата А

Для оценки влияния положения присоединенных модификантов на C₆₀, в настоящей работе DFT-методами (B3LYP/6-31G(d)) были рассчитаны основные электрохимические параметры, энергии НОМО и LUMO, а также величина запрещенной зоны, представленные в таблице 1.

Таблица 1

Электрохимические параметры региоизомерных бис-аддуктов
функционализации C₆₀

Региоизомер	E _{НОМО} , эВ	E _{LUMO} , эВ	E _{gap} , эВ
e''	-5.50	-2.93	2.58
trans-3	-5.46	-2.90	2.56
e'	-5.52	-2.93	2.58

<i>trans</i> -2	-5.52	-2.96	2.56
<i>trans</i> -4	-5.44	-2.91	2.53
<i>cis</i> -3	-5.41	-2.92	2.49
<i>trans</i> -1	-5.46	-2.97	2.49
<i>cis</i> -1	-5.51	-2.94	2.58
<i>cis</i> -2	-5.51	-2.90	2.61

Расчётные данные энергетических уровней указывают на то, что региоизомеры обладают близкими значениями электрохимических параметров, однако наиболее подходящим кандидатами для создания высокоэффективных органических фотоэлементов будут являться *cis*-3 и *trans*-1 региоизомеры, поскольку они обладают наименьшей энергией запрещенной зоны. Данные вещества обладают потенциалом для разработки перспективных материалов, способных существенно повысить КПД солнечных панелей.

Литература

1. Zhang Y. et al. The electronic structures and optical properties of fullerene derivatives for organic solar cells: The number and size effects of fullerene-cage //Materials Chemistry and Physics. – 2018. – Т. 204. – С. 95-104.
2. Brabec C.J. et al. Origin of the open circuit voltage of plastic solar cells //Advanced functional materials. – 2001. – Т. 11. – №. 5. – С. 374-380.
3. Hirsch, A. The chemistry of the fullerenes / A. Hirsch. – Weinheim: Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, 2002. – 423 p.

© Алексеева О.Л., Саттарова А.Ф., 2025

УДК 544.6

ВЛИЯНИЕ АНОДНОЙ МОДИФИКАЦИИ СПЛАВОВ NiZn НА КИНЕТИКУ РЕАКЦИИ ВЫДЕЛЕНИЯ ВОДОРОДА

Амелина Н.С., Бирюков А.И.

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

В настоящее время актуальной задачей является разработка технологий получения высокочистого водорода. Водородная энергетика переживает период активного развития, который вызван глобальной декарбонизацией и поиском альтернативных источников энергии взамен невозобновляемым источникам [1]. Распространённым и перспективным способом получения высокочистого водорода является щелочной электролиз воды, основанный на реакции выделения водорода (РВВ). Для эффективного протекания РВВ требуются катализаторы, сочетающие высокую активность, стабильность и низкую стоимость. Эффективными электродами для РВВ являются материалы на основе металлов платиновой группы, однако их высокая стоимость и малая доступность ограничивают широкое применение. Альтернативой дорогостоящим платиновым катализаторам являются

электродные материалы на основе никеля и его сплавов, так как они демонстрируют высокую электрохимическую активность в щелочной среде [2].

Модификация поверхности и получение пористых никелевых электродов может увеличить производительность щелочных электролизеров за счет увеличения катодного тока выделения водорода, снижения перенапряжения, увеличения числа активных центров на поверхности электрода и увеличения удельной площади. Перспективным способом получения никелевых электродов с развитой удельной поверхностью является электрохимическое селективное растворение цинка за счет анодной модификации сплавов NiZn [3]. Электрохимическое выщелачивание цинка из сплавов NiZn позволяет регулировать морфологию и состав путем изменения параметров обработки (потенциала, pH, состав электролита для выщелачивания). Такой подход соответствует глобальным тенденциям развития водородной энергетики и может стать перспективной заменой традиционным способам производства электродных материалов.

В данной работе изучается влияние условий анодной модификации на свойства сплавов NiZn, полученных методом диффузионного цинкования гальванического никеля.

В качестве подложек для нанесения покрытий использовали сталь марки 20Х. Обезжиренные подложки активировали раствором 10 масс. % серной кислоты. Гальванические никелевые покрытия наносили из сульфатного электролита при 50°C в течение 20 минут. Диффузионные цинковые покрытия наносили на гальванический никель в течение 1 часа при 450°C.

Анодную модификацию сплава NiZn проводили в свежеприготовленном растворе NaOH с концентрацией 1 моль/л при выбранном потенциале, используя трехэлектродную ячейку с платиновым вспомогательным электродом и хлорсеребряным электродом сравнения. Потенциал растворения был выбран в соответствии с анодной поляризационной кривой, полученной при 20°C в растворе NaOH со скоростью развертки потенциала 10 мВ/с, и составил 1,5 В. Продолжительность растворения, в соответствии с хроноамперограммой, составила 50 минут.

Для изучения ПВВ получили катодные поляризационные кривые. В качестве рабочего электрода применяли полученный материал, электродом сравнения выступал хлорсеребряный электрод, а в качестве вспомогательного электрода – платиновый. Электролит – раствор NaOH с концентрацией 1 моль/л, скорость развертки 10 мВ/с. Установлено, что анодная модификация приводит к увеличению плотности тока обмена в 2 раза и снижению перенапряжения в ~2,3 раза по сравнению с гладким никелевым электродом.

Для определения электрохимически активной площади поверхности получали циклические вольтамперные кривые, полученные при разных

скоростях развертки потенциала (от 5 до 100 мВ/с). Строили циклические вольтамперные кривые и вычисляли по ним разницу тока между анодной и катодной ветвью вблизи потенциала разомкнутой цепи. По полученным данным строили зависимость разности силы тока между катодной и анодной ветвью от скорости развертки потенциала. По полученным зависимостям определяли тангенс угла наклона и судили о величине электрохимически активной площади. Установлено, что электрохимическое селективное растворение приводит к увеличению активной площади в 900 раз, по сравнению с гладким никелевым электродом, что, по-видимому, и является причиной увеличения катодного тока реакции восстановления водорода и снижения перенапряжения.

Литература

1. Seggari, S., Bahaj, T., Alsayer, I. From toxic to pure: Harnessing renewable energy for non-conventional water remediation and green hydrogen production // *International Journal of Hydrogen Energy*. – 2025. – V.127, № 13. – P. 511-520.
2. Lin, Z., Song, G., Yu, Y. NiMo@IrO₂ bifunctional electrocatalyst for efficient electrochemical hydrogen evolution and chlorine evolution reactions // *Journal of Electroanalytical Chemistry*. – 2025. – V. 978. – P. 118872.
3. Lichušina, S., Laurynas Staišiūnas, L., Jasulaitienė V. Capacitive properties, structure, and composition of porous Co hydroxide/oxide layers formed by dealloying of Zn–Co alloy // *Journal of Applied Electrochemistry*. – 2019. – V. 49. – P. 503-515.

© Амелина Н.С., Бирюков А.И., 2025

УДК: 542.61:546,72:542

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭКСТРАКЦИИ ЦИНКА ИЗ РАСТВОРОВ СОЛЯНОЙ КИСЛОТЫ СМЕСЬЮ ДИАМИДОВ НЕОДЕКАНОВОЙ КИСЛОТЫ

Афзалетдинова Н.Г.¹, Цыкалова М.М.², Гайнуллина Ю.Ю.³

¹Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

²ОАО Фармстандарт – Уфимский витаминный завод, Уфа, Россия

³Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Изучена экстракция цинка(II) из 1,0 моль/л раствора соляной кислоты смесевым диамидом в толуоле, состоящего из пентаэтиленгексамина H₂N(C₂H₄NH)₅ линейного и разветвленного строения (L¹) и изомерных аминоэтиленпиперазинов (L²).

Найдены оптимальные условия извлечения: время контакта фаз и концентрация соляной кислоты. Предположено, что цинк(II) при времени контакта фаз 5 мин экстрагируются по анионообменному механизму при концентрации соляной кислоты 1,0 моль/л с вероятным, образованием смеси экстрагируемых соединений состава (H₂L¹)²⁺ [ZnCl₃]₂²⁻ и (HL²) [ZnCl₃]⁻. Сольватное число определенное методом разбавления при времени контакта

фаз 5 мин было равно 1,5 в расчете на одну молекулу лиганда, участвующего в реакциях ионного обмена. Кондуктометрические измерения молярной электропроводности экстрактов цинка(II) с диамидом, выделенные при экстракции из раствора с концентрацией соляной кислоты 1,0 моль/л и времени контакта фаз 5 мин показали, что они являются электролитами ($\lambda_1 = 70,0 - 80,0 \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^2 \text{ моль}^{-1}$).

Было изучено влияние концентрации хлорид-ионов на извлечение цинка(II) из растворов с концентрацией соляной кислоты от 1,0 до 4,0 моль/л. Показано, что увеличение концентрации соляной кислоты от 0,5 до 2,0 моль/л приводит к уменьшению экстракции цинка(II) смесевым диамидом, а дальнейший рост C_{HCl} приводит к возрастанию $D_{\text{Zn(II)}}$, что связано с нахождением в растворах кислоты ионов цинка(II) в разных формах, которые могут по-разному извлекаться экстрагентом.

При увеличении времени контакта фаз до 30 минут, цинк(II) из раствора с концентрацией HCl 1,0 моль/л извлекается в форме нейтрального комплекса предположенного нами состава $[(\text{ZnCl}_2)_2 \cdot \text{L}^1\text{L}^2_2]$. Измерения молярной электропроводности экстрактов цинка(II) со смесевым диамидом в ацетоне, показали, что они не являются электролитами ($\lambda = 5,0 - 10,0 \text{ Ом}^{-1} \text{ см}^2 \text{ моль}^{-1}$). Извлечение цинка(II) смесью смесового диамида и дигексилсульфоксида при $t_{\text{конт.}} = 5$ мин. $C_{\text{Zn(II) исх}} = 0,03$ моль/л, показало на эффективность использования смесового экстрагента и ДГСО для извлечения ионов цинка из раствора с концентрацией соляной кислоты $C_{\text{HCl}} = 4,0$ моль/л.

© Афзалетдинова Н.Г., Цыкалова М.М., Гайнуллина Ю.Ю., 2025

УДК 544.02, 577.322.9, 577.322.5, 577.322.7, 519.876.5

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ И ОРИЕНТАЦИИ СИСТЕМЫ «АЛКОГОЛЬДЕГИДРОГЕНАЗА + НАД» ПРИ СОРБЦИИ НА ПОВЕРХНОСТЯХ ЭЛЕКТРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ПРИМЕРЕ ГРАФИТА.

Байгунов И.А.¹, Холмуродов Х.Т.^{1, 2, 3, 4}, Гладышев П.П.¹

¹Государственный университет «Дубна», Дубна, Россия

²ЛНФ им. И.М. Франка, ОИЯИ, Дубна, Россия

³МГУ им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия

⁴ФТУ им. С.У. Умарова, Душанбе, Таджикистан

Фермент алкогольдегидрогеназа (АДГ) дрожжей является Фермент алкогольдегидрогеназа (АДГ) дрожжей является важным объектом исследования в биохимической, фармацевтической, электрохимической и агрохимической промышленности [1]. Изучение структурных и

конформационных свойств белков и ферментов, в том числе и АДГ традиционно проводится с использованием экспериментальных методов [2]. Однако, следует отметить, что это довольно сложный процесс, требующий очень больших временных и финансовых затрат. Поэтому в последние годы для этих целей применяют вычислительные и имитационные методы анализа [3], которые являются незаменимыми помощниками при изучении структурных превращений белков и ферментов, при создании лекарственных препаратов и т.д.

В данной работе использовалось компьютерное молекулярно-динамическое (МД) моделирование для исследования структурно-конформационных изменений фермента АДГ с его кофактором НАД, происходящих в водном растворе, взаимодействующем с поверхностью электродного материала. В качестве поверхности выступает графит. Моделирование МД на молекулярной системе АДГ+НАД + вода + графит было выполнено в три этапа: минимизация энергии, процедуры релаксации NVT и NPT.

В ходе МД-моделирования получены результаты, такие как ориентация фермента относительно поверхности графита, а также поведение кофермента НАД и титруемых аминокислот при посадке АДГ на поверхность. Кроме того, в ходе расчетов также была показана конформационная динамика АДГ («конформационное дыхание» молекулы) при посадке на поверхность.

Литература

1. Presečki A.V., Vasić-Rački Đ. Modelling of the alcohol dehydrogenase production in baker's yeast // *Process biochemistry*. – 2005. – Т. 40. – №. 8. – С. 2781-2791.
2. Höhn S. et al. Effects of medium pH and preconditioning treatment on protein adsorption on 45S5 bioactive glass surfaces // *Advanced Materials Interfaces*. – 2020. – Т. 7. – №. 15. – С. 2000420.
3. Lee T. S. et al. GPU-accelerated molecular dynamics and free energy methods in Amber18: performance enhancements and new features // *Journal of chemical information and modeling*. – 2018. – Т. 58. – №. 10. – С. 2043-2050.

© Байгунов И.А., Холмуродов Х.Т., Гладышев П.П., 2025

РЕАКЦИЯ МЕРКАПТОУКСУСНОЙ КИСЛОТЫ С ЭПОКСИДОМ ФУЛЛЕРЕНА C₆₀ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАЗВУКА

Байкова Р.А.¹, Кинзябаева З.С.¹, Боровик Е.В.², Алехина И.Е.²¹Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

1,4-Оксатиан-2-оны представляют собой важный класс гетероциклических соединений, имеющие широкий спектр биологической активности [1].

Установлено, что в сонохимической реакции эпоксида фуллерена C₆₀O с меркаптоуксусной кислотой в присутствии NaOH образуется циклоаддукт **3** (Схема 1). Максимальный выход продукта (по данным ВЭЖХ 96%) достигается при проведении реакции в атмосфере аргона в *о*-дихлорбензоле с использованием мольного соотношения **1**: 2: NaOH=1:1000:500 при комнатной температуре в течение 1 ч ультразвукового облучения (22 кГц, 20 Вт).

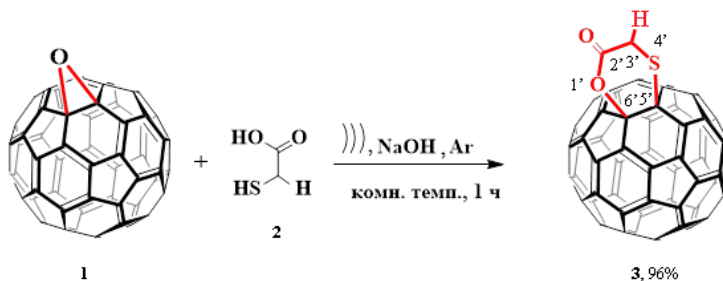


Схема 1. Реакция циклоприсоединения меркаптоуксусной кислоты к эпоксиду фуллерена C₆₀ под действием ультразвука

Использование других оснований (LiOH, NaNH, Ca(OH)₂) незначительно снижает выход циклоаддукта **3**, органические основания (пиридин, триэтиламин) не эффективны. Структура полученного аддукта подтверждена данными 1D и 2D ЯМР ¹H и ¹³C, УФ- и масс-спектрометрией высокого разрешения. 1'

Литература

1. Singh A.K., Rai A., Yadav L.D.S. LiBr catalyzed solvent-free ring expansion of epoxides to 1,4-oxathian-2-ones with α-mercaptocarboxylic acids – Tetrahedron Lett. 2011. – Vol. 52. – P. 3614.

© Кинзябаева З.С., Байкова Р.А., Боровик Е.В., Алехина И.Е., 2025

СВОЙСТВА СОРБЕНТОВ ИЗ КОРЫ СОСНЫ, АКТИВИРОВАННОЙ
МЕХАНОХИМИЧЕСКИМИ СПОСОБАМИ

Белаш М.Ю., Веприкова Е.В.

*Институт химии и химической технологии СО РАН,
ФИЦ «Красноярский научный центр СО РАН», Красноярск, Россия*

В данной работе исследовано влияние условий предварительной активации коры сосны – 1) в планетарной мельнице АГО-2; 2) водяным паром в условиях взрывного автогидролиза (ВАГ) – на сорбционную активность полученных сорбентов в отношении метиленового синего (МС) и желатина. Показано, что взрывной автогидролиз является более эффективным способом активации коры сосны и при определенных условиях приводит к увеличению сорбции МС и желатина не менее чем в 1.8 и 3.8 раза соответственно по сравнению с сорбентом из неактивированной коры. Активирующая обработка коры сосны в планетарной мельнице позволяет увеличить сорбцию МС и желатина не более чем в 1.3 и 1.2 раза соответственно. Получена математическая модель, описывающая влияние условий взрывного автогидролиза (давления водяного пара и продолжительности обработки коры сосны) на сорбционные свойства получаемых сорбентов. Определены оптимальные условия, обеспечивающие максимальную сорбцию МС получаемым сорбентом: температура 155 °С; давление водяного пара 2.62 МПа; продолжительность обработки 58.6 с. Экспериментальным способом подтверждены сорбционные свойства сорбента, прогнозируемые математической моделью. Сорбенты из коры сосны, активированной взрывным автогидролизом, по способности сорбировать МС и желатин превосходят промышленный энтеросорбент “Полифепан” из гидролизного лигнина, что свидетельствует о перспективности их применения в качестве энтеросорбентов в медицине и ветеринарии.

Результаты проведенных исследований позволяют считать кору сосны альтернативным сырьем, способным заменить гидролизный лигнин при получении эффективных энтеросорбентов.

Активацию коры сосны осуществляли двумя способами: 1) обработкой в планетарной мельнице АГО-2; 2) методом ВАГ. Взрывной автогидролиз проводили на установке периодического действия с объемом реактора 0.8 л, описанной в работе [1].

Для оценки влияния продолжительности обработки коры сосны и поиска оптимальных условий взрывного автогидролиза был запланирован и проведен полный факторный эксперимент типа 3^2 [2]. На основании экспериментальных данных по активации коры сосны методом ВАГ выбрано фиксированное значение температуры – 155 °С. В качестве

переменных независимых факторов приняты: X_1 – давление водяного пара в процессе ВАГ, МПа; X_2 – продолжительность обработки, с. Выходной параметр (Y) – сорбция МС, мг/г. Выбор сорбции МС при математическом моделировании обусловлен тем, что это вещество традиционно используется для количественной характеристики функциональной активности сорбентов разной природы, применяемых в различных сорбционных технологиях. Дисперсионный анализ показал, что зависимость сорбции МС сорбентами из коры сосны (Y) от переменных факторов процесса ее предварительной активации (X_1 и X_2) аппроксимируется уравнением регрессии второго порядка [2]:

$$Y = 170.6334 X_1 + 3.8208 X_2 - 32.5467 X_1^2 - 0.0325 X_2^2 - 146.2889 \quad (I)$$

Значение коэффициента детерминации $R^2=94.7\%$ свидетельствует об удовлетворительных прогностических свойствах полученного уравнения регрессии. Поверхность отклика выходного параметра Y при варьировании переменных факторов X_1 и X_2 представлена на рис. 1.

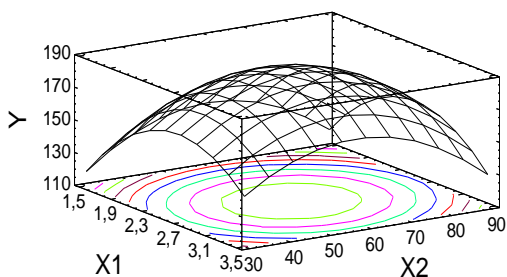


Рис. 1. Поверхность отклика выходного параметра Y .

Таким образом, для полученной регрессионной модели определены оптимальные условия взрывного автогидролиза коры сосны, позволяющие получать сорбент с максимальной сорбцией МС: температура – 155 °С; давление водяного пара – 2.62 МПа; продолжительность обработки – 58.6 с. Прогнозируемая величина сорбции МС составит 189.7 мг/г. Значение сорбции желатина для сорбента из автогидролизованной при указанных условиях коры сосны составило – 241.3 мг/г.

Литература

1. Веприкова Е.В., Терещенко, Е.А., Щипко М.Л., Кузнецов Б.Н. Сорбенты для ликвидации нефтяных загрязнений, полученные автогидролизом древесных отходов // Экология и промышленность России. 2011. № 6. С. 16-20.
2. Пен Р.З. Планирование эксперимента в Statgrachics Centurion. Красноярск: СибГТУ, 2014. – 293 с.

© Белаш М.Ю., Веприкова Е.В., 2025

КОНДУКТОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИЕВЫХ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ 1,2,4-ТРИКАРБОНИЛЬНЫХ ЛИГАНДОВ

Кунавина Е.А., Макаров А.Г., Толкачев А.Е., Трофимова К.А.,
Брежнев А.М.

Оренбургский государственный университет, Оренбург, Россия

Металлокомплексы с поликарбонильными лигандами обладают широким спектром функциональных возможностей, что обуславливает приоритетность исследования данных объектов. Так, в литературе имеются сведения о проявлении *металлохелатными* комплексами различных видов биологической активности [1-3]. В то же время, важное прикладное значение имеют исследования физико-химических свойств синтезируемых соединений. Например, растворимость в воде является определяющим фактором при оценке возможности применения того или иного вещества в качестве компонента лекарственного препарата.

Конденсацией Клайзена эквимольных количеств алкил-, гетерил- или арилметилкетонов и дибутилоксалата в неполярной среде в присутствии натрия в качестве конденсирующего агента нами синтезированы оксоенолаты натрия с *n*-пропильным (1а), 2'-фурильным (1б) и 2'-нафтильным (1в) заместителями соответственно. Реакцией металлообмена натриевых оксоенолатов (1а-в) с сульфатом магния получены бидентатные мооядерные *металлохелаты* (2а-в) (схема 1). Строение полученных соединений подтверждено методами ИК, ЯМР ^1H , ЯМР ^{13}C спектроскопии и масс-спектрометрии.

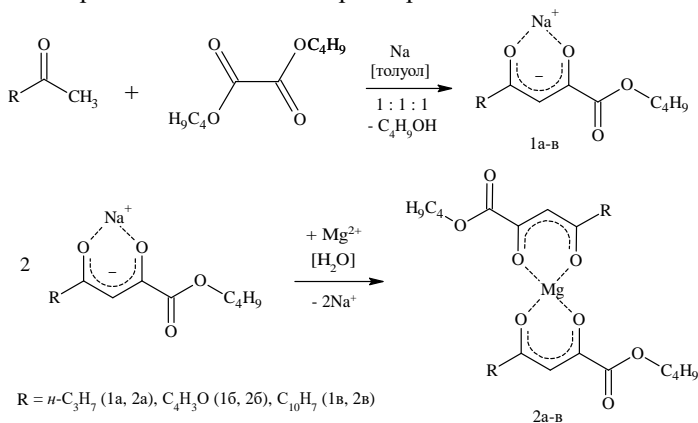


Схема 1

Для синтезированных *металлохелатов* на основе данных кондуктометрического метода определены растворимость *С* и произведение

растворимости K_s . Измерения электропроводности проведены в водной среде при 20 °С. Полученные в ходе исследования результаты представлены в таблице 1.

Таблица 1

Растворимость C и произведение растворимости K_s магниевых хелатных комплексов (2а-в) в воде при 20 °С

Соединение	C , моль/л	C , г/100 г H_2O	K_s
2а	$4,89 \cdot 10^{-5}$	0,0022	$4,67 \cdot 10^{-13}$
2б	$7,11 \cdot 10^{-5}$	0,0035	$1,44 \cdot 10^{-12}$
2в	$3,55 \cdot 10^{-6}$	0,0002	$1,79 \cdot 10^{-15}$

Анализируя полученные результаты, можно сделать вывод, что синтезированные магниевые комплексы практически не растворимы в воде и, вероятно, в водном растворе диссоциируют с образованием катиона магния и двух анионов органического лиганда (схема 2).

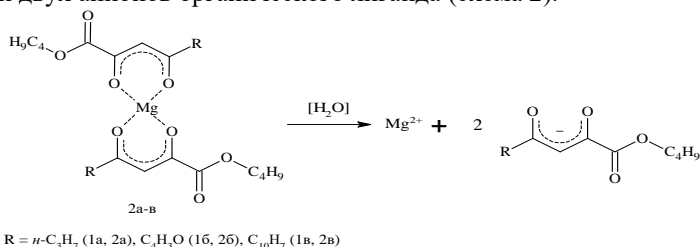


Схема 2

Литература

1. Козьминых В.О., Кириллова Е.А., Щербаков Ю.В., Муковоз П.П., Виноградов А.Н. и др. Металлопроизводные р-π-электроноизбыточных поликарбонильных систем с сочленёнными α- и β-диоксофрагментами. Сообщение 1. Обзор литературы / В.О. Козьминых, Е.А. Кириллова, Ю.В. Щербаков, П.П. Муковоз, А.Н. Виноградов и др. // Вестник Оренбургского гос. ун-та. – 2008. – № 9 (91). – С. 185-198.
2. Пулина Н.А., Собин Ф.В., Краснова А.И. Поиск отечественных фармацевтических субстанций в ряду металлокомплексов на основе (тет)ариламинов 4-арил-2-гидрокси-4-оксо-2-бутеновых кислот / Н.А. Пулина, Ф.В. Собин, А.И. Краснова // Координационная химия. – 2023. – Т. 49, № 10. – С. 644-650.
3. Kawai H., Kitano Y., Mutoh M., Hata G. Synthesis, structure and antitumor activity of a new water-soluble platinum complex, (1R,2R-cyclohexanediamine-N,N') [2-hydroxy-4-оксо-2-пентеноато(2-)-O²] platinum(II) / H. Kawai, Y. Kitano, M. Mutoh, G. Hata // Chemical and Pharmaceutical Bulletin. – 1993. – Vol. 4, № 2. – P. 357-361.

© Кунавина Е.А., Макаров А.Г., Толкачев А.Е.,
Трофимова К.А., Брежнев А.М., 2025

ФОРМИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ
WO₃-CoWO₄ ПОКРЫТИЙ НА ТИТАНЕБудникова Ю.Б.^{1,2}, Васильева М.С.^{1,2}¹Институт химии ДВО РАН, Владивосток, Россия²Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия

Пленочные композиты на основе WO₃-CoWO₄ гетероструктур представляют собой перспективные материалы, вызывающие значительный научный интерес благодаря их потенциальному применению в качестве фотокатализаторов для очистки водных сред от устойчивых органических загрязнителей, а также в процессах фотоэлектрохимического расщепления воды [1]. Одним из эффективных методов синтеза таких покрытий является метод плазменно-электролитического оксидирования (ПЭО). Поскольку состав электролита играет ключевую роль в формировании ПЭО-покрытий определенной функциональности, мы изучили влияние аниона соли Co (II) на характеристики и свойства ПЭО-покрытий, формируемых в вольфраматном электролите с добавлением Co(II)-ЭДТА.

В настоящей работе пленочные композиты Ti/TiO₂-WO₃-CoWO₄ были получены одностадийным методом ПЭО в гальваностатическом режиме при $i = 0.1$ в течение 10 мин. В качестве электролитов использовали водные растворы, содержащие 0.15M Na₂WO₄, 0.05 М ЭДТА, 0.05 М Co(CH₃COO)₂ (Ti/W/Co(As) образец) или 0.05 М CoSO₄ (Ti/W/Co(S) образец).

Методом энергодисперсионного анализа установлено, что Ti/W/Co(As) образец содержит, ат. %: 20.1 C; 54.1 O, 5.0 Ti, 16.8 W; 4.0 Co, в составе Ti/W/Co(S) обнаружено, ат. %: 10.9 C; 67.2 O, 0.4 Ti, 15.0 W; 6.3 Co; 0.1 S и 0.5 Ti. То есть в случае вольфраматно-сульфатного электролита формируются покрытия с более низким содержанием C, Ti и W, но с более высоким содержанием O и Co. Рассчитанные методом Тауца значения оптической ширины запрещенной зоны E_g, равные 2.53 и 2.22 эВ для Ti/W/Co(As) и Ti/W/Co(S) образцов, соответственно, свидетельствует о том, что оба образца способны поглощать свет в видимой области спектра. Степени деградации метилового оранжевого (10 мг/л, pH 6,8, 10 ммоль/л H₂O₂) при облучении УФ и видимым светом достигают 15 и 80 % для Ti/W/Co(As) композита и 12 и 58% для Ti/W/Co(S) композита. Таким образом показано, что природа аниона соли Co (II) в электролите для ПЭО влияет на состав, оптические и фотокаталитические свойства покрытий.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института химии ДВО РАН № FWFN (0205)-2025-0001.

Литература

1. Sajid, M.M., Alomayri, T., Zhai H. Facile synthesis of novel CoWO₄/FeWO₄

УДК 544.653

ОПТИЧЕСКИЕ И ФОТОЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ЦИНКСОДЕРЖАЩИХ ОКСИДНЫХ ПОКРЫТИЙ НА ТИТАНЕ,
СФОРМИРОВАННЫХ МЕТОДОМ ПЛАЗМЕННО-
ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ОКСИДИРОВАНИЯ

Бухари М.А.¹, Попов Д.П.¹, Васильева М.С.^{1, 2}

¹Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия

²Институт химии ДВО РАН, Владивосток, Россия

Пленочные полупроводниковые материалы широко исследуются в качестве электродов в фотоэлектрохимических ячейках для различных применений, таких как очистка воды, производство энергии и накопление энергии [1]. Одними из наиболее перспективных фотоактивных материалов являются смешанные оксидные системы ZnO-TiO_2 благодаря своей химической стабильности, высокой fotocувствительности, низкой стоимости и нетоксичности [2]. Особое внимание заслуживают металлоксидные пленки или покрытия, закрепленные на специальных монокристаллических подложках. Плазменно-электролитическое оксидирование (ПЭО) является одним из современных и перспективных методов формирования на металлах оксидных слоев сложного состава [3].

В настоящей работе приведены результаты исследования состава, морфологии поверхности, оптических и фотоэлектрохимических свойств ПЭО-слоев на титане, сформированных в электролите, содержащем 0.025 М Na_3PO_4 и комплексы Zn(II)-ЭДТА (0.05 М ZnO + 0.05 М ЭДТА-Na_2). Оксидные покрытия формировали при плотности тока 0,05 или 0.1 А/см² в течение 5 или 10 мин. В зависимости от этих параметров сформированные ПЭО-слои получили обозначения PZn/0.05/5, PZn/0.05/10, PZn/0.1/5 и PZn/0.05/10.

Согласно результатам рентгенофазового анализа (РФА) все сформированные ПЭО-покрытия включают в состав TiO_2 в модификациях анатаз и рутил. По данным энергодисперсионного анализа (ЭДА) все образцы содержат элементы компонентов электролитов, в том числе цинк и фосфор. Содержание цинка в ПЭО-слоях зависит от условий формирования и составляет 2,9, 3,7, 7,3 и 2,0 ат. % для образцов PZn/0.05/5, PZn/0.05/10, PZn/0.1/5 и PZn/0.05/10 соответственно. Анализ результатов РФА и ЭДА позволяет сделать вывод о том, что сформированные ПЭО-слои содержат соединения оксида цинка в аморфной форме.

На рис. 1а приведены спектры поглощения полученных ПЭО-слоев. Видно, что все образцы интенсивно поглощают УФ свет. Это согласуется со

значениями ширины запрещенной E_g , определенными методом Тауца (рис. 1б). Из рис. 1 г, д видно, что все образцы генерируют устойчивые фототоки под действием УФ света. Интенсивность фототоков на разных образцах различна. Без наложения потенциала наибольшие фототоки генерирует PZn/0.05/5 образец, тогда как при наложении потенциала 1В - PZn/0.05/10 образец. В обоих случаях образцы содержат наименьшее количество цинка.

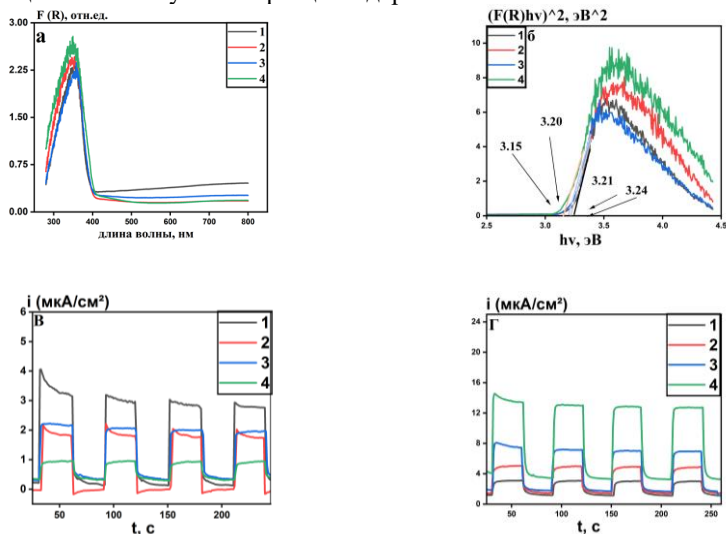


Рис. 1. Спектры поглощения (а), графики Тауца (б) и профили фототоков при 0 В (г) и 1 В (д) для образцов: 1 – PZn/0.05/5, 2 – PZn/0.05/10, 3 – PZn/0.1/5 и 4 – PZn/0.05/10.

На основании полученных результатов можно сделать заключение, что цинксодержащие ПЭО-слои на титане перспективны для использования в качестве фотоанодов. Управлять фотоэлектрохимическими свойствами таких материалов можно как варьированием параметров ПЭО, так и воздействием внешнего напряжения.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института химии ДВО РАН FWFN (0205)-2025-0001.

Литература

1. Chen X., Mao S.S. Titanium dioxide nanomaterials: synthesis, properties, modifications, and applications // Chem. Rev. 2007. Vol. 107. P. 2891-2959.
2. Hussein A.M., Mahoney L., Peng R. et al. Mesoporous coupled ZnO/TiO₂ photocatalyst nanocomposites for hydrogen generation // J. Renew. Sustain. Energy. 2013. Vol. 5. № 033118.

3. Гордиенко П.С., Руднев В.С. Электрохимическое формирование покрытий на алюминии и его сплавах при потенциалах искрения и пробоя. – Владивосток: Дальнаука, 1999 – 233 с.

© Бухари М.А., Попов Д.П., Васильева М.С., 2025

УДК 541.14:547.551.2

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИНДАТА-АЛЮМИНАТА БАРИЯ, ДОПИРОВАННОГО ЦИНКОМ

Бушуева А.В., Корона Д.В., Анимица И.Е.

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

Фазы состава $Ba_7In_6Al_{2-x}Zn_xO_{19-0.5x}$ ($0 \leq x \leq 0.10$), полученные в данной работе, являются перспективными протонными проводниками и могут быть использованы как электролиты твердооксидных топливных элементов.

Структуру $Ba_7In_6Al_2O_{19}$ можно рассматривать как результат когерентного срастания двух кислород-дефицитных блоков Ba_2InAlO_5 и одного катион-дефицитного блока $Ba_3In_4O_9$, которые, в свою очередь, являются производными от структуры перовскита.

Рентгенофазовый анализ образцов показал, что полученные фазы не содержат в составе примесей и описываются гексагональной симметрией (пр. гр. $R\bar{6}3/mmc$). Установлено, что при повышении концентрации допанта увеличиваются параметры элементарных ячеек образцов. Кроме этого, введение цинка как допанта позволило улучшить спексаемость образцов и получить керамику с относительной плотностью 95%, при этом удалось понизить температуру синтеза относительно матричного соединения.

Термогравиметрический анализ образцов показал, что фаза с наибольшей концентрацией допанта инкорпорирует до 1.45 моль H_2O , что в 3.5 раза больше, чем недопированная фаза.

После термической обработки при 600 °С в токе CO_2 было установлено, что фазы, допированные цинком, не деградируют в данных условиях.

С помощью метода электрохимического импеданса была изучена электропроводность исследуемых фаз в зависимости от температуры и парциального давления кислорода в атмосферах различной влажности. Общая проводимость и в сухой, и во влажной атмосферах увеличивалась от $x=0$ до $x=0.10$. В сухой атмосфере при $T > 500$ °С кислород-ионная проводимость допированных фаз была выше, чем для матричной фазы. Во влажной атмосфере ионная проводимость, в том числе протонная, матричного соединения несколько превышала проводимость допированных фаз во всем исследуемом интервале температур, что может быть объяснено наличием акцепторного допанта Zn'_{Al} , являющегося ловушкой протонов («trapping effect») [1].

Данная работа выполнена при поддержке Российского Научного Фонда и Правительства Свердловской области (грант № 24-13-20026).

Литература

1. Animitsa I.E. et al. The effect of Zn-doping on electrical properties, hydration, sintering and chemical resistance of hexagonal perovskite Ba7In6Al2O19 //Ceramics International. – 2024. – Т. 50. – №. 22. – С. 45851-45861.

© Бушуева А.В., Корона Д.В., Анимица И.Е., 2025

УДК 541.14:547.551.2

СИНТЕЗ И ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА НОВОГО КОМПЛЕКСА ДВУХВАЛЕНТНОГО САМАРИЯ $\text{SmCl}_2 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O} \cdot 0.05(^i\text{Bu}_4\text{Al}_2\text{O})$

Василук К.С., Якупова С.М., Галимов Д.И.

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Дигалогениды самария SmHal_2 широко используются в органическом синтезе, имеют перспективу применения в качестве фотокатализаторов и красных люминофоров [1]. При этом методы синтеза SmHal_2 крайне малочисленны и базируются на использовании высоких температур, безводных тригалогенидов самария, высокотоксичных веществ и т.д. [1]. С целью разработки нового и эффективного метода получения соединений двухвалентного самария изучено взаимодействие коммерчески доступного кристаллогидрата $\text{SmCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ с триизобутилалюминием $^i\text{Bu}_3\text{Al}$ в среде толуола при комнатной температуре и атмосферном давлении. В результате синтезирован новый ярко люминесцирующий комплекс сложного состава $\text{SmCl}_2 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O} \cdot 0.05(^i\text{Bu}_4\text{Al}_2\text{O})$, состав которого установлен с применением ряда физико-химических методов анализа [2]. Полное восстановление ионов Sm(III) до Sm(II) , контролируемое по спектрам фотолюминесценции (ФЛ) (рис. 1), протекает за 3 часа. Полученный комплекс Sm(II) обладает ярко-красной ФЛ ($\lambda_{\text{ФЛ}} = 704$ нм, $\tau = 3,6$ нс) и имеет перспективу применения в качестве эмиттера при создании люминофора красного цвета свечения.

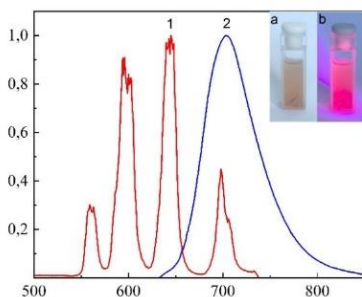


Рис. 1. Спектры фотолюминесценции $\text{SmCl}_3 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ (1) и комплекса $\text{SmCl}_2 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O} \cdot 0.05(^i\text{Bu}_4\text{Al}_2\text{O})$. $\lambda_{\text{возб}} = 408$ (1) и 560 нм (2). На вставке – фотографии комплекса в толуоле при дневном свете (а) и УФ-облучении (б).

Литература

1. Schäfer S., Kaufmann S., Rösch E.S., Roesky P.W., Divalent metallocenes of the lanthanides – a guideline to properties and reactivity // Chem. Soc. Rev., 52 (2023) 4006.
2. Galimov D.I., Yakupova S.M., Bulgakov R.G., Synthesis and luminescent properties of new molecular compounds of divalent lanthanides $\text{LnCl}_2 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O}$ (Ln = Yb, Sm, Tm, and Eu) // J. Photochem. Photobiol. A: Chem. 438 (2023) 114559.

© Василюк К.С., Якупова С.М., Галимов Д.И., 2025

УДК 544.032.52, 544.169

ЭМИССИОННЫЕ СВОЙСТВА УЛЬТРАКОРОТКИХ НАНОТРУБОК СОСТАВА AlN

Вертугина Е.С., Курышева М.В., Томилин О.Б., Родионова Е.В., Родин Е.А.

Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева,

Саранск, Россия

В настоящее время нанотрубки нитрида алюминия (AlN-НТ) успешно синтезируются, изучаются и могут представлять собой перспективный материал для применения в современной электронике.

Объектами исследования были выбраны модельные AlN-нанотрубки хиральности (n,0) $n=5-7$ и (n,n) $n=3,4$ протяженностью $\sim 1,4$ нм. Расчеты проводились методом DFT/B3LYP/6-31G при моделировании воздействия постоянного электрического поля (напряженностью $E = 0 - 1,5$ В/Å с шагом $0,1$ В/Å), направленного вдоль цилиндрической оси нанотрубок.

Эмиссионные свойства AlN-НТ исследовались в рамках теории эмиссионных молекулярных орбиталей [1]. Нами были определены величины критической напряженности электрического поля ($E_{кр}$), необходимые для проявления эмиссии электронов из нанотрубок.

В работе установлено, что величина $E_{кр}$ для AlN-НТ не зависит от их диаметра и составляет $0,9$ В/Å и $0,7$ В/Å для нанотрубок хиральности (n,0) и (n,n), соответственно. Таким образом, эмиссионные свойства AlN нанотрубок хиральности (n,n) превосходят эмиссионные свойства AlN нанотрубок хиральности (n,0). Отметим, что эмиссионные свойства нанотрубок состава AlN превосходят эмиссионные свойства как углеродных так и бор-нитридных нанотрубок [1, 2]. Для AlN-нанотрубок хиральности (n,0) наблюдается уменьшение величины $E_{кр}$ на $0,4-1,0$ В/Å относительно углеродных нанотрубок и на $0,3-0,4$ В/Å для бор-нитридных нанотрубок. Для AlN-нанотрубок хиральности (n,n) величина $E_{кр}$ на $0,3-0,4$ В/Å меньше соответствующей величины для углеродных и бор-нитридных нанотрубок. Таким образом, AlN-нанотрубки являются перспективным материалом для создания эффективных полевых эмиттеров.

Литература

1. Томилин О.Б., Родионова Е.В., Родин Е.А. Механизм полевой эмиссии электронов в одностенных углеродных нанотрубках // Журнал физической химии. 2020. Т. 94, № 8. С. 1242-1247.
2. Томилин О.Б., Родионова Е.В., Родин Е.А., Поклонский Н.А., Князев А.В. Квантово-химический расчет порога полевой эмиссии электронов из коротких бор-нитридных нанотрубок // Журнал прикладной спектроскопии. 2024. Т. 91, № 5 С. 697-706.

© Вертугина Е.С., Курышева М.В., Томилин О.Б.,
Родионова Е.В., Родин Е.А., 2025

УДК 544.42

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ И РАСТВОРИТЕЛЯ НА КОНСТАНТУ СКОРОСТИ РЕАКЦИИ ДИЛЬСА-АЛЬДЕРА БЕНЗ(А)АНТРАЦЕНА С 4-ФЕНИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛИН-3,5-ДИОНОМ И ТЕТРАЦИАНОЭТИЛЕНОМ

Габидуллина А.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Бенз(а)антрацен является одним из самых распространенных канцерогенов, входит в состав выхлопных газов и сигаретного дыма и содержится в каменноугольной смоле [1]. Бенз(а)антрацен является токсичным, особенно при его вдыхании и при попадании на кожу. Бенз(а)антрацен входит в состав смога. Источником данного полициклического ароматического углеводорода (ПАУ) являются ТЭС, металлургические, химические, нефтехимические и коксохимические заводы. Концентрация ПАУ в воздухе, воде и почве с каждым годом растет, что негативно сказывается на экологии. Актуальной задачей является снижение концентрации ПАУ в окружающей среде. Предполагается, что путем связывания ПАУ с различными диенофилами можно нейтрализовать токсичные свойства ПАУ [2].

В данной работе нами изучено влияние температуры и растворителя на константы скорости реакций Дильса-Альдера бенз(а)антрацена с 4-фенил-1,2,4-триазиолин-3,5-дионом и тетрацианоэтиленом (схема 1). Определены энтальпии и энтропии активации.

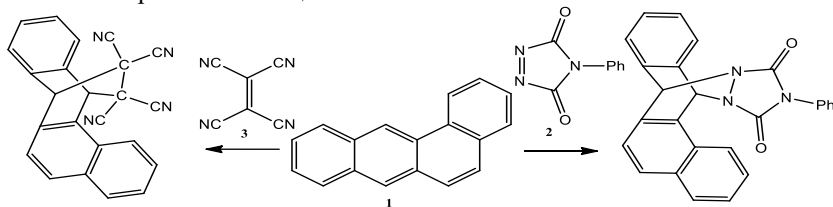


Схема 1. Реакции Дильса-Альдера бенз(а)антрацена (1) с 4-фенил-1,2,4-триазиолин-3,5-дионом (2) и тетрацианоэтиленом (3).

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (грант № 25-23-00675).

Литература

1. Talhout R., Schulz T., Florek E., van Benthem J., Wester P., Opperhuizen A. Hazardous compounds in tobacco smoke. – International Journal of environmental research and public health, 2011. – P. 613-628.
2. Kornilov D.A., Zimin Yu.S., Alekhina I.E., Kornilova A.A. A new approach to neutralize the toxic effect of polycyclic aromatic hydrocarbons on the example of 9,10-dimethylantracene: a kinetic aspect. – E3S Web of Conferences, 2023. – 02007.

© Габидуллина А.Р., 2025

УДК 543.424.2

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ
МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ

Гайфуллина Э.Р.^{1,2}, Кузьмина Е.В.², Юсупов А.Р.¹

¹*Баширский Государственный Педагогический университет*

им. М. Акмуллы, Уфа, Россия

²*Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

Разнообразие аллотропных форм углерода – графит, алмаз, фуллерены, углеродные нанотрубки (УНТ), графен, аморфный углерод и их модификации – обуславливает невероятный потенциал углеродных материалов в самых разных областях: от высокотехнологичной электроники и перспективных энергоносителей до биомедицины и создания сверхпрочных композитов. Однако для реализации этого потенциала критически важно глубокое понимание структуры этих материалов на микро- и наноуровне. Именно здесь на первый план выходит рамановская спектроскопия – мощный и незаменимый инструмент исследования [1].

Целью данного исследования является демонстрация возможностей и преимуществ метода спектроскопии комбинационного рассеяния для исследования строения различных углеродных материалов.

Рамановская спектроскопия (спектроскопия комбинационного рассеяния света) основана на неупругом рассеянии монохроматического света на молекулах или кристаллической решетке вещества.

Главное преимущество данного метода – это его неразрушающий характер. Анализ может проводиться «in situ», т. е. без предварительной подготовки образца, что особенно важно для изучения хрупких или чувствительных к внешним воздействиям наноматериалов [2].

Спектры комбинационного рассеяния света были получены на Раман-спектрометре EnSpectr R532 с использованием лазера с длиной волны равной 532 нм и оптической мощностью 30 мВт. Диаметр лазерного пятна

составил 0,6 мкм. Спектры снимались в диапазоне от 150 до 6000 см^{-1} со спектральным разрешением 5-8 см^{-1} .

В результате проведенного исследования были получены данные о расстоянии между дефектами и степени дефектности исследуемых углеродных материалов. Спектрограммы, полученные в ходе анализа (рис.1), показали наличие различных полос и пиков, которые отражают определённые характеристики материала. Также были определены размеры кристаллитов, что является важным показателем для оценки механических свойств материалов.

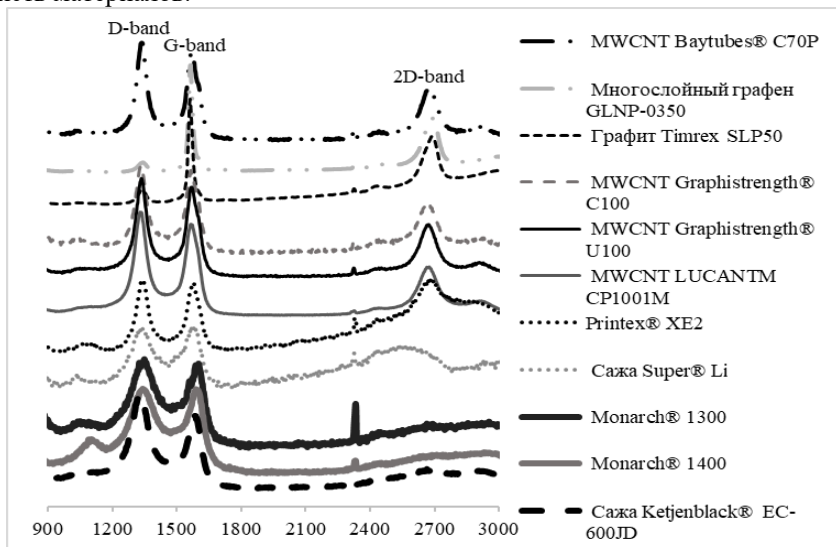


Рис. 1. Спектры комбинационного рассеяния углеродных материалов различной природы.

Таким образом, спектроскопия комбинационного рассеяния является мощным и информативным методом для исследования строения углеродных материалов. Анализ рамановских спектров позволяет получить ценную информацию о кристаллической структуре, дефектности, гибридизации углерода, размере кристаллитов и других структурных характеристиках.

Литература

1. Махнач З.С. Аллотропные модификации углерода. – 2022.
2. Колесов Е.А. Характеризация графена методом спектроскопии комбинационного рассеяния света. – 2015.

© Гайфуллина Э.Р., Кузьмина Е.В., Юсупов А.Р., 2025

МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ НАНОКОМПОЗИТА
ПОЛИЭТИЛЕН-НИТРИД БОРА

Галин А.М., Купова О.Ю.

*Уфимский государственный нефтяной технический
университет, Уфа, Россия*

Введение

Разработка полимерных нанокompозитов с улучшенными свойствами является актуальной задачей современных материаловедческих исследований. Нитрид бора (BN), обладая высокой термической стабильностью и химической инертностью, представляет собой перспективный нанонаполнитель для полиэтилена (ПЭ), позволяющий улучшить его функциональные характеристики. Важную роль играет межфазное взаимодействие между компонентами, которое определяет структурные и эксплуатационные свойства композита [1]. Настоящая работа направлена на исследование этих взаимодействий и оценку влияния наночастиц BN на свойства полимерной матрицы методом молекулярного моделирования. Сравнения характеристик чистого полиэтилена и композита с нитридом бора, в результате чего улучшаются ключевые параметры, представленный в таблице 1.

Таблица 1

Свойства чистого полиэтилена (ПЭ) и композита полиэтилена с
диоксидом кремния (ПЭ + BN)

Свойство	Чистый ПЭ	ПЭ + BN
Прочность (МПа)	20–30	25–35
Теплопроводность (Вт/(м·К))	0,4–0,5	0,6–1,0
Электропроводность (См/м)	$\sim 10^{-16}$	$\sim 10^{-16}$
Стойкость к истиранию (мг/км)	100–150	80–100
Ударная вязкость (кДж/м ²)	10–15	15–20
Термическая устойчивость (°С)	120–140	180–250

Методы исследования

Для изучения структуры и свойств композита ПЭ–BN применялось моделирование методом молекулярной динамики. Использовались периодические граничные условия и оптимизированные параметры модели с учётом физических свойств компонентов. Проверка стабильности расчетов обеспечивала достоверность полученных данных [3].

Результаты исследований

Моделирование выявило, что наночастицы нитрида бора равномерно перемещаются в полиэтиленовой матрице, образуя устойчивую структуру, которая сохраняет свои свойства при повышенных температурах и нагрузках [3]. Энергия взаимодействия между ПЭ и BN составила -96,36

ккал/моль, подтверждая прочность межфазных связей и объясняя улучшение характеристик композита.

Композит показал резкое увеличение термической устойчивости до 180–250 °С, что делает его пригодным для использования в условиях экстремальных температур. Теплопроводность выросла до 0,6–1,0 Вт/(м·К), превосходя показатели плотности полиэтилена, а ударная вязкость увеличилась до 15–20 кДж/м², что свидетельствует о возросшей стойкости к сдвигам давления [2]. Повышение стойкости к истиранию является дополнительным потенциальным материалом для создания износостойких покрытий и деталей [1].

На рисунке 1 представлена модель комплекса ПЭ–BN, полученная в результате моделирования, которая иллюстрирует широкие масштабы наночастиц в полимере.

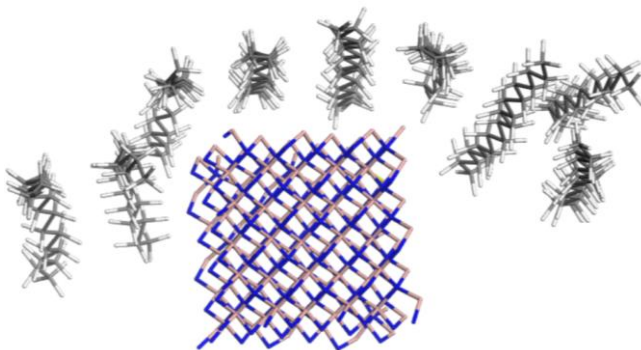


Рис. 1. Комплекс ПЭ – наполнитель (BN)

Выводы

Наноккомпозит на основе полиэтилена с добавлением нитрида бора обладает улучшенными термическими и механическими свойствами по сравнению с чистым полимером. Высокая теплопроводность, термическая устойчивость и ударная вязкость делают материал перспективным для применения в теплоизоляции, машиностроении и других высокотехнологичных областях. Дальнейшие исследования могут быть направлены на изучение размеров и морфологии наночастиц BN на свойствах композита.

Литература

1. Смирнов И.В. Полимерные наноккомпозиты: технология синтеза и свойства. – Москва: Наука, 2020. – 310 с.
2. Коваленко Н.С., Петрова Е.А. Наноматериалы и композиты: физико-химические основы. – Екатеринбург: УрО РАН, 2021. – 235 с.
3. Иванов А.Г. Моделирование структуры полимерных композитов с нанонаполнителями. – Санкт-Петербург: Химиздат, 2022. – 260 с.

© Галин А.М., Купова О.Ю., 2025

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ ЭКСТИНКЦИИ КОФЕИНА,
ТЕОФИЛЛИНА И ТЕОБРОМИНА В ВОДЕ

Гималетдинова Э.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Кофеин, теofilлин и теобромин, относящиеся к классу пуриновых алкалоидов, играют важную роль в процессах жизнедеятельности и обладают широким спектром фармакологического действия. Для количественного определения данных соединений в химических исследованиях можно использовать спектрофотометрический метод. Однако, в литературе отсутствуют значения коэффициентов экстинкции (ϵ_λ) рассматриваемых производных пурина (ПП). Поэтому целью настоящей работы явилось определение ϵ_λ и рабочих концентраций растворов кофеина, теofilлина и теобромина в воде.

УФ-спектры снимали на спектрофотометре UV-2401 PC фирмы «Shimadzu» (Япония) в кварцевых кюветах толщиной 1 см относительно воды. Для нахождения коэффициентов экстинкции использовали закон Бугера-Ламберта-Бера:

$$A = \epsilon_\lambda \cdot C \cdot l,$$

где A – оптическая плотность растворов ПП; ϵ_λ – коэффициент экстинкции ПП при данной длине волны (λ_{\max}), л/(моль·см); C – концентрация ПП, моль/л; l – толщина кюветы, см.

Установлено, что линейная зависимость между оптической плотностью ПП и его концентрацией в водном растворе четко выполняется до $C = 2 \cdot 10^{-4}$ моль/л. Коэффициенты экстинкции, рассчитанные по тангенсам углов наклона зависимостей $A = f(C)$, представлены в табл. 1.

Таблица 1

Коэффициенты экстинкции производных пурина в воде

Производное пурина	$\epsilon_\lambda \cdot 10^{-3}$, л·моль ⁻¹ ·см ⁻¹	λ_{\max} , нм
Кофеин	10.2 ± 0.1	272
	27.2 ± 0.2	205
Теofilлин	9.6 ± 0.1	271
	23.4 ± 0.2	202
Теобромин	9.9 ± 0.1	273
	23.0 ± 0.2	203

Таким образом, в настоящей работе определены коэффициенты экстинкции и рабочие концентрации водных растворов трех пуриновых производных.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

© Гималетдинова Э.Р., 2025

УДК 544.653.1:543.554

ЭЛЕКТРОАНАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА pH-СЕНСОРОВ НА ОСНОВЕ Mo-СОДЕРЖАЩИХ ОКСИДНЫХ СЛОЕВ НА ТИТАНЕ

Гольц А.А.^{1, 2}, Васильева М.С.^{1, 2}

¹*Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия*

²*Институт химии ДВО РАН, Владивосток, Россия*

В качестве альтернативы стеклянному электроду (СЭ) в последнее время широко исследуют электрохимические pH-сенсоры на основе оксидов переходных металлов [1]. Среди различных оксидных материалов TiO_2 - MoO_x пленки являются перспективными для создания недорогих и чувствительных pH сенсоров, так как оба оксида обладают высокой pH-чувствительностью [2, 3]. Одним из перспективных методов получения многокомпонентных оксидных слоев на металлах и сплавах является метод плазменно-электролитического оксидирования (ПЭО).

В данной работе исследованы электроаналитические свойства Mo-содержащих оксидных слоев на титане в прямой pH-метрии и кислотно-основном титровании. Оксидные пленки на титане формировали методом ПЭО в импульсном режиме при плотности тока анодного тока 0.45 А/см^2 в течение 10 мин.

Согласно данным рентгенофазового анализа полученные ПЭО покрытия содержат TiO_2 в модификациях рутил и анатаз и MoO_3 . Исследование поведения Ti/TiO_2 , MoO_3 ПЭО-электрода в прямой pH-метрии проводили в интервале pH $2 \div 12$ в сравнении со СЭ. Для обоих электродов линейная зависимость E-pH наблюдается во всем диапазоне pH как при увеличении, так и при уменьшении pH (рис. 1). Коэффициенты «b» для исследуемого ПЭО-электрода несколько ниже СЭ, что характерно для системы металл – оксид и может быть связано с различиями в стехиометрическом составе оксидов исследуемых металлов и их полупроводниковыми свойствами.

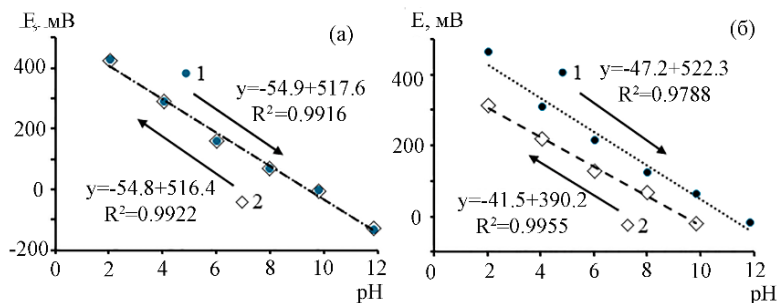


Рис. 1. E-pH зависимости для СЭ (а) и Ti/TiO₂, MoO₃ ПЭО-электрода (б).

Учитывая тот факт, что коэффициенты аппроксимации зависимости $E = a - bpH$ близки к единице, такие электроды могут быть использованы в кислотно-основном титровании в качестве индикаторных электродов. Как видно из рис. 2 дифференциальные кривые титрования имеют типичный для потенциометрического титрования вид и аналитический сигнал в точке эквивалентности в виде максимума.

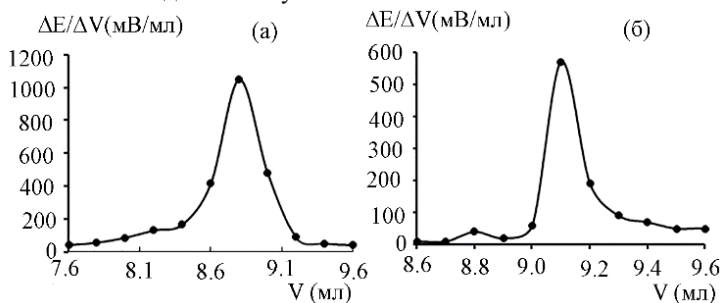


Рис. 2. Дифференциальные кривые кислотно-основного титрования 0.1 М раствора NaOH 0.1 М раствором HCl для СЭ (а) и Ti/TiO₂, MoO_x (б).

Методом «введено-найдено» было установлено, что относительная ошибка определения гидроксида натрия с использованием СЭ и Ti/TiO₂, MoO_x электрода составляет 3.3 и 6.0 % соответственно.

Таким образом полученные оксидные ПЭО-слои на титане, модифицированные молибденом, проявляют высокую pH-чувствительность, просты в изготовлении, имеют невысокую стоимость, вследствие чего являются перспективными pH-сенсорами для различных применений.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института химии ДВО РАН FWFN (0205)-2025-0001.

Литература

1. Маринина Г.И., Шуб Д.М., Прочанкин С.Ю. Исследование электроаналитических свойств композиционных металлоксидных электродов // Известия ВУЗов. Химия и химическая технология. 1984. Т. 27, № 8. С. 900-903.
2. Saji V.S., Lee C.-W. Molybdenum, Molybdenum Oxides, and their Electrochemistry // ChemSusChem. 2012. P. 1-17.
3. Arshak K., Gill E., Korostynska A. Mixed metal oxide films as pH sensing materials // Microsystem Technologies. 2008. Vol. 14. P. 499-507.

© Гольц А.А., Васильева М.С., 2025

УДК 544.18

МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРАТИРОВАННОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ 5-ГИДРОКСИНАФТАЛИН-1-СУЛЬФОКИСЛОТЫ

Гришина А.Д., Лапыкина Е.А.

Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

Органические сульфокислоты гигроскопичны, обладают высокой протонной проводимостью, в связи с этим они перспективны для протонообменных мембран [1]. Процесс отрыва протона от алкил- и бензолсульфоновых кислот хорошо изучен, тогда как производные нафталина остаются малоисследованными соединениями. В работе было выполнено моделирование (DFT/B3LYP/сс-pVTZ, Gaussian09) кластеров наиболее выгодного конформера 5-гидроксинафталин-1-сульфокислоты (ГНСК) с молекулами воды состава (ГНСК): $n(\text{H}_2\text{O})$, где $n=1-6$ в среде растворителя (модель PCM (вода)) и рассмотрен процесс переноса протона от кислорода сульфогруппы к молекуле воды (рис. 1).

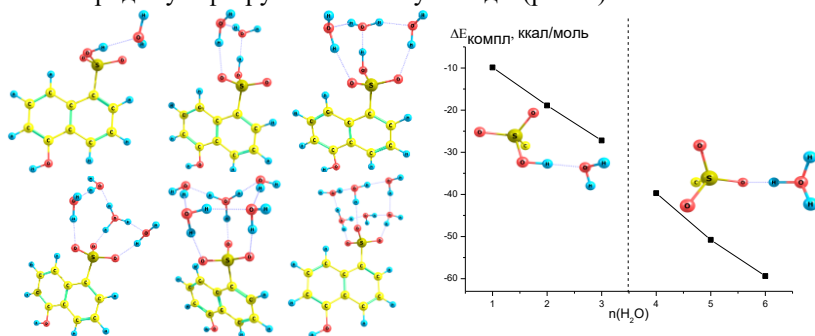


Рис. 1. Структуры кластеров и график зависимости $\Delta E_{\text{компл}}$ от $n(\text{H}_2\text{O})$

Определено, что отрыв протона от группы $-\text{SO}_3\text{H}$ происходит лишь при наличии в системе четырех и более молекул воды с образованием иона гидроксония, что отражено на графической зависимости энергии комплексообразования ($\Delta E_{\text{компл}} = E_{\text{кластер}} - E_{\text{ГНСК}} - n \cdot E_{\text{H}_2\text{O}}$) от количества молекул воды в системе. Выигрыш в энергии увеличивается при добавлении молекул

воды в гидратные кластеры, что объясняется увеличением образующихся водородных связей. Отметим, что в гидратных комплексах наблюдается образование сетки из молекул воды (рис. 1). Результаты расчетов могут способствовать интерпретации результатов экспериментальных исследований протонной проводимости при влиянии влажности окружающей среды.

Литература

1. S.J. Paddison The modeling of molecular structure and ion transport in sulfonic acidbased ionomer membranes//J. New Mat. Electrochem. Systems 4, p. 197-207 (2001).

© Гришина А.Д., Лапыкина Е.А., 2025

УДК 66.094.3-926.214

ОКИСЛЕННЫЕ ФРАКЦИИ АРАБИНОГАЛАКТАНА СИБИРСКОЙ ЛИСТВЕННИЦЫ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАТРИЦЫ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ

Давлетшина Д.Т.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Арабиногалактан (АГ) обладает гастропротекторным, иммуностимулирующим и антибактериальным эффектом против ряда бактерий, а его мембранотропные свойства позволяют использовать его как транспортное средство для медикаментов с ограниченной биодоступностью. Необходимость синтеза ОФАГ обусловлено отсутствием карбоксильных групп в структуре полимера и его высокой молекулярной массой. Учитывая вышеизложенное, основной задачей исследования является выбор условий и синтез окисленных фракций полисахарида для дальнейшего изучения их способности к комплексообразованию с лекарственными веществами.

Исследования, представленные в источниках [1-3], демонстрируют, что действие озон-кислородной смеси на водные растворы АГ вызывает процессы окисления и разрушения его структуры. Авторами [3] были подобраны оптимальные условия для получения ОФАГ со средней молекулярной массой ~ 25 кДа ($[АГ]_0 = 10\%$ масс., $V_{O_3+O_2} = 6$ л/час, $T = 363$ К, $t = 2$ ч). Именно эти условия легли в основу получения ОФАГ, которую в дальнейшем использовали для изучения взаимодействия с ацетилсалициловой кислотой (АСК). Поскольку АСК обладает раздражающим действием на ЖКТ, ожидается, что ее комплекс с ОФАГ будет обладать менее токсичным действием, улучшится биодоступность и увеличится время высвобождения действующего вещества в органах-мишенях.

В настоящей работе определены состав комплексов АСК с ОФАГ (1 : 1) и их константы устойчивости в интервале температур 291-316 К. Проведена

оценка термодинамических параметров комплексообразования. На основе полученных данных разработана методика синтеза комплекса.

Литература

1. Тимербаева Г.Р. и др. Кинетика озонированного окисления арабиногалактана (*Larix Sibirica* L.) в водных растворах // Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология. 2009. Т. 52. № 2. С. 95-99.
2. Зимин Ю.С., и др. Кинетика и механизм окислительных превращений полисахаридов в водной среде // Вестник Башкирского университета. 2009. Т. 14. № 3(1). С. 1117-1124..
3. Борисова Н.С. и др. Окислительная деструкция арабиногалактана и его комплексообразование с урацилами // Известия высших учебных заведений. Химия и химическая технология. 2014. Т. 57. № 9. С. 62-66.

© Давлетшина Д.Т., 2025

УДК 544.421.081.7

СПИНОВЫЕ ЛОВУШКИ СИНГЛЕТНОГО КИСЛОРОДА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРОВ ПРИ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ

Дементьев С.А.^{1,2}, Подаров Р.А.^{1,2}, Крумкачева О.А.^{1,2}

¹Новосибирский Государственный Университет, Новосибирск, Россия

²Международный Томографический Центр, СО РАН, Новосибирск, Россия

Активные формы кислорода (АФК) являются ключевым агентом в фотодинамической терапии рака (ФДТ): при облучении фотосенсибилизатор (ФС) переходит в триплетное состояние и генерирует АФК, что приводит к апоптозу и/или некрозу окружающих клеток. Актуальной задачей в развитии ФДТ остается поиск новых перспективных ФС. Важным шагом в оценке применимости новых ФС является определение эффективности генерации ими синглетного кислорода ($^1\text{O}_2$) – одного из видов АФК. Одним из способов решения данной задачи является метод спиновых ловушек (СЛ). Диамагнитная СЛ захватывает $^1\text{O}_2$ и становится парамагнитным стабильным радикалом (СР), который можно детектировать с помощью стационарного ЭПР. Однако у данного метода есть существенное ограничение: большинство СЛ синглетного кислорода существенно отклоняют рН среды в щелочную сторону. Это препятствует оценке свойств ФС, ввиду деградации СР и агрегации некоторых типов ФС при щелочных рН. Более того, ФС как потенциальные лекарственные агенты необходимо исследовать при физиологических рН, что невозможно для большинства СЛ $^1\text{O}_2$, наиболее распространенных в исследованиях. Данную проблему можно решить, применяя специфические СЛ с различными заместителями.

Целью данной работы являлось исследование эффективностей захвата $^1\text{O}_2$ рядом как новых, так и известных СЛ, синтезированных в лаборатории азотистых соединений НИОХ СО РАН. Данные ловушки отличаются

различными заместителями в 4, а также во 2 и 6 положениях пиперидинового цикла. Для данных СЛ, с помощью ЯМР спектроскопии, были определены значения рКа. Затем с использованием в качестве ФС модельного порфирина мезо-тетраксис(N-метил4-пиридил)порфин (ТмРурР4), исследовалась эффективность захвата $^1\text{O}_2$ спиновыми ловушками при стационарном фотолизе с использованием светодиода при комнатной температуре в оптической кювете при различных уровнях рН в 10 мМ фосфатном буферном растворе. Контроль селективности захвата $^1\text{O}_2$ осуществлялся дополнительными исследованиями в растворе с азидом натрия и в дейтерированной среде. В результате были установлены структуры СЛ наиболее перспективные для исследования эффективности генерации синглетного кислорода ФС.

© Дементьев С.А., Подаров Р.А., Крумкачева О.А., 2025

УДК 541.14:547.551.2

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ ПЕРОКСИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ НА ИНГИБИРУЮЩУЮ АКТИВНОСТЬ АНИЛИНА

Забалуева С.С.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Анилин получил широкое применение в качестве красителя тканей, как промежуточный продукт для производства полиуретанов, в производстве каучуков, гербицидов, взрывчатых веществ и сульфаниламидных лекарственных препаратов. Одним из важнейших свойств биологической активности соединений является их антиокислительная способность, заключающаяся в возможности снижения скорости нежелательных процессов окисления и окислительной деструкции. Целью настоящей работы является исследование антиокислительных свойств анилина в окисляющихся модельных системах - этилбензоле (ЭБ) и изопропиловом спирте (ИПС).

Выбор модельных субстратов окисления определяется тем, что для ЭБ и ИПС в литературе имеются значения элементарных констант скоростей реакций продолжения, вырожденного разветвления и обрыва цепей [1]. Способность анилина к снижению скорости окисления ЭБ и ИПС исследовали на высокочувствительной дифференциальной манометрической установке по поглощению кислорода [2]. Инициатором процесса окисления модельных субстратов служил азоизобутиронитрил (АИБН), температура опытов постоянна и составляет 75°C . По кинетическим кривым поглощения кислорода вычисляли скорость процесса окисления модельного субстрата.

Стандартным опытом является реакция окисления ЭБ и ИПС в присутствии классического инициатора – азоизобутиронитрила. Установлено, что кинетическая кривая поглощения кислорода имеет

линейный вид, что является доказательством кинетического режима окисления модельных субстратов, частный порядок реакции по окислителю кислороду нулевой. В кинетическом режиме окисления реакции продолжения и обрыва цепей в ЭБ ведут его пероксильные радикалы. В среде окисляющегося ИПС в данных условиях реакции участвуют два сорта радикалов: оксипероксильные и гидропероксильные радикалы. В дальнейшем в окисляющуюся систему добавляли разные концентрации анилина. Результаты эксперимента показывают, что добавки анилина в систему приводят к значительному снижению скорости окисления ЭБ и ИПС. Данный результат доказывает эффект ингибирования исследуемой реакции добавками анилина. Установлена симбатная связь между скоростью поглощения кислорода и концентрацией добавленного анилина в систему: чем больше концентрация анилина, тем меньше скорость окисления модельных субстратов.

Цепной режим реакции окисления модельных субстратов сохраняется и в присутствии добавок анилина. Наличие цепного режима окисления позволяет вычислить значение эффективной константы скорости реакции ингибирования, состоящей из произведения константы скорости взаимодействия пероксильного радикала субстрата с молекулой анилина на величину стехиометрического коэффициента ингибирования. Стехиометрический коэффициент ингибирования равен числу радикалов, которые взаимодействуют с одной молекулой ингибитора, для аминогруппы в молекулах ингибиторов он равен двум. Результаты обработки экспериментальных зависимостей показали, что в окисляющемся ИПС эффективная константа скорости ингибирования анилином в 165 раз выше, чем в ЭБ. Данный результат, по-видимому, определяется более высокой активностью оксипероксильных и гидропероксильных радикалов ИПС в реакции с анилином, по сравнению с активностью пероксильного радикала ЭБ. Следует отметить, что в окисляющемся ИПС в отличие от модельного субстрата ЭБ возможна регенерация молекул ингибитора в реакциях обрыва цепей, что также приводит к повышению эффективной константы скорости ингибирования.

Литература

1. Ишмуратова М.М., Кабулова Ф.Д., Гулбоев Д.Т., Ишбирдин А.Р., Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н. Популяционные и ресурсные характеристики *Hipporhae rhamnoides* L. в Зарафшанском национальном природном парке (Республика Узбекистан). Известия Уфимского научного центра РАН. 2024. № 4. С. 18-24
2. Garifullina G.G., Nasretdinova R.N., Gerchikov A.Ya., Shaymordanova G.M., Petrova A.V., Mustafin A.G. Antioxidant efficiency of triterpenoids in radical chain oxidation of organic compounds. Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. 2024. T. 137. № 1. С. 39-51.
3. Юрьева А.О., Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н. Плоды облепихи в качестве ингибиторов окисления этилбензола. Материалы XI Международной молодежной

УДК 547: 544.722.123

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КАРДИОВАСКУЛЯРНОГО ПРЕПАРАТА ВАЛСАРТАН В МОДЕЛЬНЫХ БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ

Заливалова М.А., Субботкина И.Н.

Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

Валсартан - мощное, перорально активное непептидное производное тетразола, селективно ингибирующее рецептор ангиотензина II типа 1, вызывающее снижение артериального давления и используемое для лечения гипертонии. Однако, несмотря на его успешное применение, процессы распределения этого лекарства в биологических средах организма практически не изучены. Липофильность является важнейшим физико-химическим параметром, связанным с токсикологическими свойствами лекарственных веществ и их фармакокинетическим поведением [1]. Количественной характеристикой липофильности принято считать коэффициент распределения в системе октанол/вода. Основные ограничения, связанные с использованием октанола как модельного растворителя, заключаются в его способности к специфическим взаимодействиям. Преодоление биологически активными соединениями гематоэнцефалического барьера включает в себя процессы на поверхности и в углеводородном ядре мембран. В этом случае необходим инертный растворитель, в качестве которого используется гексан, способный взаимодействовать с молекулами растворенного вещества только посредством сил ван-дер-Ваальса.

Цель данной работы заключалась в исследовании процессов распределения кардиоваскулярного препарата валсартан в двухфазных системах октанол/буфер pH 7.4 (o/b) и гексан/буфер pH 7.4 (h/b), моделирующих липидные мембраны и гематоэнцефалический барьер, соответственно. Кроме того, в задачи исследования входил расчет термодинамических функций переноса, необходимых для объяснения молекулярных механизмов равновесного процесса.

Коэффициенты распределения валсартана в модельных системах несмешивающихся растворителей ($K_{o/b}$, $K_{h/b}$) были измерены в интервале температур 293.15–313.15 К классическим методом изотермического насыщения (Таблица 1).

Таблица 1

Экспериментальные концентрации и коэффициенты распределения
валсартана в изученных системах

T, K	$x_o \cdot 10^5$	$x_h \cdot 10^7$	$K_{o/h}$	$\log K_{o/h}$	$x_h \cdot 10^5$	$x_b \cdot 10^7$	$K_{h/b}$	$\log K_{h/b}$	$\Delta \log K_{o/h}$
293.15	1.86	3.07	60.36	4.23	1.19	3.26	36.33	3.59	0.64
298.15	1.87	3.40	66.91	4.33	1.21	2.78	43.35	3.77	0.56
303.15	1.88	2.81	69.89	4.37	1.22	2.49	49.03	3.89	0.48
306.15	1.89	2.63	71.81	4.40	1.23	2.24	55.08	4.00	0.40
315.15	1.91	2.36	80.91	4.52	1.24	2.07	59.94	4.09	0.43

Как видно из представленных данных, в обеих исследованных системах коэффициенты распределения линейно увеличиваются с ростом температуры, что указывает на смещение равновесия в органическую фазу. Значение $\log K_{o/h}$ при 298 К равно 4.33, характеризует валсартан как высоко липофильное соединение. Изученное лекарство попадает в наиболее благоприятный интервал значений коэффициентов распределения $0 < \log K_{o/h} < 5$ [2]. Лекарства с такими значениями липофильности обладают оптимальной пероральной абсорбцией для проникновения через клеточные мембраны в кровь. Величины $\Delta \log K_{o/h}$, принадлежащие к диапазону значений 0.40–0.64, характеризуют благоприятную потенциальную способность лекарственного препарата к преодолению гематоэнцефалического барьера.

На основе полученных температурных зависимостей коэффициентов распределения валсартана в изученных двухфазных системах были рассчитаны термодинамические функции переноса (энергии Гиббса, энтальпии и энтропии). Выявлено, что в исследуемых системах процесс распределения валсартана из органической фазы в водную среду термодинамически благоприятен и будет протекать спонтанно, поскольку значения свободной энергии Гиббса в исследованном диапазоне температур отрицательны. Установлено, что изменения энтальпии процесса переноса положительны в обеих системах, что характеризует процесс распределения вещества между гидрофильной и липофильной средами как эндотермический. Кроме того, изменения энтропии тоже положительны, что указывает на высокую подвижность молекулы лекарства и увеличение разупорядоченности системы растворитель-растворенное вещество в процессе переноса.

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ (проект 23-23-00193).

Литература

1. Waring M.J. Lipophilicity in drug discovery. / M.J. Waring // Expert Opin. Drug Discov. – 2010. – Т.5. – 235-248 с.

2. Comer J.E. High throughput measurement of logD and pKa / P. Artursson; H.Lennernas; H. van de Waterbeemd; J.E. Comer // Methods and Principles in Medicinal Chemistry – 2003.

© Заливалова М.А., Субботкина И.Н. 2025.

УДК 544.4:546.05

СИНТЕЗ, СТРУКТУРНАЯ АТТЕСТАЦИЯ И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ BiVO_4 , ЗАМЕЩЕННОГО Eu И Gd

Захаров Е.О., Емельянова Ю.В., Буянова Е.С.

*Уральский Федеральный Университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург,
Россия*

BiVO_4 является перспективным полупроводниковым фотокаталитическим материалом благодаря своей узкой запрещенной зоне, хорошей стабильности и нетоксичности.

Эффективность однофазного BiVO_4 как фотокатализатора ограничена невозможностью рекомбинации электронно-дырочных носителей заряда. Поэтому необходимо разработать стратегии повышения эффективности фотокаталитического процесса за счет разделения электронно-дырочных носителей заряда. Эту проблему можно решить несколькими путями: контролируя морфологию и кристаллографические характеристики BiVO_4 , получая моноклинно–тетрагональную гетероструктуру из BiVO_4 ; создавая фотокаталитические системы с p – n переходами, используя комбинацию полупроводников n -типа (BiVO_4) и полупроводников p -типа.

В настоящей работе твердофазным методом и методом соосаждения получен ортованадат висмута BiVO_4 и твердые растворы на его основе общего состава $\text{Bi}_{1-x-y}\text{Gd}_x\text{Eu}_y\text{VO}_4$, где $x = 0.07$; $y = 0.01, 0.02, 0.03$. Оценено соотношение моноклинной и тетрагональной фазы в полученных образцах в зависимости от метода синтеза и конечной температуры отжига. Структурная аттестация полученных образцов проведена методом РФА. Методом СЭМ была изучена поверхность и внешний вид образцов, проведен элементный анализ. Методом ИК-спектроскопии подтверждено присутствие характерных полос поглощения для ортованадатов висмута.

Методом импедансной спектроскопии определена общая электропроводность всех исследуемых образцов в зависимости от температуры. Построены и проанализированы эквивалентные схемы годографов импеданса. Построены температурные зависимости электропроводности. Общий вид зависимостей является типичным для ортованадата висмута. На кривых наблюдаются перегибы, соответствующие фазовым переходам из тетрагональной в моноклинную модификацию.

Для всех составов рассчитано значение ширины запрещенной зоны. Оценка фотокаталитической активности проведена с использованием красителя метиленового синего при температурах 25 и 400°C. Наилучшие

результаты получены для состава $\text{Bi}_{0.9}\text{Gd}_{0.07}\text{Eu}_{0.03}\text{VO}_4$, синтезированного при 400°C . Максимальная степень превращения красителя наблюдается на образцах, полученных растворным методом синтеза.

© Захаров Е.О., Емельянова Ю.В., Буянова Е.С., 2025

УДК 547.022:544.18:544.323.2

DFT-ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ОЛИГОМЕРОВ АНИЛИНА И ИНДОЛА

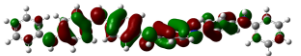
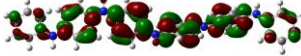
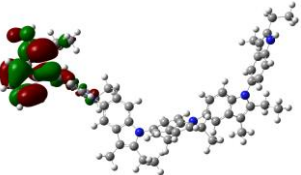
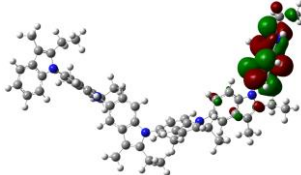
Захарова Т.Н., Алексеева О.Л., Саттарова А.Ф.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Полианилины и полииндолы, обладающие высокой электронной проводимостью, осуществляющейся за счет делокализованных электронов или дырок, являются перспективными для разработки в качестве проводящих полимеров в устройствах для органических светодиодов, солнечных батарей и сенсоров [1]. В качестве параметра, определяющего эффективность преобразования света, используется разность энергетических уровней НОМО – донорного и LUMO – акцепторного материала [2]. В этой связи, в настоящем исследовании DFT-методами (B3LYP/6-31G(d)), были рассчитаны основные электрохимические параметры 6-звеньевых цепей анилина и индола, представленные в таблице 1.

Таблица 1

Электрохимические параметры олигомеров анилина и индола

	$E_{\text{НОМО}}$, эВ	E_{LUMO} , эВ	E_{gap} , эВ
анилин	-4.23 	-0.28 	3.95
индол	-4.62 	-0.70 	3.92

По рассчитанным значениям, можно судить о том, что оба соединения показывают схожие проводящие свойства, поскольку обладают близкими значениями энергии запрещенной зоны. Это делает возможным использование выгодного по производству соединения из исследуемых, при разработке комплектующих различных электрических конструкций.

Литература

1. Salzner U. Electronic structure of conducting organic polymers: insights from time-dependent density functional theory // Wiley Interdisciplinary Reviews: Computational Molecular Science. – 2014. – Т. 4. – №. 6. – С. 601-622.
2. Brabec C. J. et al. Origin of the open circuit voltage of plastic solar cells //Advanced functional materials. – 2001. – Т. 11. – №5. – С. 374-380.

© Захарова Т.Н., Алексеева О.Л., Саттарова А.Ф., 2025

УДК 541.14:547.551.2

ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЙ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЙ МАТЕРИАЛ НА ОСНОВЕ ПОЛИСТИРОЛА, ДОПИРОВАННОГО АНИЗОМЕТРИЧНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ Eu^{3+} И Tb^{3+}

Зиятдинова Р.М., Крупин А.С., Князев А.А.,
Галяметдинов Ю.Г.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия*

Люминесцентная термометрия (ЛТ) благодаря быстрому отклику, высокой чувствительности, превосходному пространственному и временному разрешению обладает неоспоримым преимуществом перед другими видами определения температуры [1]. Особую привлекательность имеют материалы на основе соединений Ln(III) , характерные узкие полосы и длительные времена жизни люминесценции которых позволяют измерять температуру с высокой точностью. Несмотря на вышеперечисленные преимущества, довольно низкая фотостабильность этих соединений при продолжительном УФ-облучении является основным недостатком, не позволяющим их использовать в качестве люминесцентных термометров. Из литературы известно, что внедрение в матрицу полимера комплексов Ln(III) приводит к улучшению фотолюминесцентных свойств, повышению термостабильности и механической прочности, что позволяет сделать процессы создания материалов на их основе более технологичными. Один из подходов ЛТ основан на использовании температурной зависимости соотношения двух полос эмиссии, что может быть достигнуто либо путем комбинирования двух люминофоров, либо с использованием одного люминофора, проявляющего две полосы эмиссии, это позволяет измерять температуру с высокой точностью без дополнительной калибровки прибора. В работе на основе анизометричных комплексов Eu(III) и Tb(III) , распределенных в матрице полистирола методом spin-coating получены фотостабильные люминесцентные термосенсорные пленки, прозрачными во всем видимом диапазоне и эффективно поглощающие излучение в области 385-405 нм. Изучено влияние температуры на оптические свойства плёнок.

Пленки обладают высокой чувствительностью времени жизни люминесценции $5,44 \text{ мкс} \cdot \text{К}^{-1}$ в диапазоне температур 298-363 К, что позволяет в перспективе использовать данные материалы в качестве рабочих элементов люминесцентных термосенсоров.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта Минобрнауки РФ в рамках государственного задания на оказание государственных услуг № 075-01508-23-00 (FZSG-2023-0008).

Литература

1. Lapaev D.V., Nikiforov V.G., Lobkov V.S., Knyazev A.A., Ziyatdinova R.M., Galyametdinov Y.G. // Journal of Materials Chemistry C. 2020. V. 8. P. 6273-6280.

© Зиятдинова Р.М., Крупин А.С., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г., 2025

УДК 544.723.21: 541.183: 661.183.6

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ АМОРФНОГО АЛЮМОСИЛИКАТА НА СВОЙСТВА ГРАНУЛИРОВАННОГО ИЕРАРХИЧЕСКОГО ЦЕОЛИТА ZSM-5

Ишкильдина А.Х.¹, Аглямова Д.Р.², Травкина О.С.^{1,2}

¹ Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия

² Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа,
Россия

Сегодня цеолиты активно используются при разработке современных адсорбентов и катализаторов для нефтехимической и нефтеперерабатывающей промышленности. Это связано с уникальным сочетанием свойств, таких как развитая микропористая структура, наличие сильных кислотных центров Бренстеда, молекулярно-ситовой эффект, а также высокая термо- и гидростабильность [1, 2]. Среди множества молекулярных сит особое место занимает цеолит ZSM-5, относящийся к структурному типу MFI. Он обладает трехмерной пористой структурой, состоящей из прямоугольных и эллиптических каналов размером $5,3 \times 5,6 \text{ \AA}$ и $5,1 \times 5,5 \text{ \AA}$ соответственно [3].

Основные исследования в области синтеза цеолита ZSM-5 сосредоточены на разработке методов получения наноразмерных и иерархических кристаллов, что позволяет снизить диффузионные ограничения в его микропорах [4-6]. Доказано, что каталитические системы на основе наноразмерных и иерархических кристаллов цеолита ZSM-5 демонстрируют повышенную активность, селективность и стабильность в ряде промышленно значимых каталитических процессов [7-11]. Однако большинство методов синтеза таких материалов основаны на использовании модификаторов роста кристаллов и поробразующих темплатов, что существенно увеличивает их стоимость. Это делает данные подходы

экономически невыгодными для масштабирования на промышленный уровень.

Поэтому целью данной работы является разработка способа синтеза гранулированного цеолита ZSM-5 с иерархической пористой структурой с использованием в качестве временного связующего материала аморфных алюмосиликатов, полученных по золь-гель технологии с применением органических и неорганических источников кремния.

В результате проделанной работы определены химический и фазовый состав, кислотные свойства и характеристики пористой структуры носителя, использующегося для приготовления бифункционального катализатора, представляющего собой гранулированный цеолит ZSM-5 в H-форме высокой степени кристалличности с иерархической пористой структурой, промотированный 0,5% масс. Pt.

Показано, что гранулы являются едиными сростками кристаллов различной морфологии и дисперсности с $S_{БЭТ}=310 \text{ м}^2/\text{г}$, $V_{\text{микро}}=0.12 \text{ см}^3/\text{г}$, $V_{\text{мезо}}=0.19 \text{ см}^3/\text{г}$ и $V_{\text{макро}}=0.35 \text{ см}^3/\text{г}$ и суммарной концентрацией кислотных центров по данным ТПД $\text{NH}_3 \sim 572 \text{ мкмоль/г}$.

На полученном бифункциональном катализаторе изучены каталитические превращения *n*-гескадекана и дизельной фракции АНК “Башнефть” (180-360°C, 5 ppm S). Установлено, что этот катализатор позволяет получать дизельное топливо с лучшими низкотемпературными свойствами по сравнению с катализатором, полученным грануляцией цеолита со связующими веществами.

Литература

1. Primo A., Garcia H. Zeolites as catalysts in oil refining. Chem. Soc. Rev. 43, 7548-7561 (2014).
2. Vermeiren W., Gilson J.P. Impact of zeolites on the petroleum and petrochemical industry. Top. Catal. 52, 1131-1161 (2009).
3. Database of Zeolite Structure. Available online: <http://www.iza-structure.org/databases> (accessed on 20 January 2024).
4. Jia C., Zong L., Wen Y., Xu H., Wei H., Wang X. Synthesis and scale-up of ZSM-5 aggregates with hierarchical structure. Res Chem Intermed. 45, 3913-3927 (2019).
5. Jia Y., Shi Q., Wang J., Ding C., Zhang K. Synthesis, characterization, and catalytic application of hierarchical nano-ZSM-5 zeolite. RSC advances, 10(50), 29618-29626 (2020).
6. Zhang C., Fan K., Ma G., Lei C., Xu W., Jiang J., Sun B., Zhang H., Zhu Y., Wen S. Efficient Synthesis of Mesoporous Nano ZSM-5 Zeolite Crystals without a Mesoscale Template. Crystals. 11, 1247 p. (2021).
7. Wang P., Xiao X., Pan Y., Zhao Z., Jiang G., Zhang Z., Meng F., Li Y., Fan X., Kong L., et al. Facile Synthesis of Nanosheet-Stacked Hierarchical ZSM-5 Zeolite for Efficient Catalytic Cracking of *n*-Octane to Produce Light Olefins. Catalysts, 12, 351 p. (2022).

8. Tajuddin N.A., Kamal N.A., Rhymme N.A.Q., Sani S.F. Hierarchical Zeolite Zsm-5 Framework On The Synthesis And Characterization For Catalytic Cracking Of Fluid: A Mini Review. *Malaysian Journal Of Analytical Sciences*, 27(3), 499-509(2023).
9. Hao J., Zhou J., Wang Y., Li L., Sheng Z., Teng J., Xie Z. Pore mouth catalysis promoting n-hexane hydroisomerization over a Pt/ZSM-5 bifunctional catalyst. *Chem Catalysis*, 4(8) (2024).
10. Yang N., Fu T., Cao C. et al. Constructing hierarchical ZSM-5 coated with small ZSM-5 crystals via oriented-attachment and in situ assembly for methanol-to-aromatics reaction. *Front. Chem. Sci. Eng.* 18, 76 (2024).
11. He X., Tian Y., Qiao C., Liu G. Acid-driven architecture of hierarchical porous ZSM-5 with high acidic quantity and its catalytic cracking performance. *Chemical Engineering Journal*, 473, 145334 p. (2023).

© Ишкильдина А.Х., Аглямова Д. Р., Травкина О.С., 2025

УДК 544.72

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ТРИТЕРПЕНОВЫХ И СТЕРОИДНЫХ САПОНИНОВ

Ищенко У.С., Мироненко Н.В.

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

Классы тритерпеновых и стероидных гликозидов относятся к природным соединениям, широкий спектр биологической активности, а также физико-химические свойства которых значительно расширяют их области применения в фармацевтической, пищевой и косметической промышленности. Известно [1, 2], что водные растворы сапонинов из-за амфифильной структуры их молекул обладают поверхностной активностью, т.е. способны снижать межфазное натяжение. Поэтому сапонины находят широкое применение в качестве эмульгаторов, пенообразователей и солюбилизаторов. Целью работы являлся сравнительный анализ поверхностной активности стероидных и тритерпеновых сапонинов в водных растворах.

Объектами исследования являлись: суммарная фракция стероидных сапонинов, выделенных из лекарственного растения *Tribulus Terrestris*, выделенных из *Sapindus Mukorossi* и *Quillaia Saponaria Molina*. Поверхностное натяжение измеряли методом подсчета капель (сталагмометрический метод). Для определения поверхностного напряжения использовали уравнение:

$$\sigma = \sigma_0 \frac{\rho}{\rho_0} \frac{n_0}{n}, \quad (1)$$

где σ_0 – известное поверхностное натяжение растворителя, ρ_0, ρ – плотность растворителя и раствора, n_0, n – число капель растворителя и раствора.

На рисунках 1-2 представлены зависимости поверхностного натяжения от концентрации водных растворов сапонинов *Tribulus Terrestris*, *Sapindus Mukorossi* и *Quillaja*.

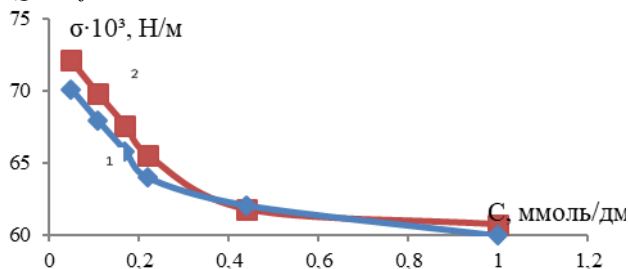


Рис. 1. Кривая зависимости поверхностного натяжения от концентрации водного раствора 1 – сапонины *Tribulus Terrestris* и 2 – сапонины *Sapindus Mukorossi* на поверхности раздела фаз воздух-раствор

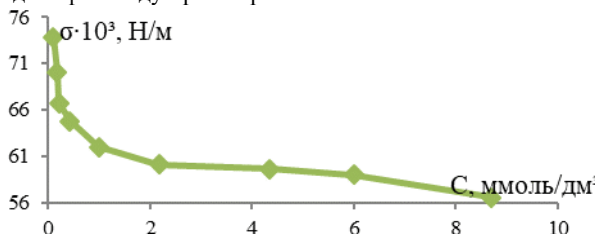


Рис. 2. Кривая зависимости поверхностного натяжения от концентрации водного раствора сапонины *Quillaja* на поверхности раздела фаз воздух-раствор.

Как видно из рис. 1 и 2, точка пересечения этих прямых является концентрацией начала мицеллообразования в растворе. Значения ККМ для сапонинов *Quillaja Saponaria* – 0,4-0,7 ммоль/дм³, *Sapindus Mukorossi* – 0,2-0,4 ммоль/дм³, *Tribulus Terrestris* – 0,2-0,4 ммоль/дм³.

Когда адсорбция достигает предельного значения, адсорбционный слой приобретает структуру сплошного насыщенного мономолекулярного слоя с максимально плотной упаковкой молекул, ориентированных перпендикулярно поверхности раствора [3]. Зная величину A_{∞} были рассчитаны параметры адсорбционного слоя – площадь, приходящаяся на 1 молекулу в насыщенном адсорбционном монослое S_m и толщина адсорбционного слоя h .

Таблица 1

Параметры адсорбционного слоя сапонины *Tribulus Terrestris*, *Sapindus Mukorossi*, *Quillaia Molina*
на поверхности раздела фаз – водный раствор сапонины/воздух

Сапонин	S_m , нм² (расч.)	h , нм (расч./теор.*)
<i>Tribulus Terrestris</i>	1,15 нм²	1,48 / 0,97

<i>Sapindus mukorossi</i>	0,97 нм ²	1,84 / 1,2
<i>Quillaia Molina</i>	1,29 нм ²	2,97 / 2,3

*Длина углеводных остатков рассчитана с помощью программы Cambridge Soft Chem Office Ultra 2010 v12.0 3D-моделирования химических формул

Толщины адсорбционных слоев соответствует длинам углеводных остатков молекул сапонинов, т.е. их гидрофильная часть погружена в воду (табл.1).

Литература

1. Муртазина Л.И. Самоассоциация в водных растворах некоторых биологически важных и поверхностно-активных веществ в области низких концентраций: дис. на соискание ученой степе канд. хим. наук. – Казань, 2009. – 184 с.
2. Холмберг К., Иёнссон Б., Кронберг Б. Поверхностно-активные вещества и полимеры в водных и растворах. – М.: БИНОМ Лаборатория знаний, 2007. – 528 с.
3. Mitra S., Dungan S. R. Cholesterol Solubilization in Aqueous Micellar Solutions of Quillaja Saponin, Bile Salts, or Nonionic Surfactants. J. Agric. Food Chem, 2001. – Vol. 49, № 9. P. 384-394.

© Ищенко У.С., Мироненко Н.В., 2025

УДК 543.544

ВЛИЯНИЕ ТОПОЛОГИИ СОРБАТОВ НА УДЕРЖИВАНИЕ В ВЫСОКОЭФФЕКТИВНОЙ ЖИДКОСТНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Капитонов А.В., Колосова Е.А., Курбатова С.В.

*Самарский национальный исследовательский университет
им. академика С.П. Королева, Самара, Россия*

Одной из актуальных задач современной химической науки является создание и моделирование новых веществ и материалов с заданными свойствами, основанное на взаимосвязи «структура-свойство». В качестве перспективного метода для исследования подобных соотношений, используется высокоэффективная жидкостная хроматография (ВЭЖХ), поскольку она позволяет моделировать такие зависимости и прогнозировать свойства соединений, включая их биологическую активность. Для количественного описания структуры молекул, а также для предсказания физико-химических и биологических свойств, используют различные дескрипторы, среди которых достаточно интересными являются топологические индексы (ТИ) [1]. ТИ, вычисляемые на основе молекулярных графов, отражают такие характеристики молекул, как степень разветвления, плотность связей и пространственная организация атомов. Установление взаимосвязи между значениями ТИ и такими параметрами, как объем, поляризуемость, дипольный момент молекул или величинами

удерживания в хроматографии позволяет прогнозировать многие свойства новых, впервые синтезируемых соединений.

В нашей работе в качестве для установления подобных корреляций были выбраны производные хинолина, являющиеся удобными моделями исследования взаимосвязи строение – свойство с широким спектром фармакологической активности. Были исследованы корреляции между строением, физико-химическими и топологическими характеристиками производных хинолина с заместителями различной химической природы в положениях 2 и 6 хинолинового ядра, а также хроматографическое удерживание этих веществ в условиях обращенно-фазовой ВЭЖХ. В качестве сорбентов были использованы октадецилсиликагель и сверхсшитый полистирол. Элюирование проводили в изократическом режиме. В качестве подвижной фазы использовали смесь ацетонитрил - вода с объемным содержанием ацетонитрила от 50% до 80%. Вычисление основных физико-химических дескрипторов проводили с использованием программы HyperChem 8.0 методом PM3 при полной оптимизации геометрии молекул.

Определяющим фактором изменения физико-химических параметров веществ, как известно, являются химическая природа заместителей и функциональных групп и их взаимное расположение в органических соединениях сложной структуры. Так, например, введение в молекулу метила или замена фторфенила на метоксифенил существенно изменяют липофильность и дипольный момент производных хинолина. Замена хлорфенила на тиофенильный или пиридинильный радикалы, существенно изменяет липофильность и дипольный момент при сопоставимых размерных параметрах молекул соответствующих веществ.

Значения топологических индексов, так же, как и физико-химические параметры, определяются природой и положением функциональных групп в основном гетероциклическом фрагменте. При этом топологические индексы, характеризующие строение молекул, уменьшаются с увеличением их порядка, что соответствует общим представлениям о влиянии удаленных атомов в молекулярном графе. Высокие коэффициенты аппроксимации полученных нами линейных корреляций (до 0.965) между топологическими индексами и размерными характеристиками молекул свидетельствуют о возможности прогнозирования поведения соединений на основе их структурных дескрипторов. Было установлено, что в целом, наблюдается симбатность в изменении индексов связанности и размерных параметров производных хинолина.

На основании полученных корреляционных зависимостей, кроме того, было установлено, что влияние топологии сказывается при реализации сорбционного механизма удерживания как на октадецилсиликагеле, так и на сверхсшитом полистироле. При этом топологический фактор оказывает

наиболее существенное влияние на удерживание производных хинолина на обоих исследованных сорбентах при минимальном содержании органического компонента в элюенте. Однако, влияние топологии молекул на удерживание может быть нивелировано изменением ориентации сорбата по отношению к поверхности сорбента под влиянием полярного элюента [2].

Таким образом, проведенное исследование иллюстрирует тот факт, что структурные модификации молекул, выраженные через топологические индексы, тесно связаны с их физико-химическими свойствами и поведением в хроматографических системах, а полученные результаты демонстрируют потенциал применения топологического анализа в хроматографии и материаловедении в целом, позволяя более точно прогнозировать и оптимизировать функциональные характеристики сложных органических соединений.

Литература

1. Химические приложения топологии и теории графов / под ред. Р. Кинга. Москва: Мир. 1987. 568 с.
2. Nekrasova N.A., Kurbatova S.V. // Journal of Chromatography A. 2017. Т. 1492. С. 55-60.

© Капитонов А.В., Колосова Е.А., Курбатова С.В., 2025

УДК 544.723.21

ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ УДАЛЕНИЯ ХЛОРАМФЕНИКОЛА ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЕТЕРОГЕННОГО ФЕНТОН ПРОЦЕССА НА МОДИФИЦИРОВАННОМ УГЛЕРОДНОМ ВОЛОКНЕ

Кармакова М.А., Артемьянов А.П.

Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия

Левомецетин (хлормецетин, хлорамфеникол) - эффективный синтетический антибиотик широкого спектра действия, запрещен к использованию в животноводстве и ветеринарии для лечения скота и птицы, мясо, молоко и яйца которых предназначены для питания людей. Это связано с токсичностью хлорамфеникола, проявляющейся в аллергических реакциях, поражении кроветворных органов и др. В странах Европы, Японии, США содержание хлорамфеникола регламентируется на уровне минимальной чувствительности метода, которая составляет 0,3 мкг/кг. Однако благодаря относительной дешевизне этого препарата и высокой антибактериальной активности, хлорамфеникол достаточно широко используется в некоторых странах [1]. Для удаления хлорамфеникола из воды перспективным является комбинирование различных методов, таких как адсорбция и окислительная деструкция в различных вариантах процесса Фентона и фотокатализа [2-4].

Модифицированное волокно, которое использовалось в данной работе, представляло собой композиционный материал, состоящий из активированного углеродного волокна (АУВ) марки Актилен-Б и нанесенной на волокно модифицирующей фазы в виде продуктов термического разложения солей железа (III) органических кислот.

Содержание хлорамфеникола определялось по оптической плотности на спектрофотометре Shimadzu UV-1800 при длине волны 278 нм. Изотерма адсорбции хлорамфеникола на модифицированном углеродном волокне в водном растворе определена при pH 7 и по коэффициенту аппроксимации в линейном виде была отнесена к изотерме Ленгмюра (предельная адсорбция Γ_{∞} 413 мг/г), свободная энергия адсорбции $\Delta G_{(cp)} - 10,9$ кДж/моль).

Проведение сорбционного поглощения хлорамфеникола на модифицированном углеродном волокне в присутствии пероксида водорода при pH 2 инициирует процесс Фентона и дополнительно уменьшает содержание хлорамфеникола в растворе. Данную систему можно отнести к гетерогенному варианту Фентон процесса. Смесь железосодержащих продуктов на поверхности модифицированного волокна генерирует в кислой среде ионы Fe^{2+} и в присутствии пероксида водорода на границе раздела фаз катализатор/раствор создается система Фентона, приводящая к деструкции органического загрязнителя. Сравнение спектров поглощения хлорамфеникола с реактивом Фентона в различные промежутки времени свидетельствует о определенной устойчивости к окислительной деструкции.

Исследование показало, что в результате действия модифицированного сорбента происходит заметное уменьшение концентрации хлорамфеникола в водных растворах. Расчет степени очистки воды от хлорамфеникола дает значения 77% (адсорбция) и 89%, (адсорбция + Фентон процесс).

Таким образом, эффективность извлечения может быть повышена путем применения модифицированного углеродного волокна и созданием системы, в которой инициируется гетерогенный Фентон процесс деструкции хлорамфеникола.

Литература

- 1.Эмануэль Н.М., Денисов Е.Т., Майзус З.К. Цепные реакции окисления углеводов в жидкой фазе. – М.: Наука, 1965. – 375 с.
- 2.Sapkota A.R., Kucharski M., Burke J., McKenzie S., Walker P., Lawrence R. Aquaculture practices and potential human health risks: current knowledge and future priorities. // Environ. Int. 34 (2008) 1215-1226.
- 3.Lach J., Ociepa-Kubicka A. The removal of chloramphenicol from water through adsorption on activated carbon // E3S Web of Conferences 19, 02008 (2017)
- 4.Гальченко Д.С., Смирнова М.Г., Соколова Л.И. Использование сорбента на основе природного алумосиликата (вермикулита) для очистки сточных вод от антибиотиков. // XXI век. Техносферная безопасность. 2021;6(4):387-394.
- 5.Meng, X.; Liu, Z.;Wang, S., Kong, F. Synergistic Degradation of Chloramphenicol by an Ultrasound-Enhanced Fenton-like Sponge Iron System. // Water 2021, 13, 3561.

© Кармакова М.А., Артемьянов А.П., 2025

Липофильность является важным свойством для потенциально биологически активных соединений, в частности – 6-метилурацила, обладающего широким спектром биологической активности [1] и его метилпроизводных. Для некоторых производных урацила, в том числе 6-метилурацила, возникает проблема с их биодоступностью, так как они имеют малую растворимость в воде и низкую липофильность. Поэтому целью данной работы было определение влияния метилирования по N¹-Н, N³-Н и C⁵-связи 6-метилурацила на значения липофильности. Методом ВЭЖХ по стандартной методике [2] были получены значения липофильности 6-метилурацила и его метилпроизводных.

Таблица 1

Экспериментальные значения липофильности
исследуемых соединений

Соединение	LogP
6-метилурацил	-0.77
3,6-диметилурацил	-0.45 ± 0.01
5,6-диметилурацил	-0.46 ± 0.01
1,3,6-триметилурацил	0.71*10 ⁻² ± 0.07*10 ⁻²

Согласно полученным данным, метилирование по атомам азота и по атому углерода в пятом положении урацильного кольца приводит к увеличению значения липофильности.

Таким образом, метилирование 6-метилурацила повышает его биодоступность.

Литература

1. Реестр Лекарственных Средств [Электронный ресурс]. – Режим доступа: <https://www.rlsnet.ru/drugs/metiluracil-4570>.
2. Giaginis C., Tsantili-Kakoulidou A. Current State of the Art in HPLC Methodology for Lipophilicity Assessment of Basic Drugs // Journal of Liquid Chromatography & Related Technologies. 2008. V. 31. P. 79-96.

© Кириллова Н.Д., Файзрахманов И.С., Петрова С.Ф., Иванов С.П.,
Нугуманов Т.Р., 2025

АНТИОКИСЛИТЕЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ СПИРТОВЫХ
ЭКСТРАКТОВ ПОЧЕК СМОРОДИНЫ

Кирилова А.Н., Забалуева С.С.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Реакции жидкофазного окисления органических соединений, окислительной деструкции полимерных изделий, процессы порчи продуктов питания и лекарственных препаратов протекают по радикально-цепному механизму. Для снижения скорости нежелательных процессов широко применяются ингибиторы окисления. Однако синтетические ингибиторы обладают кумулятивным эффектом, накапливаются в живых организмах. Препараты из растительного сырья лишены данного недостатка.

Плоды смородины содержат витамины С, А, флавоноиды, которые являются акцепторами свободных радикалов. Актуальным является исследование влияния добавок экстрактивных веществ из почек смородины разных сортов Башкирской селекции на скорость окисления модельного субстрата. Модельной системой выбрали этанол, для которого известны значения элементарных констант скоростей реакций продолжения и обрыва цепей. За процессом окисления этанола следили по поглощению кислорода. Скорость поглощения кислорода измеряли на высокочувствительной дифференциальной манометрической установке. Испытаны спиртовые экстракты из почек семи сортов смородины. Почки смородины были приготовлены в весенний и осенний периоды их вегетации.

Стандартным опытом является реакция окисления этанола в присутствии классического инициатора – азоизобутиронитрила. Реакция окисления этанола протекает в кинетическом режиме, частный порядок реакции по окислителю нулевой. В дальнейшем в систему добавляли спиртовые экстракты из почек смородины, что приводит к значительному снижению скорости окисления этанола. Данный результат доказывает эффект ингибирования исследуемой реакции добавками экстрактивных веществ из почек смородины. Установлена связь между ингибирующими свойствами спиртовых экстрактов из почек смородины весеннего и осеннего сбора – экстракты весеннего сбора тормозят реакцию окисления этанола в 1,5- 2,5 раза больше, чем экстракты из осеннего сбора. По-видимому, весной смородина в почках накапливает больше биологически активных веществ, чем осенью. Из семи сортов смородины, исследованных в данной работе, наибольшей ингибирующей активностью обладает спиртовой экстракт сорта Валовая, снижение скорости процесса окисления составляет 52,9%. $\ln k_7 = (15.2 \pm 3.4)$

Литература

1. Ишмуратова М.М., Кабулова Ф.Д., Гулбоев Д.Т., Ишбирдин А.Р., Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н. Популяционные и ресурсные характеристики *Hipporhae rhamnoides* L. в Зарафшанском национальном природном парке (Республика Узбекистан). Известия Уфимского научного центра РАН. 2024. № 4. с. 18–24
2. Garifullina G.G., Nasretdinova R.N., Gerchikov A.Ya., Shaymordanova G.M., Petrova A.V., Mustafin A.G. Antioxidant efficiency of triterpenoids in radical chain oxidation of organic compounds. Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. 2024. T. 137. № 1. С. 39-51.
3. Юрьева А.О., Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н. Плоды облепихи в качестве ингибиторов окисления этилбензола. Материалы XI Международной молодежной научно-практической конференции «Актуальные вопросы современного материаловедения». Уфа, 2024. С. 227-228.

© Кирилова А.Н., Забалуева С.С., 2025

УДК 546.654:547.581

РАЗРАБОТКА БИОСОВМЕСТИМЫХ СИСТЕМ ДОСТАВКИ 1-ОКТИЛ-4-КАРБОКСИЛ-1,2,3-ТРИАЗОЛА, ОБЛАДАЮЩЕГО АНТИРАКОВОЙ АКТИВНОСТЬЮ

Клименко Д.Д.¹, Волошина А.Д.², Семенов В.Э.^{1, 2}, Селиванова Н.М.¹

¹*Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань Россия*

²*Институт органической и физической химии им. А.Е. Арбузова, Казань, Россия*

В последние годы в медицине препараты с триазольными каркасами применяются благодаря высоким терапевтическим эффектам. Одним из способов повышения биодоступности и солюбилизации низкорастворимых триазолов является использование подхода инкорпорирования биоактивных соединений в структуру лиотропной жидкокристаллической фазы или гидрогелей [1,2]. В данном исследовании проводилось изучение биологической активности синтезированного 1-октил-4-карбоксил-1,2,3-триазола (ТР) (рис. 1) и разработаны подходы инкорпорирования в лиомезофазы на основе биосовместимых полисахаридов: хитозана и каппа-каррагинана.

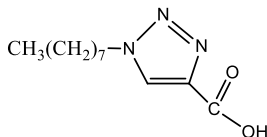


Рис. 1. Структура 1-октил-4-карбоксил-1,2,3-триазола

Исследование цитотоксичности проводилось на опухолевых клеточных линиях М-HeLa (эпителиоидная карцинома шейки матки); NuTu-80 –

аденокарцинома двенадцатиперстной кишки человека и клеток печени человека. Установлено, что ТР проявляет антираковую активность $IC_{50} = 63.6 \pm 4.5$ мкМ для М-HeLa 54.6 ± 4.3 мкМ для HuTu-80, что сопоставимо с IC_{50} противоракового лекарства – фторурацила.

Построены фазовые диаграммы состояния тройных систем Хитозан/Н₂О/ДМСО и κ-каррагинан/Н₂О/ДМСО, найдены области формирования ЖК фаз и гидрогелей. Проведено успешное инкорпорирование ТР в системы в количестве 1% мас и 3% мас.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 24-23-00187, <https://rscf.ru/project/24-23-00187/>

Литература

1. N. Selivanova, M. Shulaeva, A. Voloshina, V. Semenov. J. of Molecular Liquids. 2024, 415, 126352
2. Selivanova N., Shulaeva M., Semenov V., Galyametdinov Y. Spectrochimica Acta – Part A: Molecular and Biomolecular Spectroscopy. 2024, 305, 1235.

© Клименко Д.Д., Волошина А.Д., Семенов В.Э., Селиванова Н.М., 2025

УДК 544.016.2

ВЛИЯНИЕ ВИДИМОГО ДИАПАЗОНА СВЕТА И КОНЦЕНТРАЦИИ ОСАДИТЕЛЯ НА ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ ОКСИГИДРОКСИДА ЦИРКОНИЯ.

Криволапова А.Д, Куваева А.О.

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Соединения циркония находят широкое применение в различных областях: в производстве керамических материалов, в защитных покрытиях для улучшения износостойкости и коррозионной стойкости материалов, в производстве кислородпроводящих мембран, газовых датчиков, оптоэлектроники, катализаторов [1]. Данный неполный список демонстрирует многообразие применения циркония и его соединений, обусловленное уникальными свойствам материала. Поэтому совершенствование характеристик ZrO₂ является актуальной задачей и приобретает большое значение для улучшения характеристик востребованного материала.

Методика золь-гель синтеза оксигидроксида циркония с концентрациями осадителя 0,50 М, 1,00 М и 2,50 М была описана ранее [2], там же приведен рентгенофазовый анализ образцов. В данной работе выполнены электронно-микроскопические исследования на просвечивающем электронном микроскопе высокого разрешения (ПЭМ ВР) Jeol JEM-2100 для анализа влияния света и концентрации осадителя на морфологию полученного оксида циркония. Образцы предварительно прокалили до 1000⁰С и диспергировали в этаноле при помощи ультразвука в течение часа.

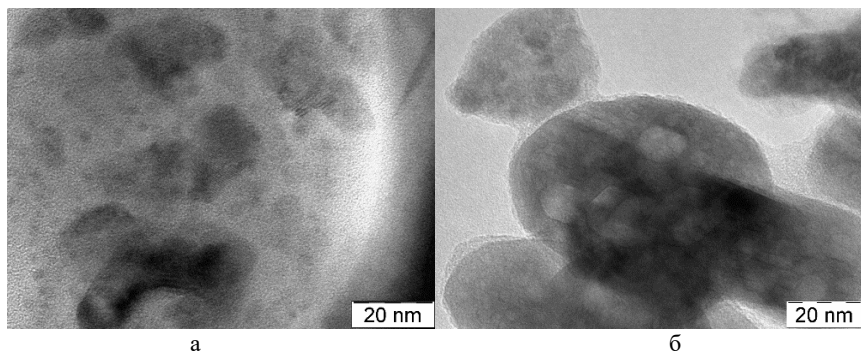


Рис. 1. ПЭМ-изображения оксида циркония, синтезированного при естественном освещении (а) и в темноте (б) при концентрации осадителя 0,50 М

Согласно данным ПЭМ, повышенные концентрации осадителя не демонстрируют значительных морфологических различий, в отличие от образцов, полученных осаждением 0,50 М раствором водного аммиака (рис.1). В свою очередь, отсутствие освещения приводит к образованию кристаллитов с округлыми краями и размерами в диапазоне от 5 до 22 нм (рис. 1б). В образцах, синтезированных при освещении кристаллические области формируются без выраженных морфологических признаков (рис. 1а), но при этом дисперсия размеров снижается.

Таким образом, условия освещения и концентрация осадителя оказывают влияние на структурообразование оксигидроксида циркония, дисперсию и форму характеристик структурных элементов конечного продукта.

Литература

1. Константинова Т.Е., Даниленко И.А., Токий В.В., Глазунова В.А. Получение нанодispersных порошков диоксида циркония от новации к инновации. – М.: Наука и инновации, 2005. – С. 78-87
2. Криволапова А.Д, Куваева А.О. Влияние концентрации и освещения синтеза на процессы структурообразования оксигидроксида циркония / Сб. тез. IX Всероссийской молодежной конференции «Достижения молодых ученых: химические науки», Уфа, 23 – 24 мая 2024 г. С. 205.

© Криволапова А.Д, Куваева А.О., 2025

СИНТЕЗ ГРАНУЛИРОВАННОГО ЦЕОЛИТА ZSM-23 ВЫСОКОЙ СТЕПЕНИ КРИСТАЛЛИЧНОСТИ С МИКРО-МЕЗО-МАКРОПОРИСТОЙ СТРУКТУРОЙ

Куватова Р.З.¹, Травкина О.С.^{1,2}, Гимаев Т.А.², Умуракова К.Е.²

¹ *Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия*

² *Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россия*

Наиболее перспективной технологией получения низкозастывающих дизельных топлив, биотоплив и базовых синтетических моторных масел III-группы является каталитическая изодепарафинизация [1]. Процесс изодепарафинизации основан на селективной гидроизомеризации высших *n*-парафинов C₁₆₊, содержащихся в топливе или маслах, в изопарафины на бифункциональных катализаторах, в которых активная фаза (NiS, CoMoS, Pd, Pt) нанесена на гранулированные со связующим материалом кислотные молекулярные сита [2]. Среди молекулярных сит наиболее селективными в указанном процессе являются силикоалюмофосфаты SAPO-11 и алюмосиликаты ZSM-23 [3,4]. В настоящее время в промышленных процессах гидроизомеризации *n*-парафинов в основном используют каталитические системы на основе цеолита ZSM-23, которые из-за более сильных Бренstedовских кислотных центров, чем в молекулярных ситах SAPO-11, позволяют осуществлять каталитический процесс при более низких температурах.

Целью данной работы являлась разработка способа синтеза гранулированного цеолита ZSM-23 высокой степени кристалличности с иерархической пористой структурой.

В результате работы была изучена кристаллизация гранул, состоящих из 60 %мас. порошкообразного ZSM-23 и 40 %мас. связующего материала, представляющего собой синтетический аморфный алюмосиликат. На основе полученных данных разработан способ приготовления гранулированного (*d*=1.6мм, *l*= 5-10 мм) молекулярного сита ZSM-23 высокой фазовой чистоты и степени кристалличности более 92 % с иерархической пористой структурой. Он позволяет получить материал с удельной поверхностью 250 м²/г, объемом микропор 0.08 см³/г, объемом мезопор 0.11 см³/г и объемом макропор 0.55 см³/г.

Показано, что такие гранулы по механической прочности превосходят гранулированные цеолитсодержащие материалы, полученные грануляцией кристаллов цеолита ZSM-23 и γ-Al₂O₃.

Литература

1.Deldari, H. Suitable catalysts for hydroisomerization of long-chain normal paraffins. Appl. Catal. A Gen. 2005, 293, 1-10.

2. Akhmedov V.M., Al-Khowaiter S.H. Recent advances and future aspects in the selective isomerization of high n-alkanes // *Catalysis Reviews*. 2007. V. 49. № 1. P. 33-139.
3. Wang W., Wu W., Liu C.-J. Bifunctional catalysts for the hydroisomerization of n-alkanes: the effects of metal–acid balance and textural structure // *Catalysis Science & Technology*. 2019. V. 9. № 16. P. 4162-4187.
4. Hartmann M., Elangovan S.P. Chapter 4 – Catalysis with microporous aluminophosphates and silicoaluminophosphates containing transition metals // *Advances in Nanoporous Materials*. 2010. V. 1. № 1. P. 237-312.

© Куватова Р.З., Травкина О.С., Гимаев Т.А., Умуракова К.Е., 2025

УДК 544.726.2

СОРБЦИЯ ИОНОВ КОБАЛЬТА НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫМИ АЛЮМОСИЛИКАТАМИ КАЛИЯ И НАТРИЯ

Леликович А.К.^{1,2}, Нехлюдова Е.А.^{1,2}, Ярусова С.Б.^{1,2}, Гордиенко П.С.¹, Паротькина Ю.А.¹

¹*Институт химии ДВО РАН, Владивосток, Россия*

²*Владивостокский государственный университет, Владивосток, Россия*

В научных исследованиях, посвященных разработке эффективных сорбентов для очистки водных растворов от ионов Co^{2+} , синтетические и природные цеолиты, а также материалы на их основе, указаны как перспективный класс сорбентов кобальта. Сорбционная емкость цеолитов и цеолитсодержащих материалов варьирует от 0.72 до 247.5 мг/г [1].

В данном исследовании получены рентгеноаморфные образцы алюмосиликатов K- и Na- форм с соотношением Si/Al, равным 1, 3, 5, с удельной поверхностью 200–425 м²/г, плотностью 2–2.17 г/см³. Проведено их последующее химическое модифицирование раствором хлорида кальция CaCl_2 . Изучены сорбционные свойства модифицированных алюмосиликатов по отношению к ионам Co^{2+} в статических условиях при соотношении твердой и жидкой фаз, равном 1:1000, температуре 20°C из водных растворов хлорида кобальта $\text{CoCl}_2 \cdot 6\text{H}_2\text{O}$ без солевого фона.

Установлено, что сорбционная емкость химически модифицированных алюмосиликатов натрия примерно в 1.5 раза выше по сравнению с калиевой формой. Значения предельной сорбционной емкости модифицированных алюмосиликатов натрия варьируют от 41.3 до 48.6, калия – от 22.4 до 28.3 мг/г. Наибольшая степень извлечения ионов Co^{2+} (более 99%) наблюдается при соотношении Т:Ж, равном 1:40. С увеличением соотношения Т:Ж наблюдается уменьшение значений степени извлечения кобальта, однако для алюмосиликатов натрия степень извлечения превышает 90% при соотношении Т:Ж, равном 1:400. Продолжаются исследования по кинетике сорбции кобальта и по влиянию солевого фона на сорбционные свойства исследуемых соединений.

Исследование выполнено в рамках государственного задания Института химии ДВО РАН (FWFN(0205)-2025-0002, тема 2, раздел 3).

Литература

1. Islama M.A., Morton D.W., Johnson B.B., Pramanik B.K., Mainali B., Angove M.J. Opportunities and constraints of using the innovative adsorbents for the removal of cobalt(II) from wastewater: A review // *Environmental Nanotechnology, Monitoring & Management*. – 2018. – Vol.10. – P. 435–456. – DOI: 10.1016/j.enmm.2018.10.003

© Леликович А.К., Нехлюдова Е.А., Ярусова С.Б.,
Гордиенко П.С., Паротькина Ю.А., 2025

УДК 544.165

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУР СТЕКЛОВАНИЯ ПОЛИМЕРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФРАГМЕНТНЫХ ДЕСКРИПТОРОВ И МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Лифанов А.Д.^{1, 2}, Фатыхова А.А.², Лифанова Е.Г.¹

¹*Казанский национальный исследовательский технологический
университет, Казань, Россия*

²*Казанский (Приволжский) Федеральный университет, Казань, Россия*

Полимеры являются важнейшим классом функциональных материалов для различных отраслей народного хозяйства и промышленности [1, 2]. Области применения полимерных материалов обусловлены рядом свойств. Одним из них является температура стеклования полимеров, обуславливающий области их практического применения и переработки.

Для оценки температуры стеклования полимеров используют эмпирические аддитивные методы, например, метод А.А. Аскадского [3]. Неостатком данного метода является ограниченный набор инкрементов, для которых известны соответствующие групповые вклады [4].

В последние годы стремительно развиваются подходы, основанные на моделях «структура-свойство». Данные подходы основаны на установлении зависимости свойств полимеров в зависимости от их структуры. В недавней работе, авторы предложили гибридный подход к построению методов «структура-свойство» [4]. По результатам расчетов наилучшие результаты продемонстрировала модель случайного леса. Данный подход обладает существенным недостатком – использование ограниченного набора инкрементов не позволяет с высокой точностью прогнозировать температуры стеклования гипотетических полимеров.

Наиболее перспективным является традиционный подход, основанный на обучении модели с использованием методов машинного обучения [5]. Представление химической структуры полимеров осуществлялось с помощью системы SMILES (Simplified Molecular Input Line Entry System) [6, 7]. На основе SMILES генерировались численные характеристики, описывающие

структуру полимера (дескрипторы). Дескрипторы являются входными данными для обучения модели, а свойства полимера определяются в качестве выходных данных.

Исходный набор данных для прогнозирования температуры стеклования составлял 7174 данных о температуре стеклования для гомополимеров и 4426 данных для сополимеров. Всего набор данных включал информацию о 11600 полимеров.

Оценка качества моделей осуществлялась с помощью коэффициента детерминации (R^2) и среднеквадратичной ошибки (RMSE).

Мы построили регрессионную модель (алгоритм случайного леса (количество деревьев 500, остальные параметры по умолчанию), которая характеризовалась хорошей прогностической способностью ($R^2=0,98$, RMSE = 15,83 K) обучающая выборка) и ($R^2=0,86$, RMSE = 41,66 K) (тестовая выборка).

Полученные результаты свидетельствуют о необходимости расширения предложенного подхода на блочные и градиентные сополимеры [8]. Помимо этого, следует рассмотреть другие методы машинного обучения [9], для повышения прогностических способности моделей [10].

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. Лифанов А.Д., Полиуретан-стирольные композиты, модифицированные слоистыми силикатами / А.Д. Лифанов // Каучук и резина. – 2012. – № 3. – С. 41-42.
3. Askadskii, A. A. Computational materials science of polymers / A. A. Askadskii. – Cambridge: Cambridge International Science Publishing, 2003. – 711 p.
4. Шадрина Г.Р. Гибридный подход при прогнозировании температур стеклования органических гомополимеров: сочетание модели QSPR и метода инкрементов / Г.Р. Шадрина, В.И. Анисимова, И.С. Родионов и др. // Вестник технологического университета. – 2025. – №3 (28). – С. 68-74
5. Kuenneth C. Copolymer informatics with multitask deepneuralnetworks / C. Kuenneth, W. Schertzer, R. Ramprasad, R. (2021). *Macromolecules*. – 2021. – V. 54. Article 59575961.
6. D. Weininger, *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 28, 1, 31-36 (1988).
7. Weininger D., Weininger A., Weininger J.L.. *Journal of Chemical Information and Computer Sciences*, 29, 2, 97-101 (1989).
8. Kamasa P. Experimental aspects of temperaturemodulated dilatometry of polymers / P. Kamasa, P. Myśliński, M. Pyda // *Thermochimica Acta*. – 2006. – V. 442. – № 1-2. – P. 48-51
9. 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.

10. Лифанов А.Д., Моделирование адгезионных соединений полимеров в контакте с металлами / А.Д. Лифанов, А.А. Фатыхова, К.Ю. Никитина // Вестник Технологического университета. – 2025. – Т. 28. – № 1. – С. 142-146.

© Лифанов А.Д., Фатыхова А.А., Лифанова Е.Г., 2025

УДК 541.14:547.551.2

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕДЬ-КАТАЛИЗИРУЕМОЙ РЕАКЦИИ ПЕРВИЧНЫХ СПИРТОВ С *o*-ТОЛУОНИТРИЛОМ

Лутфуллина А.Р.¹, Рамазанов И.Р.^{1,2}, Байгузина А.Р.¹

¹Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Сложные эфиры востребованы в качестве лекарств, полимерных материалов, в косметической промышленности и парфюмерии. Поэтому разработка новых методов их синтеза является важной и актуальной задачей и вызывает неизменный интерес химиков. В последнее время было разработано много новых синтетических процедур получения разнообразных сложных эфиров, среди которых следует отметить реакцию спиртов с кислотными производными, окислительное сочетание с альдегидами, реакции с использованием ацилазолиевых промежуточных соединений и ферментативные методы. Мы исследовали возможность получения сложных эфиров с помощью модифицированной реакции Пиннера.

В нашей работе мы впервые показали, что реакция первичных спиртов с *o*-толуонитрилом под действием CuBr_2 приводит к образованию смеси сложного и простого эфиров, также амида (таблица 1). В реакцию с *o*-толуонитрилом вовлечены следующие первичные спирты: этанол, 1-пропанол, 1-бутанол, изобутанол, 1-пентанол, 1-гексанол, 1-гептанол, 1-октанол при мольном соотношении катализатора и реагентов [катализатор]:[спирт]:[R^2CN]=10:100:100.

Таблица 1

Спирт R^1OH	Нитрил R^2CN		
	<i>o</i> -толуонитрил		
	Выход, %		
	Сложный эфир R^2COOR^1	Простой эфир R^1OR^1	Амид R^1NHCOR^2
этанол	37	-	63
1-пропанол	22	-	61
1-бутанол	38	-	62

изобутанол	31	-	54
1-пентанол	36	-	64
1-гексанол	-	82	-
1-гептанол	-	60	-
1-октанол	-	32	-

Очевидно, что диалкиловый эфир образуется межмолекулярной дегидратацией спирта под действием катализатора [1, 2], а алкиловый эфир *о*-толуиловой кислоты образуется по реакции *о*-толуонитрила со спиртами через образование иминоэфиров.

Установлена закономерность, что при увеличении длины алкильной цепочки первичных спиртов затрудняется образование сложного эфира и амида. В реакциях *о*-толуонитрилом с гексанолом, гептанолом и октанолом преимущественно образуется простой эфир. Нам удалось избежать жестких условий реакции Пиннера и провести ее в более мягких условиях, применив в качестве эффективного катализатора бромид меди CuBr₂.

Литература

1. Pfaff D., Nemecek G. and Podlech J., Beilstein J. Org. Chem., 2013, 9, 1572–1577.
2. A.G. Almeida, A.C. de Meneses, P.H.N. de Araujo and D. de Oliveira, Trends Food Sci. Technol., 2017, 69, 95–105
3. Li J.J. Name Reactions, https://doi.org/10.1007/978-3-030-50865-4_123.

© Лутфуллина А.Р., Рамазанов И.Р., Байгузина А.Р., 2025

УДК: 577.152.344:616.151.55:577.151.042

МАШИННЫЙ ПОИСК ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ИНГИБИТОРОВ ФАКТОРА СВЕРТЫВАЕМОСТИ КРОВИ Ха СРЕДИ ПИРОЗОЛ-ПРОИЗВОДНЫХ (ГИДРОКСИЭТИЛСУЛЬФИМЕТИЛ)ИНДОЛ-3-ИЛ УКСУСНОЙ КИСЛОТЫ

Максимов Л.С., Хайруллина В.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В данной работе методом молекулярного докинга было проверено соответствие 5 производных 1-[(5S)-3,5-диметил-4-(сульфанилметил)-2,5-дигидро-1Н-пиразол-1-ил]-2-(2-[(2-гидроксиэтил)сульфанил]метил)-1Н-индол-3-ил)этан-1-она активному центру фактора свертываемости крови Ха. Модельный белок 1хка, был выбран из базы Protein Data Bank [1].

Для определения положения лигандов в активном центре модельного белка проводилось моделирование в программе AutoDock 4.2.6 [2]. Зондой зондирования выбран бок размером 22 Å, соответствующий положению каталитического центра белка.

Расчетные данные были проанализированы в программе adt2pdb и обработаны в программе LibreOffice 24.8.5.2:

Соединение	Ebind, kcal/mol	LE	King, μM
PirIndaS1	-7,87	-0,25	1,70
PirIndaS2	-7,72	-0,24	2,18
PirIndaS3	-9,25	-0,26	0,17
PirIndaS4	-7,58	-0,23	2,77
PirIndaS5	-7,02	-0,21	7,15

Установлено, что наибольшим сродством с активным центром обладает соединение PirIndaS3, остальные имеют умеренную аффинность. Для достоверных выводов требуется проведение биологических испытаний.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

Литература

1. <https://www.rcsb.org/>
2. <http://autodock.scripps.edu/>

© Максимов Л.С., Хайруллина В.Р., 2025

УДК: 577.151.042:632.952

ПОИСК ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ФУНГИЦИДОВ СРЕДИ РЯДА ПРОИЗВОДНЫХ ТИАЗОЛА, НАФТАЛИНА И ИНДОЛА

Максимов Л.С., Хайруллина В.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Фунгициды активно используются в сельском хозяйстве для борьбы с различными видами грибов, поражающих сельскохозяйственные культуры. Эти соединения обладают широким спектром действия и способны подавлять рост патогенных микроорганизмов, предотвращая развитие болезней на растениях. Их эффективность обусловлена способностью проникать в клеточные структуры грибов и нарушать процессы жизнедеятельности. Они проникают через клеточную мембрану гриба и связываются с определенными ферментами, такими как цитохром, блокируя транспорт электронов в митохондриях.

Методом молекулярного докинга в программе AutoDock Vina 1.2.5 проведено исследование 6 производных тиазола, нафталина и индола в качестве потенциальных фунгицидов. В качестве модельного белка выбран цитохром *Candida albicans* (код PDB: 5V5Z). В качестве центра связывания в этом белке выбрано положение гем-группы.

Расчетные данные были проанализированы в программе adt2pdb и обработаны в программе LibreOffice 24.8.5.2:

Соединение	Ebind, kcal/mol	LE	King, μM
tioz1	-4.5	-0.500	500.585
tioz2	-4.6	-0.460	422.798
naft1	-7.5	-0.500	3.156
naft2	-7.6	-0.475	2.666
ind1	-6.9	-0.531	8.694
ind2	-6.9	-0.493	8.694
Флуконазол	-8.0	-0.364	1.356

Соединения tioz1, tioz2 имеют низкую аффинность с активным центром цитохрома, соединения ind1, ind2 показали умеренную аффинность, а naft1, naft2 сравнимую с Флуконазолом. Однако для более достоверных выводов требуются биологические испытания.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

Литература

1. <https://www.rcsb.org/>
2. <http://autodock.scripps.edu/>

© Максимов Л.С., Хайруллина В.Р., 2025.

УДК 547.521

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ИЗОМЕРИЗАЦИИ БОРАЗОЛА

Медведева Д.Е., Томилин О.Б., Фомина Л.В., Родионова Е.В.

*Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева, Саранск,
Россия*

В работе построена схема термической изомеризации боразола в соответствии с методом, описанным в [1]. Были построены все возможные изоспектральные молекулярные графы боразола с различным четным числом L инверсии знака в системе базисных атомных орбиталей, образующих нижнюю связывающую молекулярную орбиталь сопряженной системы p -электронов. Данные графы представляют собой двумерные сети, которые соответствуют состояниям неплоской структуры с сохраняющейся исходной ориентацией p_z -АО и которые соответствуют экстремумам на поверхности потенциальной энергии. Определение оптимальной геометрической структуры а также электронной структуры основных и переходных состояний проводились методом DFT/B3LYP/6-31G*.

Для молекулы боразола были построены 41 изоспектральный

молекулярный граф. Показано, что эффект сопряжения в валентно-конформационных изомерах боразола уменьшается с увеличением числа узлов в нижней связывающей молекулярной орбитали сопряженной системы р-электронов, что сказывается на стабильности рассмотренных молекул. Для 6 из всех рассмотренных изомерных структур не обнаружено минимумов на поверхности потенциальной энергии (ППЭ), для остальных изомеров найденные молекулярные структуры соответствуют глобальным минимумам на ППЭ. Структуры переходных состояний также определялись на основе структур молекулярных графов. Были обнаружены 9 переходных состояний. Используя метод Гонсалеса-Шлегеля нахождения потенциальных барьеров реакций были построены схемы прямых и обратных реакций, протекающих при термической изомеризации боразола в широком интервале температур, которые имеют соответствие с экспериментальными данными.

Литература

1. Родионова Е.В., Томилин О.Б., Фомина Л.В. Моделирование возможных пространственных структур переходных состояний ароматических углеводов // ЖОрХ. 2022. Т.57, С. 135-142.

© Медведева Д.Е., Томилин О.Б., Фомина Л.В., Родионова Е.В., 2025

УДК 543.544

ОСОБЕННОСТИ УДЕРЖИВАНИЯ АРОМАТИЧЕСКИХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ОКТАДЕЦИЛСИЛИКАГЕЛЯ В ВЫСОКОЭФФЕКТИВНОЙ ЖИДКОСТНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Мокраусова А.И., Курбатова С.В.

*Самарский национальный исследовательский университет
им. академика С.П. Королева, Самара, Россия*

Различия в хроматографическом удерживании веществ в жидкостной хроматографии обусловлены, как известно, многими факторами, определяющими тип межмолекулярных взаимодействий в хроматографической колонке. При этом для установления взаимосвязи между структурой веществ и их хроматографическим удерживанием используют, как правило, корреляционные соотношения между величинами удерживания и параметрами, характеризующими молекулярную структуру сорбатов. Наиболее используемыми физико-химическими параметрами, характеризующими взаимодействия молекул сорбата с компонентами хроматографической системы в обращенно-фазовой высокоэффективной жидкостной хроматографии (ОФ ВЭЖХ) являются липофильность (коэффициент распределения в системе н-октанол - вода), объем и

поляризуемость молекул, в то время как дипольный момент определяет преимущественно специфические взаимодействия с полярным элюентом.

Целью настоящей работы явился анализ влияния строения производных ароматических гетероциклов разного строения на их хроматографическое удерживание на октадецилсиликагеле (ОДС) в условиях ОФ ВЭЖХ. В качестве объектов исследования использованы производные имидазола, бензимидазола, триазола, бензотриазола, 1,3,4-оксадиазола. Были определены значения фактора удерживания исследованных веществ из водно-ацетонитрильных растворов с различной концентрацией ацетонитрила. Расчет физико-химических параметров гетероциклов осуществлен по аддитивной схеме с помощью программы HyperChem 7 Professional.

Из полученных данных следует, что значения объема и поляризуемости сорбатов внутри одного класса соединений меняются незначительно, поскольку главный вклад в эти величины вносит основной гетероароматический фрагмент. Очевидно, что аннелирование гетероароматического фрагмента с фенилом изменяет эти параметры при переходе, например, от имидазолов к бензимидазолам и от триазолов к бензотриазолам. В целом, возрастание объема и поляризуемости приводит к увеличению значений фактора удерживания соответствующих сорбатов, однако присутствие в исследованных соединениях функциональных групп и заместителей различной химической природы вносит существенные коррективы в закономерности удерживания. Прежде всего, электронодонорные заместители увеличивают электронную плотность ароматического фрагмента молекул сорбатов, изменяя их дипольный момент. Ароматические фрагменты молекул способны к проявлению специфического межмолекулярного взаимодействия (водородной связи) с остаточными гидроксильными группами, всегда присутствующими на поверхности модифицированного силикагеля [1]. В то же время они могут оказывать различное влияние и на неспецифическое межмолекулярное взаимодействие сорбат — сорбент и сорбат — элюент, а следовательно, и на ориентацию молекул сорбата, которая, в свою очередь, определяется и стереохимией молекул, а также неплоской ориентацией молекул с конформационно подвижным алкильным заместителем. Кроме того, влияние природы заместителя на перераспределение электронной плотности в молекулах сорбатов оказывается различным в зависимости от природы основного гетероароматического фрагмента, что в конечном итоге способствует либо усилению сорбции, либо усилению взаимодействия с компонентами элюента. Следует учитывать также, что все эти факторы могут в результате повлиять и на ориентацию молекул сорбатов относительно поверхности сорбента и, соответственно, так же изменить удерживание.

Влияние всех перечисленных факторов приводит к тому, что для исследованной широкой таксономической группы гетероциклов зависимость фактора удерживания от соответствующих физико-химических параметров не является линейной, как это чаще всего наблюдается при хроматографировании в условиях ВЭЖХ [2]. Очевидно, что при анализе хроматографического поведения сложных многофункциональных органических веществ, включающих различные адсорбционно-активные центры, необходимо учитывать влияние всех физико-химических и молекулярных характеристик соединений, а для прогнозирования их удерживания, вероятно, следует использовать полипараметрические уравнения, анализ которых мы предполагаем осуществить в дальнейших исследованиях.

Литература

1. Лисичкин Г.В., Фадеев Г.В., Сердан А.А и др. Химия привитых поверхностных соединений. Под ред. Г.В. Лисичкина. М.: Физматлит, 2003. 592 с.
2. Шатц В.Д., Сахартова О.В. Высокоэффективная жидкостная хроматография. Рига: Зинатне, 1988. 390 с.

© Мокраусова А.И., Курбатова С.В., 2025

УДК 541.14:547.551.2

ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ АНТИКОАГУЛЯНТЫ НА ОСНОВЕ РЯДА ПРОИЗВОДНЫХ 4-ФЕНИЛ-3,4-ДИГИДРО-2Н-ПИРИМИДИН-2-ОНА

Неверова А.А., Хайруллина В.Р., Максимов Л.С.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Исследование посвящено изучению взаимодействия 10 производных 4-фенил-3,4-дигидро-2Н-пиримидин-2-она (рис. 1) с активным центром активатора тромбина: фактором свертываемости крови Ха. Теоретические исследования выполнены методом молекулярного докинга с использованием программы AutoDock Vina. В перечень задач исследования входило: 1) определение геометрии лиганд-белковых комплексов; 2) оценка аффинности лигандов с активным центре белка; 3) определение природы взаимодействий между лигандами и активным центром белка.

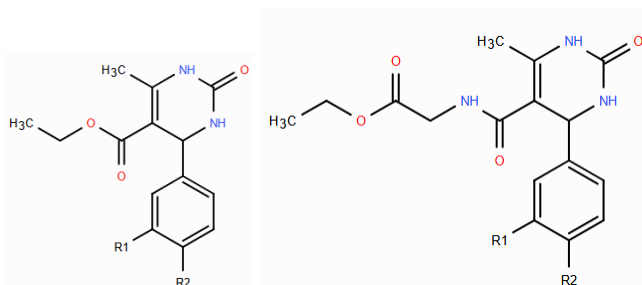


Рис. 1. Общая структурная формула моделируемых соединений

Необходимость теоретической оценки антикоагулянтных свойств для производных 4-фенил-3,4-дигидро-2Н-пиримидин-2-она обусловлена мультитаргетностью их биологического действия. С учетом стереоизомерии моделировали 20 лигандов. Код модельного белка – 1xka (цепь А) [1]. Положение лигандов в активном центре тромбина, а также энергию связывания лигандов с ним (E_{bind}) определяли с использованием программы AutoDock Vina [2]. Результаты расчетов свидетельствуют о том, что 10 из 20 протестированных лигандов характеризуются умеренной аффинностью с активным центром фактора свертываемости крови Ха. Геометрии лиганд-белковых комплексов могут быть использованы для проведения моделирования ферментативной реакции методами КМ/ММ.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

Литература

1. <https://www.rcsb.org/structure/1TA6>
2. <https://github.com/ccsb-scripps/AutoDock-Vina/>

© Неверова А.А., Хайруллина В.Р., Максимов Л.С., 2025

УДК 541.183.12:547.466:621.359.7

ДЕМИНЕРАЛИЗАЦИЯ РАСТВОРА ТИРОЗИН-ХЛОРИД НАТРИЯ ПРИ ЭЛЕКТРОДИАЛИЗЕ С РАЗЛИЧНЫМ СОСТАВОМ СПЕЙСЕРА

Нестерова Е.Д., Старкова Т.В., Харина А.Ю.

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

Аминокислоты находят свое применение в различных отраслях промышленности, включая пищевую, фармацевтическую, а также сельское хозяйство. В результате микробиологического синтеза образуются аминокислоты и ряд побочных соединений, которые необходимо отделить от целевого продукта, в частности остатки минеральных солей. В связи с этим деминерализация растворов аминокислот имеет большое значение [1].

В данной работе в качестве объекта исследования выбрана ароматическая аминокислота – тирозин (Тур). Данная аминокислота входит в состав почти всех белков и существует в двух оптически изомерных формах – L и D [2]. Электродеионизацию модельного раствора Тур ($C=0.0025M$) и NaCl ($C=0.01M$) проводили в семисекционном электродеионизационном аппарате с чередующимися монополярными гетерогенными катионообменными и анионообменными мембранами МК-40 и МА-41, выпускаемыми ООО ИП «Щекиноазот». В центральную камеру обессоливания аппарата были засыпаны сильнокислотный катионит КУ-2-8 и сильноосновный анионит АВ-17-8 в соотношениях 1:2 и 2:3.

Основываясь на результатах исследования, проведена оценка параметров обессоливания раствора Тур+NaCl методом электродеионизации. Наибольшая степень обессоливания была достигнута при соотношении катионообменник: анионообменник, равном 1:2, она составила 99.1%. Тем не менее, если рассматривать процесс деминерализации с точки зрения снижения потерь целевого продукта, то наиболее выгодно использовать соотношение засыпки катионообменник : анионообменник 2:3.

При изучении массопереноса аминокислоты установлено, что потоки тирозина через мембраны из индивидуального раствора больше потоков тирозина из смешанного раствора. Это объясняется тем, что в случае смешанного раствора наблюдается конкурирующий поток ионов минеральной соли.

Литература

1. Деминерализация растворов гетероциклической аминокислоты электромембранным методом / Т.В. Елисеева [и др.] // Сорбционные и хроматографические процессы. – 2021. – Т. 21, № 4 – С. 492-497.
2. Аминокислоты глазами химиков, фармацевтов, биологов: сб. науч. ст. / гл. ред. А.Л. Загайко. – Харьков, 2015. – С.44-71.

© Нестерова Е.Д., Старкова Т.В., Харина А.Ю., 2025

УДК 544.6:547.551.2

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОМЕМБРАННОГО РАЗДЕЛЕНИЯ ТИРОЗИНА И САХАРОЗЫ

Ничеговская Е.М., Кваша А.Е., Харина А.Ю.

Воронежский Государственный Университет, Воронеж, Россия.

Электродиализ находит применение во многих сферах: водоподготовке и очистке сточных вод, в пищевой, фармацевтической и молочной промышленности, виноделии и др. В производстве аминокислот ряд задач, возникающих при получении чистых продуктов, может также успешно решаться электромембранными методами [1]. Остатки неорганических примесей и углеводов, которые вводятся для питания штаммов бактерий,

целесообразно отделять от раствора аминокислоты методами традиционного электродиализа и электродиализа с биполярными мембранами, соответственно [2].

В данной работе рассмотрены особенности электромембранного разделения ароматической аминокислоты с фенольным боковым радикалом – тирозина (Т) и дисахарида - сахарозы (S) методом электродиализа в семикамерной ячейке с биполярными мембранами RALEX® BM (Mega a.s.) и анионообменными мембранами МА-41 (ООО «ИП Щекиноазот»). В камеры 1, 2, 6, 7 подавался раствор электролита Na_2SO_4 (0.025 М), в камеры 3, 5 - дистиллированная вода, в камеру 4 – раствор смеси Т (0,0025 М) и S (0,02 М). В исходном растворе тирозин находился в форме биполярных ионов, однако, при взаимодействии с гидроксильными ионами, генерируемыми биполярной мембраной, он перезаряжался в анион и мигрировал через анионообменную мембрану в камеру 3. Сахароза, являясь очень слабым электролитом, оставалась в камере 4, что приводило к разделению.

Показано, что фактор разделения Т и S на «свежих» мембранах составляет 40, с ростом срока их эксплуатации он постепенно уменьшается до 4. Данный факт связан с явлением органического отравления анионообменной мембраны, через которую переносится Т. Крупные молекулы компонентов смеси, включающие различные функциональные группы, способны к накоплению в фазе мембраны, что мешает целевому массопереносу аминокислоты.

Литература

1. Recovery and Concentration of Basic Amino Acids by Electrodialysis with bipolar membranes / T.V. Eliseeva [et al.] // Desalination and Water Treatment. – 2010. – Vol. 14, №1-3. – P.196-200.
2. Харина А. Ю. Особенности массопереноса компонентов при электродиализе раствора ароматическая аминокислота- минеральная соль-сахароза / А.Ю. Харина, О.Е. Чарушина, Т.В. Елисеева // Мембраны и мембранные технологии. – 2022. – Т. 12, № 2. – С. 145-150.

© Ничеговская Е.М., Кваша А.Е., Харина А.Ю., 2025

УДК 546.865-31

МЕХАНИЗМ СОРБЦИИ КРАСИТЕЛЯ МЕТИЛЕНОВОГО СИНЕГО ПОЛИСУРЬМЯНОЙ КИСЛОТОЙ

Нуждина Ю.В., Коваленко Л.Ю.

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

Наличие красителей в сточных водах признано одним из самых опасных для экосистемы. В качестве перспективных сорбентов для их удаления рассматривают неорганические твердые кислоты. Полисурьмяная кислота

(ПСК) состава $\text{H}_2\text{Sb}_2\text{O}_6 \cdot n\text{H}_2\text{O}$, где $1 \leq n \leq 4$, привлекает исследователей по причине высокой кристалличности (структурный тип пирохлора, пр. гр. Fd3m), наличие ажурного каркаса.

Цель работы: определение механизма сорбции ПСК красителя метиленового синего.

Сорбцию проводили по следующей методике: к навеске ПСК добавили раствор метиленового синего. Поместили пробирку в центрифугу для отделения твёрдой фазы от жидкости, далее отобрали раствор над ПСК и измерили оптическую плотность при длине волны 664 нм (максимум светопоглощения раствора метиленового синего). Для исследования адсорбции от температуры, суспензию с добавкой метиленового синего выдержали в термостате, при температурах 30-50 °С. На рис. приведена зависимость адсорбции метиленового синего ПСК в координатах уравнения Аррениуса.

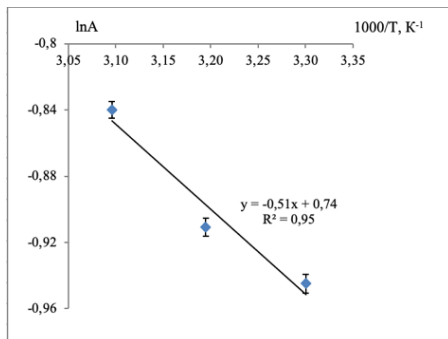


Рис. Зависимость $\ln A = f(1000/T)$.

В выбранном температурном диапазоне (30-50 °С) зависимость линейна. По тангенсу угла наклона определили энергию активации, которая составила $4,3 \pm 0,1$ КДж/моль. Небольшое значение энергии активации свидетельствует о протекании сорбции на поверхности частиц ПСК. В докладе будет показан возможный механизм сорбции.

© Нуждина Ю.В, Коваленко Л.Ю., 2025

УДК 66.096.4, 577.181.6

ФОРМИРОВАНИЕ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ТИПА «ХОЗЯИН-ГОСТЬ» МЕЖДУ ПАРАЦЕТАМОЛОМ И α -ЦИКЛОДЕКСТРИНОМ

Огнева А.С., Чернобровкина В.И.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Парацетамол является широко применяемым анальгетиком и жаропонижающим средством, однако, при передозировке может вызывать серьезные токсические реакции в организме человека, в частности он

воздействует на печень (Парацетамол относится к веществам 3 класса опасности по ГОСТ 12.1.007-76). Поиск эффективных методов снижения его токсичности является актуальной задачей. Одним из множества путей решения данной задачи является иммобилизация молекул парацетамола в циклодекстриновых торах. Ожидается, что при использовании данного подхода улучшится растворимость парацетамола, повысится его биодоступность, что позволит уменьшить концентрацию препарата, приводя к снижению токсичности.

Для изучения процесса комплексообразования парацетамола с α -циклодекстрином был использован спектрофотометрический анализ в УФ-области. Выбор данного метода обусловлен его доступностью и надежностью, подтвержденной предыдущими исследованиями аналогичных систем, проводимыми на кафедре физической химии и химической экологии ИХЗЧС УУНиТ [1, 2].

Спектрофотометрические измерения проводились на приборе Shimadzu UV-2401PC в ультрафиолетовой области (190-360 нм) при предельно низких концентрациях компонентов. Введение α -циклодекстрина в раствор парацетамола приводило к изменениям в УФ-спектрах, типичным для образования комплексов: наблюдался сдвиг максимумов полос поглощения, а также изменение оптической плотности на максимуме поглощения парацетамола. Применение метода молярных отношений позволило установить стехиометрический состав образовавшегося комплексного соединения, который оказался равным 1:1, то есть на одну молекулу олигосахарида циклодекстрина приходится одна молекула парацетамола. Увеличение температуры до 43⁰C не приводило к изменению состава комплекса, однако, рассчитанные константы устойчивости комплекса снижались.

Литература

1. Зимин Ю.С., Кутлугильдина Г.Г., Рамазанова З.Ф., Мустафин А.Г. // Журнал физической химии. 2022. Т. 96. № 8. С. 1159-1164.
2. Ibrakova, N.F., Kutlugildina, G.G., Zimin, Y.S. // Periodico tche quimica. 2020. Vol. 17. No. 36. Pp. 302-314.

© Огнева А.С., Чернобровкина В.И., 2025

ИМПУЛЬСНАЯ ЭПР СПЕКТРОСКОПИЯ КОРРЕЛИРОВАННЫХ ПАР
ФОТОВОЗБУЖДЕННЫХ ТРИПЛЕТНЫХ СОСТОЯНИЙ ФУЛЛЕРЕНОВ

Подаров Р.А.^{1,2}, Дементьев С.А.^{1,2}, Крумкачева О.А.^{1,2}

¹Новосибирский национальный исследовательский государственный
университет, Новосибирск, Россия

²Международный томографический центр СО РАН, Новосибирск, Россия

В данной работе впервые представлен подход для измерения расстояний в симметричных неортогональных фотовозбужденных спиновых парах методами дипольной ЭПР спектроскопии. Такие симметричные системы все чаще используются для эффективного преобразования солнечной энергии в электрическую. Несмотря на то, что теоретический предел эффективности современных солнечных батарей составляет всего 34%, использование процесса синглетного деления в таких симметричных спиновых парах может повысить эту эффективность до 44%. Этому способствует генерация двух носителей заряда вместо одного.

Целью данной работы является разработка подхода к измерению нанометровых расстояний с помощью электронного парамагнитного резонанса в симметричных фотовозбужденных спиновых парах на основе фуллерена. Исследования проводились с использованием молекулы бисфуллерена, соединенной фторированным линкером.

Эхо-детектируемые (ЭД) спектры молекул бисфуллерена выявили несколько примечательных эффектов. С использованием программного пакета Easyspin удалось смоделировать ЭД-спектр и оценить межфуллереновое расстояние. Данные, полученные в ходе нутационного эксперимента, эксперимента с задержкой после лазерного импульса и последующее моделирование позволяют предположить, что образование двух триплетных состояний в исследуемой системе происходит не за счет интеркомбинационной конверсии, а по механизму синглетного деления. Независимо механизм был подтвержден детектированием сигнала задержанной флуоресценции. Была предложена методика измерения расстояний в симметричных фотовозбужденных спиновых парах с помощью импульсного метода ЭПР усиления дипольной модуляции вследствие релаксации (RIDME). Экспериментально определенное расстояние между метками в бисфуллерене согласуется с оценками, полученными на основе моделирования ЭД-спектра. Кроме того, были получены кинетические параметры образования свободных триплетных состояний и задержанной флуоресценции из промежуточного коррелированного состояния пары, характеризующие эффективность образования состояний переносчиков заряда.

© Подаров Р.А., Дементьев С.А., Крумкачева О.А., 2025

ФОТОЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
ПЛЕНОЧНЫХ КОМПОЗИТОВ $\text{Ti/TiO}_2\text{-SiO}_2\text{-Bi}_2\text{O}_3$, ПОЛУЧЕННЫХ
КОМБИНАЦИЕЙ МЕТОДОВ ПЛАЗМЕННОГО-ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОГО
ОКСИДИРОВАНИЯ И ЗОЛЬ-ГЕЛЬ ТЕХНОЛОГИИ

Попов Д.П.^{1,2}, Чакилева Е.А.¹, Арефьева О.Д.¹, Васильева М.С.^{1,2}

¹Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия

²Институт химии ДВО РАН, Владивосток, Россия

Одним из наиболее перспективных и экологически чистых методов получения водорода является фотоэлектрохимическое разложение воды под действием светового излучения с использованием полупроводниковых материалов. Среди таких материалов наиболее перспективными являются гетероструктуры на основе диоксида титана, в том числе $\text{TiO}_2\text{-Bi}_2\text{O}_3$ [1]. С точки зрения практического применения более удобными являются пленочные гетероструктуры, иммобилизованные на металлической подложке. Пленочные композиты с высокой адгезией к металлу могут быть получены как одностадийным методом плазменно-электролитического оксидирования (ПЭО), так и его комбинацией с другими методами. Целью данной работы являлось получение $\text{Ti/TiO}_2\text{-SiO}_2\text{-Bi}_2\text{O}_3$ фотоанодов комбинацией методов ПЭО и золь-гель технологии (ЗГТ), исследование их физико-химических и оптических свойств.

Ионно-обменным методом был синтезирован золь кремниевой кислоты на основе биогенного кремнезема из плодовых оболочек риса (pH 8.5), в который вносили частицы Bi_2O_3 (0.2 г/л), полученные ЗГТ [2]. Модифицированный золь наносили методом «spin-coating» на ПЭО покрытия $\text{TiO}_2\text{-SiO}_2$, полученные на титане в 0.1 M Na_2SiO_3 .

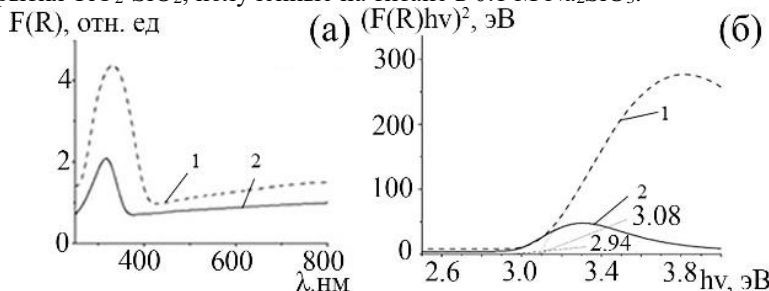


Рис. 1. Спектры диффузного поглощения (а) и графики Тауца (б) для образцов: 1 – $\text{Ti/TiO}_2\text{-SiO}_2\text{-Bi}_2\text{O}_3$; 2 – $\text{TiO}_2\text{-SiO}_2$

Согласно (рис. 1а) наблюдается смещение пика поглощения в сторону больших длин волн. Оптическая ширина запрещенной зоны E_g , определенная с использованием графиков Тауца (рис. 1б), составляет 3.2 и

2.94 эВ для образцов $\text{Ti/TiO}_2\text{-SiO}_2\text{-Bi}_2\text{O}_3$ и $\text{TiO}_2\text{-SiO}_2$ соответственно. Модификация висмутом $\text{TiO}_2\text{-SiO}_2$ образцов приводит к увеличению ширины запрещенной зоны.

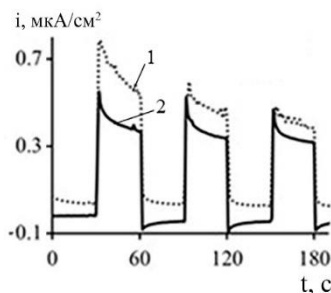


Рис. 2. Профили фототоков под действием видимого света для образцов: 1 – $\text{Ti/TiO}_2\text{-SiO}_2\text{-Bi}_2\text{O}_3$; 2 – $\text{TiO}_2\text{-SiO}_2$

Однако фотоэлектрохимические исследования показали, что модифицированные образцы генерируют более высокие анодные токи под действием УФ и видимого света (рис. 2.) по сравнению с немодифицированными, что указывает на более высокую фотоактивность модифицированных образцов.

Литература

1. Karthik K., Sunaja K. et al. Photocatalytic activity of bismuth silicate heterostructures synthesized via surfactant mediated sol-gel method // *Mater. Sci. Semicond. Process.*, 2019. V. 102.
2. Xuetang X., Yuanxing G. et al. Sol-gel synthesis and enhanced photocatalytic activity of doped bismuth tungsten oxide composite // *Mater. Res. Bull.*, 2016, V. 73, P. 385-393.

© Попов Д.П., Чакилева Е.А., Арефьева О.Д., Васильева М.С., 2025

УДК 544.252, 532.135

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НОВЫХ ТРАНСПОРТНЫХ СИСТЕМ С ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫМИ МАРКЕРАМИ

Рамм А.С.¹, Галеева А.И.¹, Сагдеев Д.О.¹, Галяметдинов Ю.Г.^{1,2}

¹ Казанский национальный исследовательский технологический университет, Казань, Россия

² Казанский физико-технический институт им. Е.К. Завойского, Казань, Россия

Квантовые точки обладают свойствами, позволяющими использовать их в медицине при диагностике рака и при маркировке и визуализации биологических объектов[1]. Лиотропные жидкие кристаллы (ЛЖК) играют значительную роль в медицине, участвуя в биологических процессах. Так, ЛЖК используется при обнаружении вредных веществ, для диагностики

воспалений и опухолей, а также в термографии и при мониторинге температуры тела [2-3]. Исследование систем, содержащих свойства обеих групп, может расширить область применения для квантовых точек и лиотропных жидких кристаллов.

В данной работе производилось исследование реологических свойств систем ЛЖК на основе поверхностно-активных веществ (ПАВ) с добавлением квантовых точек CdZnS, допированных ионами марганца (II). Реологические свойства определялись по методу вискозиметрии. Вязкость измерялась на малых (от 0,01 до 1,00 с⁻¹) и на больших скоростях (от 1,00 до 55,00 с⁻¹) сдвига. В результате были получены расчетные значения по моделям Бингама, Кэссона, Оствальда и Гершеля-Балкли. При измерении вязкости для системы с содержанием C₁₂EO₄/(H₂O+КТ)/C₁₀H₂₁ОН не фиксировалась прибором вязкость при больших скоростях, только при малых скоростях. Исследование показало, что использование других ПАВ способствует формированию более высоковязких лиотропных мезофаз. Анализ полученных данных показал, что при скорости сдвига $\gamma=0,07$ с⁻¹ лиомезофаза DMAO/(H₂O+КТ)/dec имеет максимальную вязкость $\eta_k = 32,1$ мПа·с, а при больших скоростях сдвига для системы C₁₂EO₁₀/(H₂O+КТ)/dec максимальная вязкость $\eta_k = 29,1$ мПа·с.

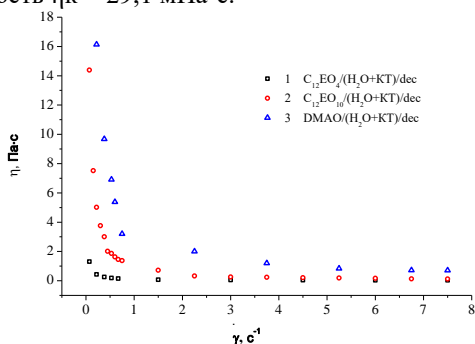


Рис. 1. Зависимость вязкости систем ПАВ/(H₂O+КТ)/dec от скорости сдвига при малых скоростях сдвига

Так для ЛЖК-систем при T=25°C, соответствующей стабильной лиомезофазе, характерно неньютоновское течение нелинейного пластичного тела. Наиболее оптимальной для лиомезофаз является модель Кэссона (R²=0,95-0,96). Поэтому данные гибридные среды являются псевдопластичными системами с установленным пределом текучести. В выражении модели Кэссона из-за уменьшения потерь на вязкое трение в результате уменьшения размеров агрегата возникает предельное напряжение, которое для изучаемых лиомезофаз составило от 0,74 Па до 30,7 Па при малых скоростях сдвига, а при больших – 3,30 Па до 12,9 Па.

причины такого проявления вязкостных свойств, видимо, связаны локализацией квантовых точек в межслоевом пространстве ламеллярной мезофазы.

Таким образом, полученные реологические характеристики имеют практическое значение для дальнейшего использования данных сред в качестве платформ для доставки лекарств.

Работа выполнена при финансовой поддержке Минобрнауки РФ в рамках государственного задания FZSG-2023-0008.

Литература

1. Sagdeev D.O. Quantum dots based “fingerprint” markers with time-resolved luminescence for fuel labeling / D.O. Sagdeev, Y.G. Galyametdinov // Optical Materials. – 2025. – V. 158. – P. 116462.
2. Bezrukov A. Molecular Orientation Behavior of Lyotropic Liquid Crystal-Carbon Dot Hybrids in Microfluidic Confinement / A. Bezrukov, A. Galeeva, A. Krupin, Y. Galyametdinov // Int. J. Mol. Sci. –2024. – V. 25. – № 10. – P. 5520.
3. Selivanova N.M.N, N-Dimethyldodecylamine oxide self-organization in the presence of lanthanide ions in aqueous and aqueous-decanol solutions / N.M. Selivanova, A.I. Galeeva, A. A. Sukhanov, O. I. Gnezdilov, D.V. Chachkov, Yu.G. Galyametdinov // J. phys. chem. B. – 2013. – V. 117. – № 17. – P. 5355-5364.

© Рамм А.С., Галеева А.И., Сагдеев Д.О., Галяметдинов Ю.Г., 2025

УДК 546.56

СИНТЕЗ ХИРАЛЬНОГО ДИСУЛЬФИДА НА ОСНОВЕ КАПТОПРИЛА

Рахимова К.Е., Гарифуллин М.Ф.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Каптоприл (1-[(2S)-3-меркапто-2-метилпропионил]-L-пролин) (САР)-первый непептидный перорально активный ингибитор ангиотензин превращающего фермента (АПФ), используемый для лечения артериальной гипертазии. САР является эффективным ингибитором АПФ перорального приема и обычно используется для лечения высокого кровяного давления, застойной сердечной недостаточности и сердечно-сосудистых заболеваний. САР в твердой форме достаточно стабилен, однако очень восприимчив к окислению, вызванному высокими температурами, влажностью, воздействием воздуха и т.д. Дисульфид каптоприла(САР₂)— метаболит каптоприла, обладающий антигипертензивной активностью[1].

В данной работе нами был получен дисульфидкаптоприлав реакции САР и ДМСО в дистиллированной воде[2]. Соотношение исходных реагентов САР:ДМСО = 2:1, рН раствора=3-5. Реакцию проводили при температуре 50-60°С. Получали мелкокристаллический порошок белого цвета. Затем проводили перекристаллизацию полученного вещества в этиловом спирте и отфильтровывали осадок от раствора.

Анализ полученного соединения сделан путем сравнения теоретического и экспериментального ИК спектров.

Таблица 1

Полосы поглощения функциональных групп, см ⁻¹	Соединение		
	САР(эксп.)	САР ₂ (эксп.)	САР ₂ (теор.)
$\nu(\text{COO})+\delta(\text{CH})$	1747	1747; 1727	1770(752), 1773(752)
$\nu(\text{C=O})+\delta(\text{NH})$	1590	1602	1656(676), 1657(958)
$\nu(\text{C-N})+\delta(\text{CH}, \text{CH}_2)$	1472	1474	1488(236), 1481(236)
$\delta(\text{CH}, \text{CH}_3)+\delta(\text{OH})$	1447	1447	1419(153), 1419(148)
$\delta(\text{OH})+\delta(\text{CH}, \text{CH}_2)$ $\nu(\text{COOH}), \delta(\text{CH})$	1192	1155	1143(676), 1144(496)
$\delta(\text{CH}), \delta(\text{OH})+\delta(\text{CH})$	676, 550	625	621 (189), 622 (209)

Литература

1. Drummer O.H., Kourtis S. Bradykinin-potentiating activity of captopril disulphide dimer (SQ 14,551)//Eur J Pharmacol. – 1988. -153(1). – P. 11-17
2. Берестова Т.В., Низаметдинова Л.А., Лусина О.В., Албутова Ю.О., Мустафин А.Г. Способ получения N,N-диацетилицтина. Патент на изобретение RU 2791479 C1

© Рахимова К.Е., Гарифуллин М.Ф., 2025

УДК 544.22.

СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ МАТЕРИЛОВ НА ОСНОВЕ ФОСФАТА КАЛЬЦИЯ

Рашитова Л.Ш., Ильясова Р.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Разработка высокоэффективных сорбентов является актуальной проблемой для России в связи с недостаточной эффективностью существующих сорбентов и экономическими санкциями. Российские ученые ведут поиск новых материалов для замены зарубежных аналогов.

В данной работе изучены сорбционные свойства тонкодисперсного гидроксиапатита кальция по отношению к ионам хрома (VI) – токсичного металла, оказывающего негативное влияние на биосферу.

Гидроксиапатит (ГАП) кальция является минералом, используемым в медицине, и в настоящее время изучается его потенциал в качестве сорбента для очистки промышленных отходов.

В работе синтезирован мелкодисперсный гидроксиапатит кальция по реакции по известной методике [1], при этом выход продукта составил 87%.



Размер частиц был измерен с помощью лазерного анализатора SALD 7071 фирмы Шимадзу и составил от 1 до 10 мкм с максимумом в 5 мкм.

Следующим этапом стал подбор условий для сорбции ионов хрома (VI) частицами ГАП. Концентрация Cr (VI) была измерена фотометрическим методом, который соотносит интенсивность цвета с концентрацией при длине волны 430 нм [2].

Оптимальными условиями для сорбции ионов хрома (VI) оказались pH 5, температура 20°C, отношение массы сорбента к объему водного раствора 0,5 г : 25 мл и время контакта фаз 20 минут. Эффективность сорбции составила 92% при концентрации 10^{-3} М, что свидетельствует о возможности эффективного извлечения ионов Cr (VI) из промышленных сточных вод.

Таким образом, тонкодисперсный гидроксипатит кальция является эффективным сорбентом для ионов Cr (VI).

Литература

1. Ключников Н.Г. Неорганический синтез. М.: Просвещение. 1988. 240 с.
2. Тикунова И.В., Шаповалов Н.А., Артеменко А.И. Практикум по аналитической химии и физико-химическим методам анализа. М.: Высшая школа. 2006. 200 с.

© Рашитова Л.Ш., Ильясова Р.Р., 2025

УДК 541.14:547.551.2

ОРИЕНТАЦИОННЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ ЛИОТРОПНОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТОЧКАМИ В МИКРОКАНАЛАХ РАЗЛИЧНОЙ ГЕОМЕТРИИ

Безруков А.Н., Ренкова Д.Р., Габдрахманова Д.Р., Галеева А.И.,
Галяметдинов Ю.Г.

¹*Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования «Казанский национальный исследовательский
технологический университет» (ФГБОУ ВО КНИТУ), Казань, Россия*

В последние годы значительные исследовательские усилия направлены на разработку инновационных методов получения «умных» материалов, включая системы на основе жидких кристаллов (ЖК). Одним из таких подходов является микрофлюидика, предлагающая уникальные возможности для регулировки характеристик надмолекулярно-организованных сред по сравнению с традиционными «макроскопическими» условиями [1].

Настоящая работа посвящена исследованию ориентационных и оптических свойств лиотропного жидкого кристалла (ЛЖК) на примере додецилового эфира тетраэтиленгликоля и его композита с «голубыми» углеродными наноточками, интегрированных в микроканалы различной

геометрии. Экспериментальные исследования проводились с использованием микрофлюидных устройств с каналами шириной 100-300 мкм методами оптической, поляризационной и флуоресцентной микроскопии.

Проанализировано влияние ширины канала на ориентационные свойства ЛЖК и композитов. Установлено, что с уменьшением ширины канала с 300 до 100 мкм преобладающую роль начинают играть пристеночные эффекты и ориентация молекул ЛЖК перпендикулярна стенкам микроканала. Композит ЛЖК с углеродными наноточками характеризуется равномерной люминесценцией во всех изученных микроканалах.

Полученные результаты создают предпосылки для разработки микротехнологических устройств с управляемыми оптическими характеристиками и потенциалом применения в молекулярной диагностике.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 25-23-00354, <https://rscf.ru/project/25-23-00354/>.

Литература

1. Chen H. Q., Wang X. Y., Bisoyi H. K., Chen L. J., Li Q. Liquid Crystals in Curved Confined Geometries: Microfluidics Bring New Capabilities for Photonic Applications and Beyond // *Langmuir*. – 2021. – Т. 37, № 13. – С. 3789-3807.

© Безруков А.Н., Ренкова Д.Р., Габдрахманова Д.Р., Галеева А.И.,
Галяметдинов Ю.Г., 2025

УДК 544.252.2:544.18:544.164

МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЛИГАНДНОГО ОКРУЖЕНИЯ НА КВАНТОВЫЙ ВЫХОД ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСОВ ЕВРОПИЯ(III)

Романова К.А.¹, Галяметдинов Ю.Г.^{1,2}

¹*Казанский национальный исследовательский технологический
университет, Казань, Россия*

²*Казанский физико-технический институт ФИЦ РАН, Казань, Россия*

Современные методы и подходы квантово-химического моделирования представляют собой надежные инструменты для получения эффективных результатов в разработке оптических материалов на основе различных люминофоров, координационных соединений лантаноидов(III) и жидких кристаллов [1, 2]. Мезогенные комплексы европия(III) (Eu(III)) с уникальными структурными и жидкокристаллическими (ЖК) свойствами, интенсивными оптическими и магнитными характеристиками являются многообещающими компонентами для разработки эффективных multifunctional материалов для оптоэлектронных устройств.

Однако неоднозначно выявленные взаимосвязи между молекулярным строением, составом и свойствами соединений, их зависимость от различных факторов [3, 4], недостаточно обоснованные физико-химические процессы, определяющие их люминесцентные и ЖК свойства, затрудняют широкое практическое применение данных комплексов. Хотя излучающий ион Eu(III) и его лигандное окружение подбираются до стадии синтеза, особенности структуры и молекулярного строения комплексов, в том числе оценка влияния лигандов на фотофизические процессы в них, не могут быть детально изучены с привлечением только экспериментальных методов.

В данной работе методы квантово-химического моделирования были применены для изучения взаимосвязи между молекулярным строением комплексов Eu(III) с различными замещенными β -дикетонами и основаниями Льюиса и их люминесцентными свойствами. Оптимизация геометрии молекул осуществлялась методом теории функционала плотности с обменно-корреляционным функционалом PBE с применением релятивистских базисных наборов rL11 и rL1 в программе Priroda 06. Моделирование энергий низших возбужденных состояний проводилось полуэмпирическим методом ZINDO/S в программе ORCA. Далее с использованием программы LUMPAC были рассчитаны параметры интенсивности люминесценции по теории Джадда – Офельта, на основе которых изучалась корреляция между величинами энергий возбужденных состояний комплексов, показателями интенсивности люминесценции, эффективностью внутримолекулярного переноса энергии и значениями теоретического квантового выхода.

На основе полученных в результате расчетов энергий низших триплетных и синглетных возбужденных состояний и скоростей прямого и обратного переноса энергии были определены каналы внутримолекулярного переноса энергии. Были проанализированы механизмы влияния природы заместителей в β -дикетонах и основаниях Льюиса на люминесценцию комплексов Eu(III) и значения их теоретического квантового выхода люминесценции. Было установлено, что при введении ароматических заместителей в структуру лигандов происходит увеличение энергии триплетного уровня и теоретического квантового выхода. Наибольшая эффективность люминесценции была отмечена в случае применения перфторалкильных заместителей в β -дикетонах, при использовании фенильного и нафтильного заместителей в основании Льюиса за счет уменьшения вклада обратного переноса энергии и увеличения эффективности прямого переноса с триплетных уровней лигандов на резонансные подуровни мультиплета иона Eu(III) .

Выявленные подходы к модификации молекулярного строения комплексов Eu(III) могут быть направлены на усиление эффективности их

излучения с целью разработки полифункциональных люминесцентных материалов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации в рамках государственного задания на оказание государственных услуг (выполнение работ) от 29.12.2022 г. (FZSG-2023-0008).

Литература

1. *Ab initio* molecular dynamics study of the structure and supramolecular organization in mesogenic lanthanum(III) complexes with β -diketones and Lewis bases / K.A. Romanova, A.V. Kremleva, Yu.G. Galyametdinov // International Journal of Quantum Chemistry. – 2021. – V. 121. – № 7. – e26569.
2. Квантово-химическое моделирование возбужденных состояний некоторых комплексов лантаноидов(III) / К.А. Романова, А.Я. Фрейдзон, А.А. Багатурьянц, М.В. Стрелков, Ю.Г. Галяметдинов // Вестник Казанского технологического университета. – 2012. – Т. 15. – № 18. – С. 19-22.
3. Квантово-химическое исследование роли жидкокристаллических полимеров в создании материалов на основе полупроводниковых квантовых точек для оптоэлектроники / К.А. Романова, А.В. Кремлева, Ю.Г. Галяметдинов // Жидкие кристаллы и их практическое использование. – 2019. – Т. 19. – № 2. – С. 15-24.
4. Особенности координационных полиэдров и жидкокристаллических свойств комплексов лантаноидов (III) по данным квантово-химического моделирования / К.А. Романова, Ю.Г. Галяметдинов // Жидкие кристаллы и их практическое использование. – 2022. – Т. 22. – № 1. – С. 16-26.

© Романова К.А., Галяметдинов Ю.Г., 2025

УДК 543.544

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ХИНОЛИНА В ВОДНО-АЦЕТОНИТРИЛЬНОЙ СРЕДЕ

Рыжкин С.А., Курбатова С.В.

Самарский национальный исследовательский университет им. академика С.П. Королева, Самара, Россия

Методы компьютерного моделирования процесса адсорбции в последнее время приобретают всё большую популярность [1]. С одной стороны, это связано с возросшей мощностью современных вычислительных машин, что даёт возможность проводить расчёты с большей точностью и скоростью. С другой стороны, данный метод позволяет определять основные закономерности адсорбции для различных хроматографических систем, не прибегая к эксперименту.

В настоящей работе было проведено квантово-химическое моделирование некоторых производных хинолина в водно-ацетонитрильной среде, целью которого явилось изучение способности сорбатов с различным строением к образованию связей с молекулами ацетонитрила. Рассчитанные

значения энергии взаимодействия сорбат-ацетонитрил показали, что на склонность атома азота хинолинового фрагмента к проявлению специфических взаимодействий с молекулой органического модификатора оказывает влияние природа заместителя, находящегося во втором положении. Так, для 2-фенилпроизводных хинолина энергия взаимодействия оказывалась по модулю практически в полтора раза ниже, чем для 2-метилпроизводных. Данная тенденция наблюдалась в других работах [2] и, вероятно, объясняется экранирующим эффектом крупных заместителей, вследствие чего молекулы ацетонитрила испытывают стерические затруднения при приближении к активному центру. Введение фенильного заместителя также приводит к увеличению делокализации электронной плотности, что снижает возможность проявления электронодонорных способностей атомом азота. С заменой фенильного фрагмента на гидроксильную группу в молекуле сорбата появляется еще один реакционный центр, что приводит к росту энергии взаимодействия с молекулами подвижной фазы примерно в 1.3 раза.

Хотя полученные в ходе квантово-химического моделирования результаты являются качественными, с их помощью представляется возможным описать основные процессы, протекающие в объеме подвижной фазы. Полученные данные позволили оценить взаимосвязь между способностью атома азота хинолинового цикла к образованию связей с молекулами ацетонитрила и природой заместителя во втором положении.

Литература

1. Zhang L., Sun Y. Molecular simulation of adsorption and its implications to protein chromatography: A review // *Biochem. Eng. J.* 2010. V. 48. № 3. P. 408-415.
2. Некрасова Н.А., Курбатова С.В. Особенности межмолекулярных взаимодействий в водно-ацетонитрильных растворах производных хинолина // *Журнал физической химии.* 2019. Т. 93. № 1. С. 128-136.

© Рыжкин С.А., Курбатова С.В., 2025

УДК 544.18

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ ОКСАДИАЗОЛА

Салькова А.М., Коновалова А.А.

Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

Ароматические соединения с включениями оксадиазольных фрагментов являются одними из наиболее широко изучаемых электронно-транспортных материалов для OLED и солнечных батарей, востребованность которых в технологиях создания приборной техники нового поколения очень высока. С использованием методов квантовой химии (TD-DFT/B3LYP/6-311G**, Gaussian09) изучены электронные спектры поглощения (ЭСП) производных

оксадиазола с общей формулой $(R-C_2N_2O)_2C_6H_4$, где $R = -H, -C_6H_5, -C_6H_3(OCH_3)_2$ (рис. 1). Проведена геометрическая оптимизация и расчет частот колебаний для конформеров указанных соединений, расчет ЭСП выполнен для наиболее энергетически выгодных структур.

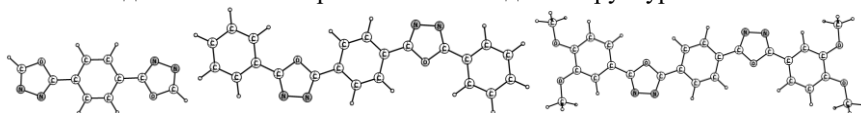


Рис. 1. Структуры производных оксадиазола $(R-C_2N_2O)_2C_6H_4$

В результате расчетов определено, что с увеличением размера молекулы за счет радикалов $-C_6H_5$ и $-C_6H_3(OCH_3)_2$ происходит понижение значений ΔE_{gap} и сдвиг полос в длинноволновую область спектра (табл.1). Полученные теоретические ЭСП позволяют сделать вывод о том, что заместители в значительной мере влияют на положение полос в спектре поглощения. Отметим удовлетворительное согласие расчетных и экспериментальных данных для соединения $(C_6H_5-C_2N_2O)_2C_6H_4$.

Таблица 1

Результаты расчетов ЭСП (TD-DFT/B3LYP/6-311G**) Поглощение

$(R-C_2N_2O)_2C_6H_4$	λ , нм(ΔE , эВ)	f	Отнесение	$\Delta E_{\text{gap}} = E_{\text{ВЗМО}} - E_{\text{НСМО}}$, эВ
R = -H	290.72 (4.26)	0.8766	ВЗМО→НСМО	4.48
R = -C ₆ H ₅	352.08 (3.52)*	1.5151	ВЗМО→НСМО	3.90
R = -C ₆ H ₃ (OCH ₃) ₂	391.09 (3.17)	1.1156	ВЗМО→НСМО	3.55

* Экспериментальные данные: $\lambda((C_6H_5-C_2N_2O)_2C_6H_4) = 340$ нм [1]

Работа выполнена при поддержке Минобрнауки (FZZM-2023-0009)

Работа выполнена под руководством: к.х.н. Лапыкиной Е.А.

Литература

1. Ch.Yang, Ch.Hsu, P.Chou.Excited State Luminescence of Multi-(5-phenyl-1,3,4-oxadiazole-2-yl) benzenes in an Electron-Donating Matrix: Exciplex or Electroplex?//J. Phys. Chem. B, 2010, 114, 756-768.

© Салькова А.М., Коновалова А.А., 2025

УДК 544.47 54.02 54.057

ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМ В ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКЕ МЕТОДОМ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ

Сафаров Э.Ф.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В условиях стремительного развития информационных технологий вычислительная химия требует обеспечения высокой производительности и точности проделанных экспериментов. При помощи математического

моделирования можно выявить ключевые кинетические параметры необходимые для описания физико-химических систем.

Для получения наиболее достоверных констант скоростей реакции необходимо минимизировать заданную функцию. В настоящее время используют стохастические и детерминированные методы оптимизации, которые разнятся условиями применения: количеством начальных данных, а также функциональными зависимостями. Помимо основных методов есть гибридные методы, которые включают в себя особенности первых двух методов.

Для исследования химической кинетики используют генетический алгоритм (ГА), который представляет собой вычислительную технику, имитирующий эволюцию и основанный на размножении и отборе. ГА состоит из особей, которые размножаются и конкурируют между собой; каждая особь является потенциальным решением оптимизационной задачи и представлена «геномом», где каждый ген соответствует одному настраиваемому параметру. Многие характеристики генетического алгоритма могут быть изменены

При помощи данного метода возможно изучения как простых систем, так и сложных: системы в которых протекают радикально-цепные реакции, где концентрации частиц радикалов настолько малы, что в лабораторных условиях идентифицировать достаточно проблематично. [1]

Литература

1. QSPR Modeling and Experimental Determination of the Antioxidant Activity of Some Polycyclic Compounds in the Radical-Chain Oxidation Reaction of Organic Substrates / V. Khairullina, Yu. Martynova, I. Safarova, G. Sharipova, A. Gerchikov, R. Limantseva, R. Savchenko // *Molecules*. – 2022. – Vol. 27, No. 19. – P. 6511.

© Сафаров Э.Ф., 2025

УДК 544.25:544.147

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ Н-КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ МЕЗОГЕННОГО АЗОСОЕДИНЕНИЯ И ПРОИЗВОДНЫХ БИПИРИДИНА

Семенова П.С., Федоров М.С.

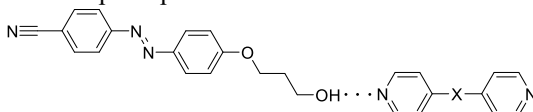
Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

Супрамолекулярные ЖК в настоящее время активно исследуются в связи с широкими перспективами формирования с помощью супрамолекулярного подхода новых ЖК систем с заданными свойствами. Применение в качестве их компонентов азосоединений позволяет получить фотопереключаемые мезофазы, имеющие важное практическое значение [1].

В данной работе с помощью методов квантовой химии (B3LYP/сс-pVTZ; Gaussian09) установлено геометрическое и электронное строение комплексов 4(3'-гидроксипропилокси)-4''-цианазобензола с 4,4'-бипиридином и его аналогами с различными мостиковыми группами. Выполнена полная геометрическая оптимизация и расчет частот колебаний для комплексов состава 1:1 и 2:1 соответственно. В таблице представлены некоторые параметры Н-комплексов состава 1:1.

Таблица 1

Основные характеристики комплексов и Н-связей в них



-X-	$E_{\text{комп.}}$, ккал/моль	$r(\text{N}\cdots\text{H})$, Å	$r(\text{O}\cdots\text{H})$, Å	$\Delta\nu_{\text{O-H}}$, cm^{-1}
-C ₆ H ₄ -	-4.881	1.905	0.977	326
-CH ₂ -CH ₂ -	-4.855	1.904	0.977	327
-CH=CH-	-4.773	1.907	0.977	322
-	-4.553	1.914	0.976	309
-S-S-	-4.534	1.914	0.976	307
-C≡C-	-4.469	1.917	0.976	305
-N=N-	-4.291	1.922	0.976	298

Как видно из таблицы, тип мостиковой группы значительно влияет на величину энергии комплексообразования ($E_{\text{комп.}}$) и прочность Н-связи. Наиболее прочные комплексы формируются, когда X=-C₆H₄-, а наименее прочные – для X=-N=N-. Очевидно, что природа мостиковой группы и ее влияние на геометрическое и электронное строение комплекса играет важную роль за счет различных электронных и стерических эффектов.

Литература

1. Santamaria-Garcia V.J.; Flores-Hernandez D.R. et al. // *Int. J. Mol. Sci.* 2022, 23, 7998.
© Семенова П.С., Федоров М.С., 2025

УДК 541.14:547.551.2

СКАНДАТ-АЛЮМИНАТ БАРИЯ, ДОПИРОВАННЫЙ Zr(IV): СИНТЕЗ, ГИДРАТАЦИЯ, ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ

Сливницын И.А., Бушуева А.В., Анимиди И.Е.

Уральский федеральный университет, Екатеринбург, Россия

В данной работе синтезированы и изучены новые фазы Ba₇Sc₆Al₂O₁₉, Ba_{6,975}Sc_{5,95}Zr_{0,05}Al₂O₁₉, Ba_{6,95}Sc_{5,9}Zr_{0,1}Al₂O₁₉, Ba₇Sc_{5,9}Zr_{0,1}Al₂O_{19,05} – перспективные протон-проводящие материалы, используемые в качестве

электролита в твердооксидных топливных элементах, применимых в водородной энергетике.

$Ba_7Sc_6Al_2O_{19}$ сложный оксид, являющийся структурой когерентного срастания двух перовскитоподобных блоков кислород-дефицитной фазы Ba_2ScAlO_5 и перовскитоподобного блока катион-дефицитной фазы $Ba_3Sc_4O_9$ [1].

Новые фазы были получены методом растворного синтеза из нитратов соответствующих металлов, водные растворы которых смешивали в стехиометрических количествах ($ZrO(NO_3)_2$ растворялся в HNO_3), а в качестве комплексообразователя и органического топлива выступали лимонная кислота и глицерин. Полученный порошок отжигался в течение 48 часов при 1250 °С, далее перетирался в шаровой мельнице в среде гексана в течение 10 часов. После чего с помощью ручного пресса были сформированы цилиндрические гранулы, которые отжигались при 1600 °С 24 часа.

Для гидратированных образцов методом ИК-спектроскопии установлено, что в фазах присутствуют протоны в виде OH^- -групп. Термогравиметрический анализ показал, что изменение массы образцов связано с процессом дегидратации, иные вещества не выделялись.

Методом электрохимического импеданса измерены зависимости электропроводности от температуры в атмосфере воздуха и аргона при различных влажностях. Было установлено, что проводимость фаз во влажной атмосферах выше, чем в сухой, что свидетельствует о вкладе протонной проводимости.

Было установлено, что системы на основе $Ba_7Sc_6Al_2O_{19}$ способны к поглощению молекул воды из газовой фазы и проявлению протонной проводимости.

Работа выполнена при поддержке гранта Российского научного фонда и правительства Свердловской области № 24-13-20026.

Литература

1. Shpanchenko R. V. et al. High-resolution electron microscopic study of $Ba_7Sc_6Al_2O_{19}$ and related phases //Journal of Solid State Chemistry. – 1994. – Т. 113. – №. 1. – С. 193-204.

© Сливницын И.А., Бушуева А.В., Анимица И.Е., 2025

ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ ЦИНКА
В НЕЙТРАЛЬНОЙ СРЕДЕ В ПРИСУТСТВИИ ФЛОКУЛЯНТОВ

Смородина Л.А., Шайкина Д.А., Агеенко Е.И., Колесников А.В.

Челябинский государственный университет, Челябинск, Россия

В цинковой промышленности широко применяются высокомолекулярные поверхностно-активные вещества (ПАВ), известные как флокулянты. Их использование способствует улучшению фильтрации и отстаивания пульпы. Однако данные соединения могут негативно влиять на последующие стадии производства, включая цементационную очистку растворов и электролиз. В связи с этим изучение механизмов их воздействия представляет значительный практический интерес, так как позволяет оптимизировать выбор флокулянтов для конкретных технологических условий.

Современные флокулянты представляют собой органические соединения с высокой молекулярной массой, используемые в качестве добавок. В рамках данного исследования изучалось влияние трёх типов флокулянтов: неионогенного (Besfloc K 4000), анионного (Besfloc K 4043) и катионного (Besfloc K 6645) на процесс осаждения цинка при электролизе в нейтральном растворе его соли.

Эксперимент проводился с использованием 45 мл электролита, содержащего 0,07 М сульфата цинка и 0,09 М сульфата натрия. Концентрация вводимых флокулянтов составляла 0,07 г/л. Для оценки влияния параметров на осаждение цинка применялся метод циклической вольтамперометрии (ЦВА) в диапазоне потенциалов от -870 до -1301 мВ.

Экспериментальные данные свидетельствуют, что все три исследуемых флокулянта проявляют ингибирующие свойства по отношению к процессу выделения цинка. В контрольном опыте (без добавления флокулянтов) начало электроосаждения цинка наблюдалось при перенапряжении -130 мВ. Однако введение в систему неионогенного и анионного флокулянтов вызывало смещение потенциала начала осаждения до -140 мВ и -150 мВ соответственно. В случае катионного флокулянта требуется приложить перенапряжение более -280 мВ для электроосаждения цинка.

При повышении перенапряжения свыше -200 мВ было отмечено сближение поляризационных кривых для чистого электролита и раствора с неионогенным флокулянтом. Это указывает на то, что при высоких значениях перенапряжения данный тип добавки практически не оказывает влияния на процесс осаждения металла.

Сравнительный анализ выявил следующую закономерность в степени воздействия флокулянтов: неионогенный < анионный < катионный.

© Л.А. Смородина, Д.А. Шайкина, Е.И. Агеенко, А.В. Колесников, 2025

Природный газ имеет важное значение в жизни человека. В последние несколько лет объёмы добычи и потребления природного газа значительно выросли из-за того, что страны переходят с угля на природный газ в качестве основного источника более чистой энергии. Однако, качество природного газа регламентируется рядом нормативных документов. Так, точка росы по воде и углеводородам у природного газа должна быть достаточно высокой, чтобы в процессе его транспортировки не происходила конденсация жидкости.

В данной работе смоделирован процесс осушки природного газа различными абсорбентами при использовании программного обеспечения Aspen hysys (рисунок 1), а также изучено влияние соотношения абсорбент/природный газ на точку росы природного газа по воде и углеводородам (таблица 1).

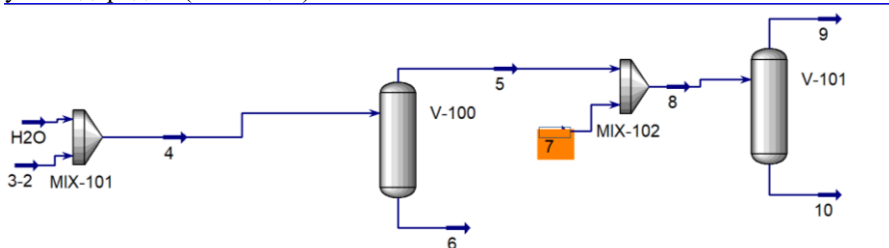


Рис. 1. Схема осушки природного газа

Установлено, что увеличение расхода метанола с 0,1 до 40 кг/ч приводит к снижению точки росы по воде на 10⁰С. При этом увеличение расхода этанола с 0,1 до 40 кг/ч приводит к снижению точки росы по воде на 10⁰С и точки росы по УВ на 18⁰С. При этом с 0,1 до 5 кг/ч этанола значение точки росы по воде и УВ совпадают, а при увеличении с 5 до 40 кг/ч значения расходятся.

Таблица 1

Результаты моделирования процесса осушки природного газа

№	Расход абсорбента, кг/ч	Содержание воды, % об.	Точка росы по УВ, °С	Точка росы по воде, °С
1	0,1 (метанол)	0,0550	35,74	35,74
2	1 (метанол)	0,0408	34,51	34,51
3	10 (метанол)	0,0054	26,86	26,86
4	40 (метанол)	0,0011	25,22	25,23
5	0,1 (этанол)	0,0565	35,56	35,56
6	1 (этанол)	0,0506	33,59	33,59
7	10 (этанол)	0,0403	22,98	29,61
8	40 (этанол)	0,0309	18,51	25,60

Литература

1. Гагина М.В., Волков В.Г., Гогешашвили О.А. Анализ PVT-свойств пластовых газов Юрубчено-Тохомской зоны нефтегазонакопления Байкитской нефтегазоносной области на основании региональных трендов //Георесурсы. – 2024. – Т. 26. – №. 3. – С. 109-115.
2. Голубева И.А., Дашкина А.В., Шульга И.В. Актуальные проблемы аминовой очистки природных газов, анализ и пути решения //Нефтехимия. – 2020. – Т. 60. – №. 1. – С. 51-56.
- 3.3. Турсунов Б.Ж., Гайбуллаев С.А., Жумаев К.К. Влияние технологических параметров на гликолевую осушку газа //Sciences of Europe. – 2020. – №. 55-1 (55). – С. 33-36.

© Собина Ю.А., Файзуллина З.Р., 2025

УДК 547.521

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ ОБРАЗОВАНИЯ ДЕФЕКТОВ АТОМНОГО
ОСТАВА УЛЬТРАКОРОТКИХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК

Соваренко Д.О., Томилин О.Б., Родионова Е.В., Родин Е.А.

*Мордовский государственный университет им. Н.П. Огарева, Саранск,
Россия*

В работе объектами исследования были выбраны ультракороткие открытые углеродные нанотрубки (УНТ) хиральности (5,0), (6,0), (7,0), (3,3) и (4,4) с дефектами вакансиями атомов углерода. Расчеты

оптимальной геометрии УНТ были определены методом DFT/B3LYP/6-31G.

Энергия образования дефектов рассчитывалась по формуле (I):

$$E_{\text{def}} = \left(E_{d\text{УНТ}} + r \cdot \frac{E_{\text{УНТ}} - q E_{\text{H}}}{p} \right) - E_{\text{УНТ}} \quad (\text{I})$$

где $E_{\text{УНТ}}$ — энергия УНТ, $E_{d\text{УНТ}}$ — энергия УНТ с дефектом, r — количество изъятых атомов углерода, E_{H} — энергия атома водорода, q — количество атомов водорода, p — количество атомов углерода в УНТ.

Энергия образования одиночной вакансии в рассмотренных УНТ составила 3,97–5,39 эВ. С ростом диаметра УНТ величина E_{def} увеличивается. Это связано с уменьшением структурной «напряженности» атомного остова УНТ. Энергия образования дивакансии в УНТ меньше по сравнению с энергиями образования одиночной и тройной вакансии. Вероятно, это связано с тем, что одиночная и тройная вакансии содержат атом углерода с «висящей» связью. В то же время, энергия образования тройной вакансии на 0,64–1,29 эВ превышает энергию образования одиночной вакансии. Это можно объяснить тем, что тройная вакансия приводит к большим структурным искажениям УНТ.

Образование нескольких дефектов требует суммарно большей энергии. Однако, при увеличении степени дефектности поверхности УНТ обнаружено уменьшение энергии образования «новых» дефектов. Это было подтверждено расчетом энергии поэтапного образования дефектов. Было установлено, что энергия трансформации двух одиночных вакансий в одну двойную, а также трех одиночных вакансий в одну тройную имеет отрицательное значение. Это означает, что энергетически выгодным будет процесс образования более крупных дефектов, что соответствует экспериментальным данным.

© Соваренко Д.О., Томилин О.Б., Родионова Е.В., Родин Е.А., 2025

УДК 544.6:547.466:621.359.7

ВЛИЯНИЕ ТИРОЗИНА НА ТРАНСПОРТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АНИОНООБМЕННЫХ МЕМБРАН ПРИ ЭЛЕКТРОДИАЛИЗЕ С БИПОЛЯРНЫМИ МЕМБРАНАМИ

Стрельников М.М., Голотвина А.М., Елисеева Т.В.

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

В промышленности тирозин (Тур) получают путём биосинтеза, в процессе которого используются штаммы бактерий, питающиеся сахарами и минеральными солями. При этом получают раствор аминокислоты, который содержит остатки неорганических и органических примесей (например, соль

аммония и сахарозу (Suc)) [1]. Для эффективной очистки аминокислоты используют различные мембранные методы, в частности электродиализ с биполярными мембранами [2], который дает возможность отделения неэлектролитов.

В данной работе в качестве объекта исследования выбрана ароматическая аминокислота – тирозин. Тирозин участвует в синтезе не только белков для построения мышечной ткани, но и в синтезе таких гормонов как адреналин, норадреналин, дофамин. Электродиализ модельного раствора Туг ($C=0.0025M$) и Suc ($C=0.02M$) проводили в семисекционном аппарате с чередующимися анионообменными и биполярными мембранами МА-41 и МБ-2, выпускаемыми ООО «ИП Щекиноазот».

Транспортные характеристики мембран были оценены в ходе их долгосрочной работы. При изучении зависимости потоков тирозина через анионообменную мембрану от времени зафиксировано плато (массоперенос не изменяется в течение 12 часов), затем на протяжении 20 рабочих часов поток постепенно уменьшается и далее стабилизируется.

При рассмотрении изменений свойств поверхности анионообменной мембраны МА-41 после длительного контакта с раствором тирозина было зафиксировано увеличение контактного угла смачивания, что соответствует увеличению гидрофобности поверхности. Кроме того, после длительного контакта анионообменной мембраны МА-41 с раствором, содержащим тирозин, обнаружено увеличение шероховатости ее поверхности.

Литература

1. Коренман Я.И. Экстракционно-хроматографическое определение глюкозы и фруктозы в присутствии ароматических аминокислот / Я.И. Коренман, А.А. Бычкова, О.А. Пахомова // Вестник ВГУИТ. – 2012. – №1. – С.115-118.
2. Электродиализ растворов аминокислот с применением биполярных ионообменных мембран / Т.В. Елисеева [и др.] // Электрохимия. – 2001. – Т. 37, № 4. – С. 492-495.

© Стрельников М.М., Голотвина А.М., Елисеева Т.В., 2025

УДК 544.6:544.773

МГК-АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ pH НА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ АНИЛИНА НА УГОЛЬНО-ПАСТОВОМ ЭЛЕКТРОДЕ

Сякаев Р.С., Арсланова Р.Ф., Сидельников А.В., Мустафин А.Г.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Благодаря своим электрохимическим свойствам, анилин может использоваться в качестве чувствительного элемента в электрохимических сенсорах для определения различных аналитов [1]. Эффективность таких сенсоров напрямую зависит от pH среды. В связи с этим, настоящее

исследование посвящено изучению влияния pH на электрохимическое поведение анилина на угольно-пастовом электроде, что позволит оптимизировать условия работы сенсоров на основе анилина и углубить понимание механизмов сенсорного отклика.

Электрохимическое поведение анилина на угольно-пастовом электроде исследовалось методом циклической вольтамперометрии в 0.9% растворе хлорида натрия при различных значениях pH: 1.72, 2.63, 3.56, 4.40, 6.78, 9.33 и 10.3. pH растворов регулировался добавлением соляной кислоты или гидроксида натрия. Трехэлектродная ячейка представляла собой угольно-пастовой рабочий электрод, модифицированный анилином, стеклоглеродный электрод сравнения и графитовый вспомогательный электрод. Циклическая вольтамперометрия проводилась в диапазоне потенциалов от -1300 мВ до +1300 мВ, со скоростью развертки 500 мВ/с и количеством циклов 400. Обнаружено, что вольтамперограммы, полученные при каждом значении pH, не совпадают друг с другом в процессе циклирования, демонстрируя смещение потенциалов и токов пиков, что, вероятно, связано с изменением поверхности электрода в ходе эксперимента.

Анализ методом главных компонент (МГК) позволил выявить зависимость электрохимического поведения анилина от pH. Для адекватного описания данных потребовалось 7 главных компонент, что обеспечило коэффициент корреляции 0.98. При этом анализ графика зависимости первой главной компоненты (PC1) от pH (рис.1) показал линейное возрастание PC1 до значения pH 5.67, после чего наблюдается выход на плато. Это свидетельствует о том, что электрохимические процессы, наиболее сильно влияющие на PC1, претерпевают изменения в области pH 5.67.

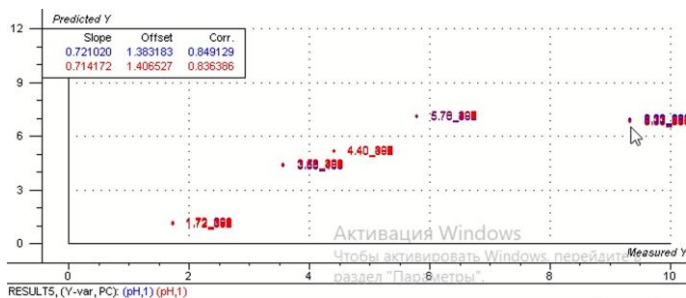


Рис. 1.

Вероятно, это связано с изменением механизма окисления анилина и его полимеризации в полианилин, с изменением соотношения различных морфологических (глобулы, гранулы, нанотрубки) и кислотно-основных (эмеральдиновые, лейкоэмеральдиновые основания и соли) форм

полианилина на поверхности электрода, и как следствие различной электропроводности. Данный факт согласуется с данными, представленными в работе [2], где показано, что депротонирование полианилина происходит в диапазоне pH 5-6.

Полученная зависимость PC1 от pH может быть использована для создания электрохимического сенсора для определения pH в диапазоне до 5.67, и выше. Результаты подчеркивают сложный характер электрохимических процессов, протекающих с участием анилина, и необходимость дальнейших исследований для детального выяснения механизмов, определяющих его поведение в зависимости от pH.

Литература

1. Shoaie N. et al. Electrochemical sensors and biosensors based on the use of polyaniline and its nanocomposites: A review on recent advances //Microchimica Acta. – 2019. – Т. 186. – С. 1-29.
2. Ray A. et al. Polyaniline: protonation/deprotonation of amine and imine sites //Synthetic Metals. – 1989. – Т. 29. – №. 1. – С. 151-156.

© Сякаев Р.С., Арсланова Р.Ф., Сидельников А.В., Мустафин А.Г., 2025

УДК: 54-386

СИНТЕЗ КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С *L*-ГИСТИДИНОМ

Такиева Г.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Синтез комплексов переходных металлов с *L*-гистидином представляет собой многообещающую область исследований, позволяющую разработать новые антибактериальные и противовирусные агенты. Гистидин может усиливать биодоступность металлов и улучшать их терапевтические свойства.

В данной работе изучено комплексообразование *L*-гистидина с ионами Zn(II), Ni(II), Co(II), Cu(II) [1] в соотношении 2:1 в водной среде в течение 24 часов. В ходе реакции получены комплексы 1-4 общей формулой $[M(L-His)_2] \cdot H_2O$ с выходами 50-70%, которые проанализированы методом ИК спектроскопии (таблица 1).

Таблица 1

Комплексное соединение	Выход, %	Окраска соединения	Характеристические частоты		
			$\nu_{as}(\text{COO})$	$\nu_s(\text{COO})$	$\delta(\text{NH}_2) + \delta(\text{CH})$
<i>L</i> -His	-	белый	1580 о.с.	1499 ср.	1143 м.
[Zn(<i>L</i> -His) ₂] (1)	68	белый	1642 о.с. 1634 о.с. 1616 о.с. 1574 о.с.	1489 ср. 1410 ср. 1339 ср.	1117 м. 1046 м.
[Ni(<i>L</i> -His) ₂] (2)	70	бирюзовый	1645 о.с. 1601 о.с.	1405 ср. 1380 ср. 1338 ср.	1079 м.
[Co(<i>L</i> -His) ₂] (3)	50	голубой	1686 о.с. 1624 о.с.	1395 ср. 1336 ср.	1113 м. 1021 м.
[Cu(<i>L</i> -His) ₂] (4)	66	сине-зеленый	1631 о.с. 1520 о.с.	1396 ср. 1314 ср.	1226 м.

Было показано, что комплексы 1-4 представляют собой индивидуальные, кристаллические, хорошо растворимые в воде соединения и являются перспективными в качестве антибактериальных и противовирусных препаратов.

Литература:

1. Berestova T.V., Khursan S.L., Mustafin A.G. // Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular. 2020. V.229. 117950.

© Такиева Г.А., 2025

УДК 544.424

ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ И РАСТВОРИТЕЛЯ НА КОНСТАНТУ СКОРОСТИ АЛЬДЕР-ЕНОВОЙ РЕАКЦИИ 4-ФЕНИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛИН-3,5-ДИОНА С 2-КАРЕНОМ

Телманова Д.З.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

4-Фенил-1,2,4-триазаолин-3,5-дион (1) содержит очень активную N=N связь, что обеспечивает легкое вовлечение данного реагента в Альдер-еновые реакции [1]. Данные реакции представляют как синтетический [2], так и механистический [3] интерес. Реагент 1 проявляет повышенную активность в реакциях [4+2]-, [2+2]-циклоприсоединения и енового синтеза по сравнению с другими диенофилами. Установлено, что 2-карен (2) вступает в Альдер-еновую реакцию с 1, образуя аддукт 3 (схема 1).

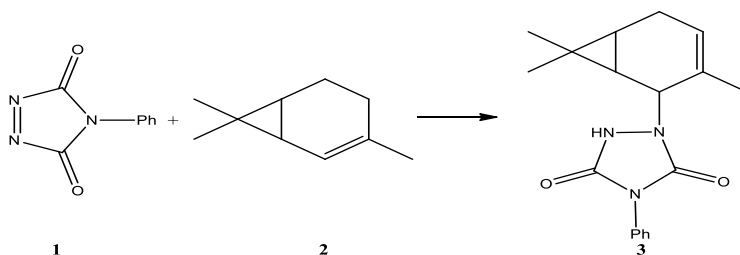


Схема 1. Альдер-еновая реакция 4-фенил-1,2,4-триазолин-3,5-диона (1) с 2-кареном (2)

Определены константы скорости реакции $1+2 \rightarrow 3$ в 9 растворителях в интервале температур 20-40 °С. Рассчитаны значения энтальпии и энтропии активации. Константы скорости реакции $1+2$ в таких полярных растворителях как N,N-диметилформамид и ацетонитрил заметно ниже констант скорости в малополярных растворителях. Значения энтропии активации реакции $1+2$ близки к значениям энтропии активации других Альдер-еновых реакций, а также Дильса-Альдера, $[2\pi+2\sigma+2\sigma]$ - и $[2\pi+2\pi+2\pi]$ -циклоприсоединения.

Литература

1. Corey E.J., Snider B.B. A new synthetic route to prostaglandins. – *Tetrahedron Lett.*, 1973. – С. 3091-3094.
2. Gau A.-H., Lin G.-L., Uang B.-J., Liao F.-L., Wang S.-L. Regio- and diastereoselective ene reaction of 4-phenyl-1,2,4-triazoline-3,5-dione with chiral allylic alcohols and their derivatives. – *J. Org. Chem.*, 1999. – С. 2194-2201.
3. Chen J.S., Houk K.N., Foote C.S. The nature of the transition structures of triazolinone ene reactions. – *J. Am. Chem. Soc.*, 1997. – С. 9852-9855.

© Телманова Д.З., 2025

УДК 541.8

КОМПЛЕКС ВКЛЮЧЕНИЯ β -ЦИКЛОДЕКСТРИН – ХЕЛИДОНОВАЯ КИСЛОТА В ВОДНОМ РАСТВОРЕ. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ

Терехина Е.Н.¹, Одинцова Е.Г.², Антипова М.Л.², Петренко В.Е.²

¹Ивановский государственный университет, Иваново, Россия

²Институт химии растворов им. Г.А. Крестова РАН, Иваново, Россия

В настоящее время методы молекулярного моделирования (квантовохимические расчеты, молекулярная стыковка – докинг, молекулярно-динамическое моделирование) широко используются при

исследовании сложных молекулярных систем-комплексов, поскольку позволяют получать многочисленные характеристики и визуально отображать детали взаимодействия, которые невозможно получить в эксперименте. В своей работе мы используем моделирование методом молекулярной динамики для описания структуры и механизма поведения комплекса включения β -циклодекстрина (β -ЦД)-хелидоновая кислота (ХК) в водной среде. Комплекс включения представляет собой систему, состоящую из молекулы-«хозяина», обладающей полостью, и молекулы-«гостя», лиганда, находящегося внутри полости. Образование комплекса происходит за счет нековалентных межмолекулярных взаимодействий.

ХК представляет собой гетероциклическую органическую кислоту, содержащуюся в 688 видах растений. Она обладает широким спектром биологической активности: противовоспалительной, противомикробной, обезболивающей, онкостатической и т.д. Наиболее интересны – её остогенные свойства, которые могут быть использованы при создании новых препаратов для лечения заболеваний опорно-двигательного аппарата и регенерации костной ткани [1].

Цель нашей работы – теоретическое исследование комплексов включения β -циклодекстрина-хелидоновая кислота в водной среде кислотными методами. Такие комплексы не описаны в литературе и не исследованы.

В пакете GaussView 5.0 были построены модели β -ЦД и ХК, созданы входные файлы с их молекулярными структурами (Рис. (а)); методом DFT, B3LYP и базисным набором 6-31G были рассчитаны геометрические параметры молекул и распределение зарядов на атомах, проведен сравнительный анализ конформаций ХК (Gaussian 09). Комплекс включения β -ЦД/ХК был создан в AutoDock 4.2.6. [2] (Рис. (б)). Методом молекулярной динамики в пакете GROMACS 2019.6. [3] рассчитана молекулярно-динамическая траектория комплекса в водной среде при 298K на протяжении 1 мкс. Получены структурные и термодинамические характеристики комплекса: RMSD, функции радиального распределения, средние числа и времена жизни водородных связей (Рис. (в)). Показано: комплекс включения β -ЦД/ХК в воде при 298K имеет один сайт связывания и динамически устойчив.

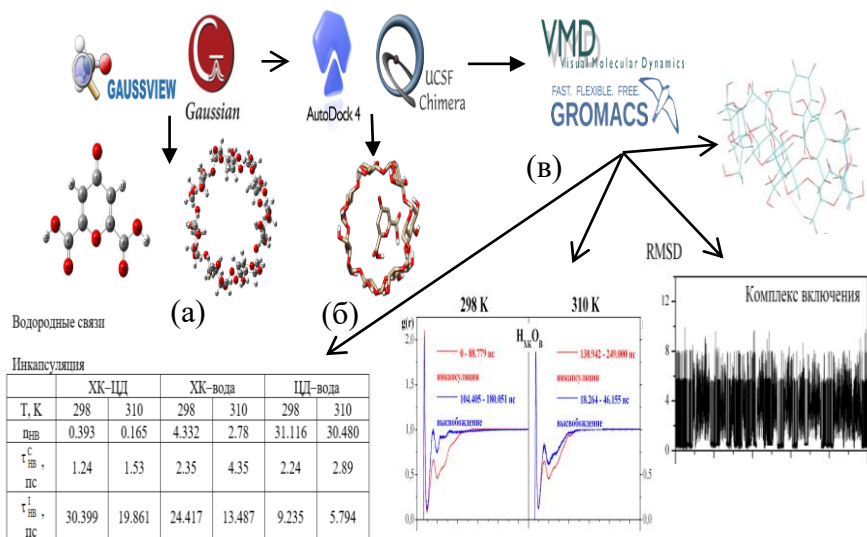


Рис. 1. Этапы молекулярного моделирования комплекса включения β -ЦД/ХК

Литература

1. Avdeeva E. Yu., Igidov N.M., Krivoshchekov S.V., Khlusov I.A., Belousov M.V., Dozmorova N.V., Luzhanin V.G. Synthesis and quality control of calcium chelidonate substance with osteogenic activity // Drug development & registration 2023. V.12. P.47–52.
2. Morris G.M., Huey R., Lindstrom W., Sanner M.F., Belew R.K., Goodsell D.S., Olson A.J. AutoDock4 and AutoDockTools4: Automated docking with selective receptor flexibility // J. computational chemistry 2009. V. 30.P. 2785-2791.
3. GROMACS 2019.6. <https://manual.gromacs.org/documentation/2019.6>.

© Терехина Е.Н., Одинцова Е.Г., Антипова М.Л., Петренко В.Е., 2025

УДК 544

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКИХ И КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ АДсорбЦИИ ПРОИЗВОДНЫМИ ПОЛИ[2-МЕТИЛ-1Н-ИНДОЛА]

Азнабаева М.Р.¹, Перминова А.А.¹, Усманова Г.С.², Латыпова Л.Р.²

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Исследование процесса адсорбции чаще всего включает в себя определение изотермических и кинетических параметров, позволяющих

понять механизм взаимодействия между адсорбентом и адсорбатом. Для установления закономерностей адсорбции используют уравнения изотерм Ленгмюра, Фрейндлиха и Темкина. Для описания кинетики процессов адсорбции применяют кинетическую модель псевдопервого порядка, кинетическую модель псевдовторого порядка и модель диффузии внутри части, которые позволяют оценить и установить наилучшую корреляцию для объяснения экспериментальных данных.

В представленной работе определены изотермические и кинетические параметры новых адсорбционных материалов на основе производных полииндола PIn1-PIn5, полученных в процессе модификации полиалкениланилинов (схема 1) [1].

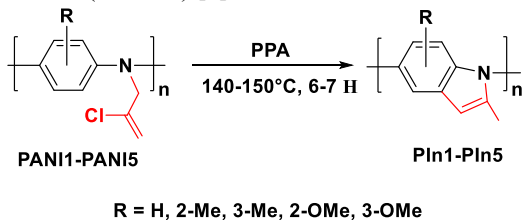


Схема 1. Синтез производных полииндола PIn1-PIn5

Из полученных результатов следует, что процесс адсорбции анионного красителя метилового оранжевого (МО) на полимерах PIn1-PIn5 описывается изотермой Ленгмюра, что подтверждается высокими значениями коэффициента детерминации ($R^2 = 0.9640, 0.9666, 0.9561$). В свою очередь, кинетическая модель псевдовторого порядка имеет самые высокие коэффициенты R^2 ($R^2 = 0.9994, 0.9999, 0.9983$), что позволяет предположить, что этот порядок хорошо соответствует экспериментальным результатам.

Литература

1. Mustafin A.G., Latypova L.R., Andriianova A.N., Usmanova G.S. Poly [N-(2-chloroprop-2-en-1-yl) aniline]s: Sythesis, polymer analogous reaction, and Physicochemical Properties // Polymer Chemistry. – 2021. – Т. 12. – №. 39. – С. 5650-5661.

© Азнабаева М.Р., Перминова А.А., Усманова Г.С., Латыпова Л.Р., 2025

УДК 541.49:547.462.3

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ЯНТАРНОЙ КИСЛОТЫ С 5-ГИДРОКСИ-1,3,6-ТРИМЕТИЛУРАЦИЛОМ В ВОДЕ Фазлыева Л.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Янтарная кислота (ЯК) участвует в реакциях клеточного дыхания и энергетического обмена через цикл Кребса. Являясь мощным природным

антиоксидантом, она защищает организм от воздействия свободных радикалов. ЯК также способствует улучшению работы иммунной, нервной и сердечно-сосудистой систем, активизирует процессы аэробного дыхания, помогая организму эффективнее использовать кислород. Исследование комплексных соединений янтарной кислоты с веществами, подобными урацилу (одному из азотистых оснований нуклеиновых кислот), имеет важное значение для разработки новых лекарственных препаратов, обладающих противораковым, антиоксидантным, иммуностимулирующим, противовоспалительным или антидотным действием.

В настоящей работе изучено комплексообразование янтарной кислоты с 5-гидрокси-1,3,6-триметилаурацилом. Взаимодействие реагентов изучали методом ультрафиолетовой спектрофотометрии на максимумах поглощения рассматриваемого производного урацила (ПУ). В ходе исследований установлено, что в интервале температур 296 – 357 К ЯК образует с ПУ достаточно прочные комплексные соединения (константы устойчивости $K \sim 10^3 \div 10^4$ л/моль) в соотношении ЯК : ПУ = 1 : 1 (и по методу изомольярных серий, и по методу молярных отношений [1]). На основании зависимости $K = f(T)$ были рассчитаны термодинамические параметры комплексообразования. Показано, что реакция между янтарной кислотой и 5-гидрокси-1,3,6-триметилаурацилом протекает самопроизвольно с выделением теплоты. Следует отметить, что полученные в настоящей работе результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными более ранних работ [2, 3] по изучению комплексообразования ЯК с другими ПУ.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

Литература

1. Бек М., Надьпал И. Исследование комплексообразования новейшими методами. – М.: Мир, 1989. – С. 137-147.
2. Борисова Н.С., Ишмуратова Г.И., Валиева О.И., Борисов И.М., Зимин Ю.С., Мустафин А.Г. // Вестник Башкирского университета. 2012. Т. 17. № 4. С. 1687-1690.
3. Терентьев А.О., Борисова Н.С., Хамитов Э.М., Зимин Ю.С., Мустафин А.Г. // Журнал физической химии. 2014. Т. 88. № 12. С. 1908-1913.

© Фазлыева Л.А., 2025

УДК 543.421/.424

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОРОТОВОЙ КИСЛОТЫ С ЦИКЛОДЕКСТРИНАМИ

Фатхулова А.М.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Оротовая кислота (ОК) является витаминоподобным веществом, оказывающее влияние на метаболизм и стимулирующее рост живого

организма. Однако в отличие от настоящих витаминов, она не обладает всеми их свойствами. Положительное действие оротовой кислоты на организм связано с уменьшением уровня холестерина в крови и восстановлением сердечной мышцы после инфаркта. Передозировка ОК способна вызвать расстройства пищеварения, что в долгосрочной перспективе может привести к заболеваниям печени.

В данной работе рассматривается один из способов уменьшения токсичности биологически активных веществ, а именно образование комплексов оротовой кислоты с олигомерными носителями. Предполагается, что этот подход позволит снизить негативное воздействие ОК на организм человека за счет уменьшения необходимой дозы, а также повысить ее эффективность и биодоступность. В качестве олигомерной матрицы были выбраны природные циклодекстрины (ЦД) в α -, β - и γ -формах.

Взаимодействие циклодекстринов с оротовой кислотой изучали с помощью УФ-спектрофотометрии. Настоящая методика, описанная в ряде работ со схожим направлением [1, 2], является одной из классических методов изучения комплексообразования. Установлено, что добавление ЦД в водные растворы кислоты приводит к гипсохромным сдвигам максимумов полос поглощения и увеличению их интенсивностей, что свидетельствует об образовании комплексных соединений. Методом изомольярных серий был определен состав комплексов, который оказался равным 1:1 для всех комплексов. С помощью метода молярных отношений рассчитаны константы устойчивости комплексных соединений α -ЦД...ОК, β -ЦД...ОК, γ -ЦД...ОК и термодинамические параметры комплексообразования.

Литература

1. Кутлугильдина Г.Г., Рамазанова З.Ф., Зимин Ю.С. // Бутлеровские сообщения. 2019. т. 58. № 4. С. 77-84.
2. Зимин Ю.С., Кутлугильдина Г.Г., Рамазанова З.Ф., Мустафин А.Г. // Журнал физической химии. 2022. т. 96. № 8. С. 1159-1164.

© Фатхулова А.М., 2025

УДК 544.42

РОЛЬ ТОПОЛОГИИ ПОР ЦЕОЛИТОВ НА ИХ КАТАЛИТИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ В РЕАКЦИИ АМИНО-КЛЯЙЗЕНА

Фахретдинов Д.Ш., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В ходе исследования влияния пористых материалов (цеолитов) на кинетические параметры и селективность перициклических реакций была установлена корреляция между структурными характеристиками цеолитов и

скоростью протекания перегруппировки amino-Кляйзена на примере N-(1-метилбут-2-ен-1-ил)анилина. Кинетический анализ реакции перегруппировки N-(1-метилбут-2-ен-1-ил)анилина в 2-(1-метилбут-2-ен-1-ил)анилин выявил экстремальную зависимость константы скорости реакции от диаметра пор цеолитов (рис. 1). Изучение реакции проводилось с использованием метода формальной кинетики при температуре 130 °С в присутствии 5% масс. цеолита. Анализ проводился с использованием газовой хроматографии с внутренним стандартом – орто-ксилолом.

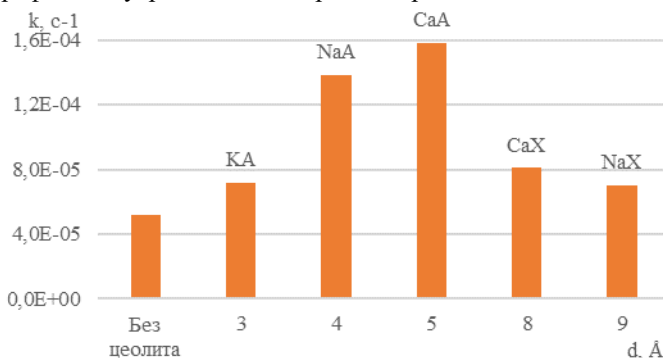


Рис. 1. Зависимость константы скорости накопления орто-замещенного продукта реакции перегруппировки N-(1-метилбут-2-ен-1-ил)анилина от диаметра пор цеолитов (образование пара-замещенного продукта наблюдалось в минорных количествах)

Как следует из представленных данных, наблюдается выраженная зависимость скорости образования продукта перегруппировки от размера пор цеолитной матрицы. Такой экстремальный характер зависимости, с наибольшей каталитической активностью зафиксированной для цеолита CaA (5 Å), может быть объяснен эффектом пространственного ограничения, приводящим к оптимальной стабилизации как переходного состояния [3,3]-перегруппировки, так и конечного продукта реакции.

© Фахретдинов Д.Ш., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф., 2025

УДК 544.723.23

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ДИАМЕТРА ПОР ЦЕОЛИТОВ НА ЭНЕРГИЮ СТАБИЛИЗАЦИИ РЕАКЦИИ АМИНО-КЛЯЙЗЕНА

Фахретдинов Д.Ш., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

По ранее известной методике [1] нами было проведено теоритическое исследование влияния диаметра пор цеолитов на энергию стабилизации

переходного состояния (ПС) реакции перегруппировки N-(1-метилбут-2-ен-1-ил)анилина (N-AA) в 2-(1-метилбут-2-ен-1-ил)анилин. Расчеты проводились в программе Materials Studio при помощи симуляции адсорбции. В качестве адсорбентов были взяты цеолиты: КА (3 Å), NaA (4 Å), CaA (5 Å), CaX (8 Å), NaX (9 Å). Чем ниже рассчитанная энергия адсорбции, тем выше стабилизация ПС в полости цеолита. Симуляция адсорбции показала экстремальную зависимость энергии стабилизации с максимумом в присутствии цеолита CaA (5 Å) (рис. 1).

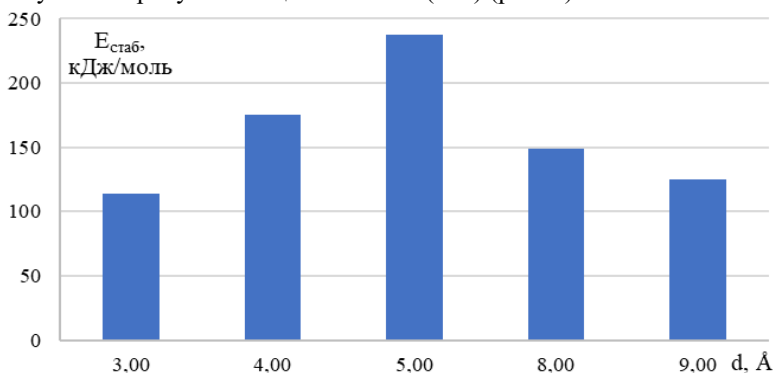


Рис. 1. Зависимость энергии стабилизации переходного состояния реакции перегруппировки N-AA ($E_{\text{стаб}}$, кДж/моль) от диаметра пор цеолитов (d, Å)

Литература

1. Якупов И.Ш., Фахретдинов Д.Ш., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф. // Проблемы и достижения химии кислород- и азотсодержащих биологически активных соединений: Сборник тезисов VII Всероссийской молодежной конференции, Уфа, 23–24 ноября 2023 года. – Уфа: Уфимский университет науки и технологий, 2023. – С. 213.

© Фахретдинов Д.Ш., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф., 2025

УДК 544.653.1

ПЛАЗМЕННО-ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОЧНЫХ $\text{TiO}_2\text{-CoMoO}_4$ ГЕТЕРОСТРУКТУР

Федорова С.А.¹, Васильева М.С.^{1,2}

¹Дальневосточный федеральный университет, Владивосток, Россия

²Институт химии ДВО РАН, Владивосток, Россия

Загрязнение вод сточными водами высокотоксичными органическими веществами является актуальной экологической проблемой, наносящей вред экосистемам и здоровью человека. Разработка эффективных методов их

разрушения становится приоритетной задачей. Перспективными технологиями являются безреагентные методы очистки, такие как "advanced oxidation processes" (AOPs), в частности гетерогенный фотокатализ, который обеспечивает высокую минерализацию органических веществ при низких температурах с использованием солнечной энергии.

Диоксид титана (TiO_2) — наиболее изученный фотокатализатор, однако его применение ограничено низкой фото-квантовой эффективностью и отсутствием активности при видимом свете [1]. Перспективной стратегией повышения активности TiO_2 является создание на его основе различных гетероструктур, в том числе $\text{TiO}_2\text{-CoMoO}_4$ [2].

Одним из технологичных методов, позволяющих в одну стадию получать гибридные покрытия на титане является метод плазменно-электролитического оксидирования (ПЭО) – электрохимическое окисление поверхности металлов в условиях действия электрических разрядов.

Целью настоящей работы было одностадийное формирование $\text{TiO}_2\text{-CoMoO}_4$ оксидных слоев и исследование их фотокаталитических свойств.

Оксидные слои формировали в гальваностатическом режиме при плотности тока 0.1 и 0.2 А/см² в течение 10 мин. В качестве электролита использовали суспензию, приготовленную на основе 0.1 М Na_2SiO_3 с добавками порошка CoMoO_4 (5 г/л) и лаурилсульфат натрия (0.5 г/л).

Рентгенофазовый анализ показал, что все покрытия включают в состав оксид титана в модификациях рутил и анатаз и оксид молибдена. Кристаллическая фаза молибдата кобальта не обнаружена.

Фотокаталитические свойства сформированных покрытий изучали на примере реакции деградации метилового оранжевого МО (10 мг/л) в присутствии 10 ммоль/л H_2O_2 в условиях освещения солнечным и УФ светом. Исследования показали, что эффективность деградации МО на фотокаталитическом покрытии, сформированном при плотности тока 0.2 А/см² достигает 33% и 68 % под действием солнечного и УФ света.

Работа выполнена в рамках государственного задания Института химии ДВО РАН FWFN (0205)-2025-0001.

Литература

1. Armaković S.J., Savanović M.M., Armaković S. Titanium dioxide as the most used photocatalyst for water purification: an overview // Catalysts. 2022. Vol. 13. Paper number 26.
2. Rafieezadeh M., Kianfar A.H., Fabrication of heterojunction ternary $\text{Fe}_3\text{O}_4/\text{TiO}_2/\text{CoMoO}_4$ as a magnetic photocatalyst for organic dyes degradation under sunlight irradiation // J. Photochem. Photobiol. A: Chem. 2022. Vol. 423. Paper number 113596.

© Федорова С.А., Васильева М.С., 2025

СИНТЕЗ И АНТИКОРРОЗИОННЫЕ СВОЙСТВА ТЕТРАГИДРОХИОЛИНОВ

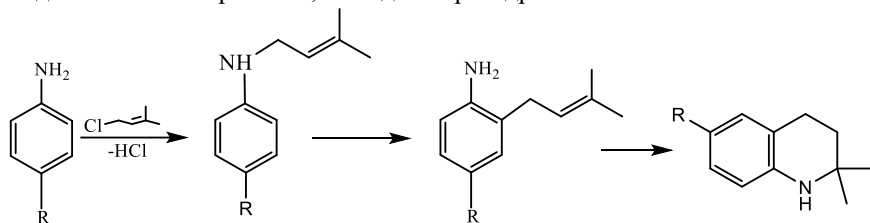
Хуснитдинов К.Р.¹, Азнабаева М.Р.²

¹Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Некоторые производные хинолинов обладают высокой ингибирующей активностью в кислых средах [1].

Нами синтезирован ряд тетрагидрохинолинов, которые испытаны в качестве ингибиторов коррозии в среде неорганических кислот. Синтез осуществляли взаимодействием производных анилина с 1-хлор-3-метил-2-бутеном, полученным, в свою очередь, гидрохлорированием изопрена при комнатной температуре. Реакция протекает через стадию N-алкенилирования анилина с последующей амино-перегруппировкой Кляйзена [2] с переносом алкенильного заместителя в орто-положение с дальнейшей циклизацией, весь процесс протекает в одинаковых условиях при температуре 130-150°C, катализатором является HCl, выделяющаяся на стадии N-алкенилирования, выходы тетрагидрохинолинов около 60%.



R=H, Br, Me, OMe, OEt

Рис. 1. Схема синтеза тетрагидрохинолинов

Выходы тетрагидрохинолинов значительно выше (более 80%), если выделить образовавшийся на 1-ой стадии N-замещенный аддукт и осуществить дальнейший процесс в растворе ксилола под действием катализаторов Льюиса, лучше всего $ZnCl_2$ и $AlCl_3$.

Полученные замещенные 1,2,3,4-тетрагидрохинолины проявили высокий защитный эффект (90-96%) в качестве ингибиторов коррозии стали в среде минеральных кислот.

Литература

1. Рахманкулов Д.Л., Зенцов В.Н., Гафаров Н.А., Бугай Д.Е., Габитов А.И., Латыпова Ф.Н. Ингибиторы коррозии. Т.3. – М.: Интер, 2005. – 346 с.
2. Абдрахманов И.Б., Гимадиева А.Р., Мустафин А.Г., Шарафутдинов В.М. Амино-перегруппировка Кляйзена и превращения орто- алкенилариламинов. – М.: Наука, 2020. – 256 с.

© Хуснитдинов К.Р., Азнабаева М.Р., 2025

БАКТЕРИЦИДЫ НА ОСНОВЕ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ N-АЛКЕНИЛАРИЛАМИНОВ

Хуснитдинов К.Р.¹, Азнабаева М.Р.²¹Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Четвертичные аммонийные соли демонстрируют высокую эффективность в борьбе с сульфатовосстанавливающими бактериями (СВБ) [1].

В данном исследовании с использованием различных индексов реакционной способности, рассчитанных в приближении B3LYP/631G(d,p) [2], и регрессионного анализа были спрогнозированы соединения, которые обладают бактерицидной активностью в ряду аммонийных солей алкенилариламинов. Среди синтезированных потенциально активных соединений наибольшей бактерицидной активностью обладают – аммонийные соли N-(2-пропенил)-N-(1-метил-2-бутенил)анилина и N-(2-пропенил)-N-(1-метил-2-бутенил)-4-метиланилина.

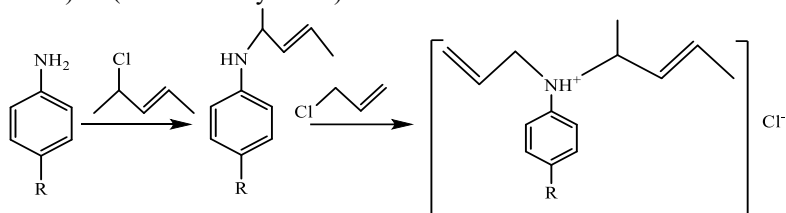


Рис. 1. Схема синтеза аммонийных солей

Бактерицидная активность полученных соединений была изучена в средах, максимально приближенных к реальным промышленным условиям. По результатам проведенных исследований данные соединения рекомендованы к опытно-промышленным испытаниям.

Литература

1. Андресон Р.К., Эфенди-заде С.М. Бактерициды для борьбы с биокоррозией в нефтегазовой промышленности. – М.: ВНИИОЭНГ, 1989. – 87 с.
2. Rassolov V., Pople J.A., Ratner M., Windus T.L. 6-31G* basic set for atoms K through Zn|| J.Chem, Phys. – 1998. – V. 109. – P. 1223-1229.

©Хуснитдинов К.Р., Азнабаева М.Р., 2025

СИНТЕЗ И АНТИКОРРОЗИОННЫЕ СВОЙСТВА ОРТО-АЛКЕНИЛАРИЛАМИНОВ

Хуснутдинов К.Р.¹, Азнабаева М.Р.²

¹Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

²Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Удобным методом внедрения непредельных заместителей в орто-положение ароматических аминов является amino-перегруппировка Кляйзена [1,2]. Ряд полученных соединений проявляют себя как биологически активные вещества [3], некоторые из них являются ингибиторами коррозии стали [4].

Нами синтезирован ряд соединений взаимодействием 3-хлорциклопентена и ароматических аминов в избытке последних в качестве растворителя. На первой стадии происходит N-алкенилирование ариламинов, образующиеся N-циклопентенилариламины под каталитическим действием выделяющегося в ходе реакции HCl гладко перегруппировываются в орто-замещенные изомеры.

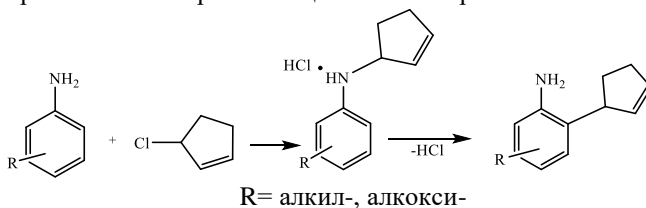


Рис. 1. Схема синтеза орто-замещенных изомеров N-циклопентенилариламинов

Реакцию можно остановить на стадии N-алкенилирования, если ее проводить в среде триэтиламина.

Установлено, что некоторые из полученных соединений являются эффективными ингибиторами коррозии стали в среде неорганических кислот. Защитный эффект достигает 96%.

Литература

1. Castro A.M.M. // Chem.ReN. – 2004. – V. 194. – № 6. – P. 2939-3002.
2. Абдрахманов И.Б., Гимадиева А.Р., Мустафин А.Г., Шарафутдинов В.М., Аминоперегруппировка Кляйзена и превращения орто-алкенилариламинов. – М.: Наука, 2020. – 256 с.
3. Хуснутдинов Р.Н., Докичев В.А., Хуснутдинов К.Р. и др. // Башкирский химический журнал. – 2015. – Т. 22. – №4. – с. 46-49.
4. Хуснутдинов Р.Н., Хамитов Э.М., Хуснутдинов К.Р. и др. // Журнал прикладной химии. – 2012. – Т. 85. – № 8. – С. 1243-1246.

© Хуснутдинов К.Р., Азнабаева М.Р., 2025

ОБРАЗОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ ВКЛЮЧЕНИЯ ЦИКЛОДЕКСТРИНОВ С ИЗОНИАЗИДОМ

Чернобровкина В.И., Огнева А.С.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Изониазид – это антибиотик, который является важным средством в борьбе с туберкулезом. Однако препарат способен провоцировать целый ряд нежелательных явлений, таких как поражение печени, неврологические осложнения, аллергические проявления, нарушения психической сферы и другие побочные эффекты. Иммобилизация изониазида в молекулярные торы циклодекстринов представляется интересным подходом, позволяющим уменьшать токсичность изониазида и улучшать его фармакологические свойства. Циклодекстрины, обладая своей уникальной структурой, могут образовывать комплексы включения с различными молекулами, включая лекарственные средства. Поэтому, благодаря комплексообразованию изониазида с циклодекстринами, ожидается увеличение растворимости и биодоступности, повышение стабильности, уменьшение токсичности, снижение влияния внешних факторов и улучшение биологической активности.

С целью изучения комплексообразования изониазида с α -, β -, γ -циклодекстринами был использован спектрофотометрический метод. Методика эксперимента подробно описана в работе [1]. Спектры регистрировались на спектрофотометре Shimadzu UV-2401PC в диапазоне длин волн 190-360 нм. Концентрации всех компонентов находились в пределах 10^{-4} - 10^{-5} моль/л. Установлено, что УФ-спектр изониазида имеет одну полосу поглощения при 266 нм. При добавлении растворов циклодекстринов к раствору изониазида на спектрах наблюдали характерные для образования новых соединений изменения: сдвиг максимумов пиков полос поглощения как по оси λ (длина волны), так и по оси A (оптическая плотность).

Методом молярных отношений были установлены состав всех изучаемых комплексов и константы устойчивости. Оказалось, что устойчивость комплексов с ростом температуры снижалась, а состав, равный 1:1 – не менялся. Отрицательные значения рассчитанных термодинамических параметров комплексообразования указывают на тот факт, что все изученные реакции протекают самопроизвольно, с выделением тепла и с ограничениями колебательных и вращательных движений молекул.

Литература

1. Зимин Ю.С., Кутлугильдина Г.Г., Рамазанова З.Ф., Мустафин А.Г. Взаимодействие окисленной фракции поливинилового спирта с производными

УДК 544.4

РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ {3-[(10Н-ФЕНОТИАЗИН-2-ИЛ-КАРБОНИЛ) АМИНО]ПРОПИЛ}(ТРИФЕНИЛ)ФОСФОНИУМ БРОМИДА
В КАЧЕСТВЕ ИНГИБИТОРА РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОГО ОКИСЛЕНИЯ
1,4-ДИОКСАНА

Шараева К.С., Сафарова И.В.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Известно, что избыточное содержание свободных радикалов в организме человека является негативным фактором, приводящем к развитию различных патологических процессов [1]. В настоящее время в фармакологии большое значение придается поиску лекарственных препаратов, которые наряду с целевым действием оказывают затормаживающую активность образования свободных радикалов и, как следствие, увеличивают эффективность соединения в качестве лекарства [2]. С целью изучения производного фенотиазина на антиокислительную активность были определены кинетические параметры ингибирования {3-[(10Н-фенотиазин-2-ил-карбонил) амино]пропил}(трифенил)фосфониум бромид на примере модельной реакции радикально-цепного окисления 1,4-диоксана.

Кинетический эксперимент проводили с использованием высокочувствительной дифференциальной установки при $T=348$ К и скорости иницирования $V_i = 2.4 \cdot 10^{-7}$ М/с в присутствии инициатора азодиизобутиронитрила (АИБН). Ингибирующую эффективность производного фенотиазина оценивали по скорости поглощения кислорода при окислении субстрата в присутствии добавок исследуемого соединения. С увеличением концентрации добавок производного фенотиазина скорость поглощения кислорода уменьшается (рис.1). Полученные данные свидетельствуют о том, что изученное соединение проявляет антиокислительные свойства.

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

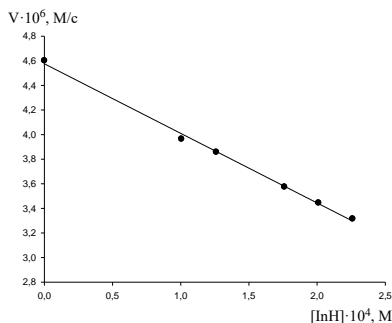


Рис. 1. Зависимости скорости окисления 1,4-диоксан от концентрации введенного исследуемого соединения. $T = 348 \text{ K}$, $V_i = 2.4 \cdot 10^{-7} \text{ M/c}$

Литература

1. Halliwell B., Chirico S. Lipid peroxidation: its mechanism, measurement, and significance //The American journal of clinical nutrition. – 1993. – V. 57. – №. 5. – P. 715-725.
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. – №. 1. – P. 1-9.

© Шараева К.С., Сафарова И.В., 2025

УДК 544.4

АНТИРАДИКАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ N-(10Н-ФЕНОТИАЗИН-2-ИЛ-МЕТИЛ)ОКТАНАМИДА НА ПРИМЕРЕ МОДЕЛЬНОЙ РЕАКЦИИ ИНИЦИИРОВАННОГО ОКИСЛЕНИЯ 1,4-ДИОКСАНА

Шараева К.С., Сафарова И.В.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Окислительный стресс является одним из возможных факторов развития психических расстройств, в том числе депрессии, тревожных расстройств, шизофрении и маниакально-депрессивного психоза. Среди препаратов нейролептического действия в терапии успешно применяются производные фенотиазина [1]. Изучение биологической активности представителей фенотиазинового ряда является актуальной задачей для получения более эффективного фармакологического действия соединения в качестве лекарственного препарата [2]. С целью изучения антирадикальной активности производных фенотиазина были определены кинетические закономерности ингибирующего действия N-(10Н-фенотиазин-2-ил-

метил)октанамида на примере модельной реакции инициированного окисления 1,4-диоксана.

Антирадикальную активность производного фенотиазина изучали по скорости поглощения кислорода в присутствии добавок N-(10Н-фенотиазин-2-ил-метил)октанамида. Кинетический эксперимент проводили при $T=348\text{ K}$ и скорости инициирования $V_i = 2.4 \cdot 10^{-7}\text{ M/c}$ в присутствии инициатора азодиизобутиронитрила (АИБН). Установлено, что введение добавок исследуемого соединения в различных концентрациях приводит к снижению скорости поглощения кислорода и появлению выраженного периода индукции на кинетических кривых (рис. 1), что свидетельствует о способности изученного соединения проявлять сильные антирадикальные свойства.

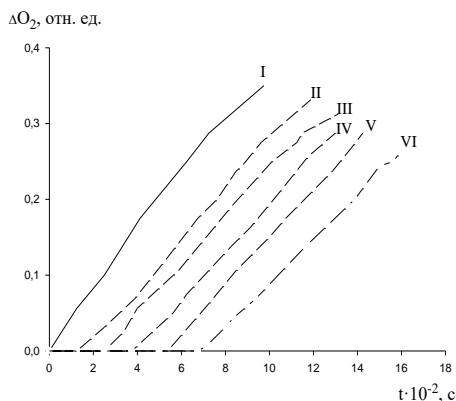


Рис.1. Кинетические кривые поглощения кислорода при окислении 1,4-диоксана в отсутствии [I] и присутствии добавок: [II]· $10^4\text{ M} = 0.76$; [III]= 1.01; [IV]= 1.27; [V]= 1.52; [IV]= 1.77.
 $T = 348\text{ K}$, $V_i = 2.4 \cdot 10^{-7}\text{ M/c}$

Исследование выполнено при поддержке гранта Российского научного фонда № 19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

Литература

1. Edinoff A. N. et al. Phenothiazines and their evolving roles in clinical practice: A narrative review //Health psychology research. – 2022. – V. 10. – №. 4. – P. 38930.
2. Gopi C., Dhanaraju M. D. Recent progress in synthesis, structure and biological activities of phenothiazine derivatives //Review Journal of Chemistry. – 2019. – V. 9. – P. 95-126.

© Шараева К.С., Сафарова И.В., 2025

УДК 544.4

N-(9-{[АМИНО(ИМИНО)МЕТИЛ]АМИНО}ОКТИЛ)-10Н-ФЕНОТИАЗИН-2-КАРБОКСАМИД ГИДРОХЛОРИД В КАЧЕСТВЕ ИНГИБИТОРА РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОГО ОКИСЛЕНИЯ ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА

Шараева К.С., Селуянова А.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Фенотиазин и его производные представляют собой перспективный класс соединений для исследований в различных направлениях химии [1]. Известно, что в химической технологии некоторые представители фенотиазинового ряда успешно применяются в качестве антикоррозионных ингибирующих соединений различных сплавов, а в медицинской химии как синтетически значимые соединения с широким спектром биологической активности [1, 2]. В связи с изложенным, целью данной работы является изучение потенциальной ингибирующей способности окисления N-(9-{[амино(имино)метил]амино}октил)-10Н-фенотиазин-2-карбоксамид гидрохлорида (InH) на примере радикально-цепной реакции инициированного окисления 1,4-диоксана.

Ингибирующую эффективность (InH) изучали с помощью высокочувствительной манометрической дифференциальной установки (УМД). Жидкофазное окисление проводили на примере модельной реакции окисления изопропилового спирта в условиях эксперимента ($T = 348\text{K}$, скорость инициирования $V_i = 2.4 \cdot 10^{-7} \text{ М/с}$, инициатор – азодиизобутиронитрил). Установлено, что с увеличением концентрации добавок исследуемого фенотиазина скорость поглощения кислорода уменьшается (рис.1). Полученные кинетические параметры позволяют отнести N-(9-{[амино(имино)метил]амино}октил)-10Н-фенотиазин-2-карбоксамид гидрохлорид к классу сильных антиоксидантов.

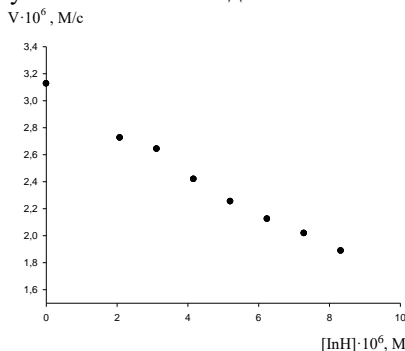


Рис. 1. Зависимости скорости окисления изопропилового спирта от концентрации введенного исследуемого соединения. $T = 348 \text{ K}$, $V_i = 2.4 \cdot 10^{-7} \text{ М/с}$

Литература

1. Varga B., Csonka A., Molnar J., Amaral L., Spengler G. Possible biological and clinical applications of phenothiazines // *Anticancer research*. 2017. – V. 37. – №.11. – P. 5983-5993.
2. Bostan R., et al. Evaluation of some phenothiazine derivatives as corrosion inhibitors for bronze in weakly acidic solution // *Corrosion Science*. 2012. – V. 63. – P. 275-286.

© Шараева К.С., Селуянова А.А., 2025

УДК 544.4

АНТИОКИСЛИТЕЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ ПРОИЗВОДНЫХ ЦИКЛОГЕКСАНОНА В РЕАКЦИИ ИНИЦИИРОВАННОГО ОКИСЛЕНИЯ 1,4-ДИОКСАНА

Шараева К.С., Сафарова И.В., Охиров Ш.М., Латыпова Э.Р.
Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Циклогексанон и его производные являются перспективными соединениями, используемые в промышленности и органическом синтезе в качестве исходных материалов для получения биологически значимых соединений [1]. В настоящее время известны производные циклогексанона, обладающие антимикробными, антигрибковыми и противосудорожными свойствами [2]. С целью дальнейшего выявления биологической активности соединений данного ряда были изучены кинетические закономерности антиокислительной активности 2,4-диоксаспиро[5.5]ундекан-7-она и оксима 2,4-диоксаспиро[5.5]ундекан-7-он на примере модельной реакции инициированного окисления 1,4-диоксана.

Кинетический эксперимент проводили с использованием универсальной манометрической дифференциальной установки (УМД) при $T=348$ К и скорости инициирования $V_i = 2.4 \cdot 10^{-7}$ М/с в присутствии инициатора азодиизобутиронитрила (АИБН). Антиокислительную активность оценивали по скорости поглощения кислорода при окислении субстрата в присутствии исследуемых соединений. Из кинетических кривых поглощения кислорода, представленных на рисунке 1, следует, что с увеличением концентраций добавок оксима 2,4-диоксаспиро[5.5]ундекан-7-он скорость поглощения кислорода уменьшается. Введение добавок 2,4-диоксаспиро[5.5]ундекан-7-она в окисляющийся субстрат не приводит к снижению скорости поглощения кислорода. Полученные результаты свидетельствуют о способности оксима 2,4-диоксаспиро[5.5]ундекан-7-он выступать в качестве антиоксиданта.

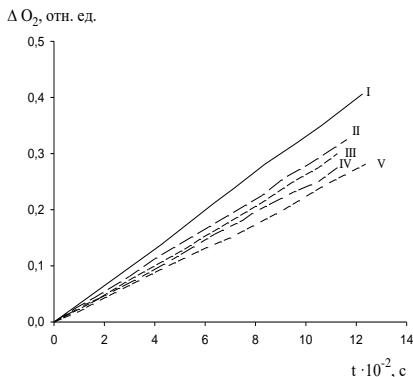


Рис. 1. Кинетические кривые поглощения кислорода при окислении 1,4-диоксана в отсутствии [I] и присутствии добавок оксим 2,4-диоксаспиро[5.5]ундекан-7-она, взятых в концентрациях: [II]·10⁴ М = 0.77; [III] = 2.05; [IV] = 3.85; [V] = 5.14. Т = 348 К, V_i = 2.4·10⁻⁷ М/с

Литература

1. Das M., Manna K. Bioactive cyclohexenones: a mini review //Current Bioactive Compounds. – 2015. – V. 11. – №. 4. – P. 239-248.
2. Сергей Л., Паносян Г.А., Джагацпаян И.А., Назарян И.М., Акопян А. Г. Синтез и противосудорожная активность некоторых производных циклогексанола – продуктов конденсации Кнёвенагеля //Химико-фармацевтический журнал. – 2020. – V. 54. – №. 9. – P. 15-21.

© Шараева К.С., Сафарова И.В., Охиров Ш.М., Латыпова Э.Р., 2025

УДК 544.4

АНТИОКСИДАНТНАЯ СПОСОБНОСТЬ ОКСИМА 2,4-ДИОКСАСПИРО[5.5]УНДЕКАН-7-ОНА НА ПРИМЕРЕ МОДЕЛЬНОЙ РЕАКЦИИ ИНИЦИИРОВАННОГО ОКИСЛЕНИЯ ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА

Шараева К.С., Гайсина Л.Д., Охиров Ш.М., Латыпова Э.Р.
Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Известно, что антиоксиданты препятствуют процессу окисления, вступая в реакцию со свободными радикалами. Применение стандартных антиоксидантов, таких как бутилгидрокситолуол и тролос, способствует уменьшению окислительного стресса и снижению риска развития патологических процессов в живом организме [1]. Недавние исследования показали, что некоторые производные оксимов обладают антиоксидантной активностью, значения эффективности которой превышает значения для стандартных антиоксидантов [2]. В данной работе были изучены количественные параметры антиоксидантного действия оксима 2,4-

диоксаспиро[5.5]ундекан-7-он на примере модельной реакции инициированного окисления изопропилового спирта.

Кинетический эксперимент проводили при $T=348$ К и скорости инициирования $V_i = 2.4 \cdot 10^{-7}$ М/с в присутствии инициатора азодиизобутиронитрила (АИБН) с использованием универсальной манометрической дифференциальной установки (УМД). Эффективность антиоксидантного действия оценивали по скорости поглощения кислорода в присутствии добавок оксима 2,4-диоксаспиро[5.5]ундекан-7-он. С увеличением концентрации вводимых добавок антиоксиданта скорость поглощения кислорода уменьшается (рис.1), что свидетельствует о способности изученного соединения выступать в качестве ингибитора окислительного процесса.

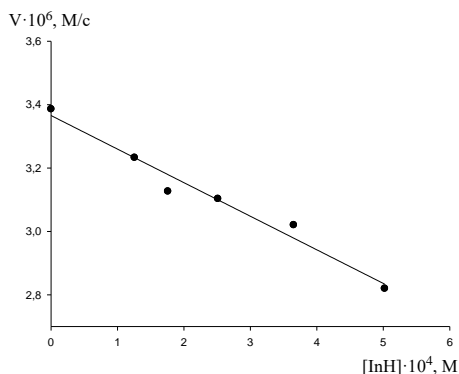


Рис. 1. Зависимости скорости окисления изопропилового спирта от концентрации введенного исследуемого соединения. $T = 348$ К, $V_i = 2.4 \cdot 10^{-7}$ М/с

Литература

1. Huang S.W., Hopia A., Schwarz K., Frankel E.N., German J.B.. Antioxidant activity of α -tocopherol and trolox in different lipid substrates: bulk oils vs oil-in-water emulsions //Journal of Agricultural and Food Chemistry. – 1996. – V. 44. – №. 2. – P. 444-452.
2. Ozen T., Tas M. Screening and evaluation of antioxidant activity of some amido-carbonyl oxime derivatives and their radical scavenging activities //Journal of Enzyme Inhibition and Medicinal Chemistry. – 2009. – V. 24. – №. 5. – P. 1141-1147.

© Шараева К.С., Гайсина Л.Д., Охиров Ш.М., Латыпова Э.Р., 2025

ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ АНТИКОАГУЛЯНТЫ НА ОСНОВЕ РЯДА
ПРОИЗВОДНЫХ 4-ФЕНИЛ-3,4-ДИГИДРО-2Н-ПИРИМИДИН-2-ТИОНА

Шарипова Е.Е., Хайруллина В.Р., Максимов Л.С.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Метод молекулярного докинга широко применяется для моделирования взаимодействия малых молекул в месте их связывания с белками-мишенями. В конечном итоге, он позволяет выяснять базовые аспекты механизма реализации биохимических процессов.

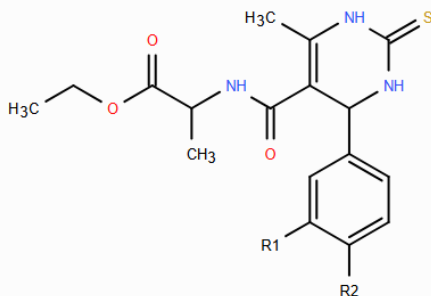


Рис. 1. Общая структурная формула моделируемых соединений

В данной работе метод молекулярного докинга использован для изучения аффинности связывания 5 производных 4-фенил-3,4-дигидро-2Н-пириимидин-2-тиона (рис. 1) с активным центром тромбина человека. Эти соединения перспективны в качестве потенциальных лекарственных средств широкого спектра действия, что обуславливает необходимость оценки их антикоагулянтных свойств. Учитывая стереоизомерию, было смоделировано 20 лигандов. В качестве модели тромбина использовали макромолекулу из базы PDB с кодом 1ta6 (цепь А) [1]. Позиционирование лигандов в активном центре белка и расчет энергии связывания (E_{bind}) выполнялись с помощью программы AutoDock Vina [2]. Сравнительный анализ значений E_{bind} показал, что 17 из 20 исследованных лигандов обладают умеренной аффинностью к активному центру тромбина и потенциально могут ингибировать его активность по конкурентному механизму.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

Литература

1. <https://www.rcsb.org/structure/1TA6>
2. <https://github.com/ccsb-scripps/AutoDock-Vina/>

© Шарипова Е.Е., Хайруллина В.Р., Максимов Л.С., 2025

СЕКЦИЯ
«ХИМИЯ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ
СОЕДИНЕНИЙ»

ИЗУЧЕНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РАСТВОРОВ СМЕСЕЙ
ПЕКТИНА И ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА

Аббарова Р.Р.

(руководитель: Лаздин Р.Ю.)

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Известно, что эффективным способом регулирования надмолекулярной и морфологической структуры является формирование пленочных материалов из растворов смесей полимеров. Учитывая, что структурные особенности полимерных материалов во многом определяют их потребительские свойства и перспективы использования в той или иной области, установление взаимосвязи между составом формовочной композиции и свойствами формируемого пленочного материала остается важной и перспективной задачей.

В данной работе исследованы водные растворы двух физиологически активных полимеров – пектина (ПК) и поливинилового спирта (ПВС). В качестве основного метода исследования был выбран реологический метод. Измерения проводили на модульном динамическом реометре Haake Mars III (Thermo Fisher Scientific, США) в осцилляционном режиме при температуре 25 °С в диапазоне амплитуд от 0,1 до 10 Па и частот осцилляции от 0,1 до 10 Гц.

В ходе проведения работы установлено, что смешение растворов двух полимеров всякий раз сопровождается формированием агрегатов из макромолекул. Однако природа этих агрегатов различна в зависимости от концентрации смешиваемых полимеров [1]. Так если для приготовления пленочного материала были использованы разбавленные или полуразбавленные растворы полимеров, то формируются так называемые гомоагрегаты : ПВС-ПВС и ПК-ПК. Если же для приготовления пленочного материала были использованы более концентрированные растворы, то формируются гетероагрегаты ПВС-ПК. В ходе проведения работа было однозначно показано, что свойства формируемого материала будут существенно различаться в зависимости от того, из каких агрегатов –гомо или гетеро сформирован пленочный материал.

Литература:

1. Chernova V.V., Lazdina M.Yu., Shurshina A.S., Kulish E.I. determination of the type of aggregates in mixture solutions of some polymers. Vestnik Bashkirskogo Universiteta. 2021. Т. 26. № 2. С. 425-427.

© Аббарова Р.Р., 2025

СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИМЕРНЫХ МАТРИКСОВ НА
ОСНОВЕ НАТРИЕВОЙ СОЛИ N-СУКЦИНИЛХИТОЗАНА

Алмаев Б.Ф.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Современные ранозаживляющие материалы, предложенные в качестве альтернативы традиционным текстильным повязкам, не получили активное распространение в клинической практике из-за ряда существенных проблем. Одной из таких проблем является необходимость управления сорбционными свойствами материала, таких как скорость сорбции растворителя или адсорбционная емкость, так как они определяют степень набухания повязки в экссудате раны и скорость выхода из повязки лекарственных препаратов. Классическим подходом к модификации свойств полимерного материала является создание полимерных смесей, что позволяет управлять свойствами смеси за счет варьирования её состава. Целью данной работы стало изучение возможности управления сорбционными свойствами ранозаживляющих полимерных матриксов на основе натриевых солей N-сукцинилхитозана (СХТЗ) и карбоксиметилцеллюлозы (КМЦ).

Полимерные матриксы получали методом лиофильной сушки водных растворов полимерных смесей различных составов. растворителя (бидистиллированной воды) проводили эксикаторным методом при постоянной температуре (25°C) и 100% влажности воздуха. Относительное количество воды m_t , поглощаемое матриксом к моменту времени t , определяли весовым методом, выдерживая образцы в эксикаторе в парах воды в течение определенного времени t и рассчитывали по формуле:

$$m_t = \frac{\Delta m_t}{m_0} * 100\%, \text{ где } m_0 - \text{исходная масса полимера в матриксе, } \Delta m_t -$$

разница между массой матрикса в момент времени t и исходной массой полимера в образце. Адсорбционная емкость матриксов по метиленовому голубому была определена в соответствии с ГОСТ 4453-74.

Анализ влияния состава полимерных смесей на сорбционные свойства получаемых материалов (рис. 1) показывает, что для индивидуального СХТЗ наблюдается неограниченное набухание, переходящее в растворение. При этом для материалов на основе индивидуального КМЦ и полимерной смеси СХТЗ и КМЦ характерно ограниченное набухание с достижением равновесной степени сорбции. Можно также отметить, что увеличение относительного содержания КМЦ в смеси закономерно уменьшает равновесную степень сорбции, за счет более низкого значения равновесной степени сорбции материала на основе индивидуального КМЦ. Вместе с тем, анализ значений адсорбционной емкости (табл. 1) демонстрирует более высокие значения таковой для материалов на основе индивидуального КМЦ

и полимерных смесей с высоким содержанием КМЦ относительно материалов на основе индивидуального СХТЗ.

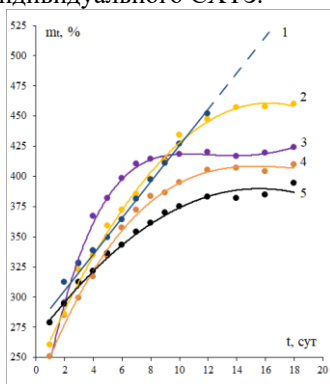


Рис. 1. Зависимость относительного количества воды, поглощаемого полимерными матриксами различных составов от времени сорбции (% масс.): СХТЗ : КМЦ = 100 : 0 (1), 90 : 10 (2), 80 : 20 (3), 70 : 30 (4), 0 : 100 (5)

Таблица 1

Адсорбционная емкость по метиленовому голубому для полимерных матрицков различных составов.

Составы полимерных смесей (СХТЗ : КМЦ), % масс.	Адсорбционная емкость по метиленовому голубому, мг/г
100 : 0	209
90 : 10	250
80 : 20	293
70 : 30	307
0 : 100	401

Низкие значение скорости сорбции и равновесной степени сорбции в совокупности с высоким значением адсорбционной емкости могут сделать подобные материалы перспективными с точки зрения создания ранозаживляющих материалов с пролонгированным выходом лекарственных средств в среду раны. Таким образом, показана возможность управления сорбционными свойствами материалов на основе натриевой соли N-сукцинилхитозана за счет создания полимерных смесей с натриевой солью карбоксиметилцеллюлозы и за счет варьирования количественного состава смеси.

Литература

1. Bazunova M. V. et al. //Polymer Science, Series B. – 2023. – Т. 65. – № 1. С. 50.

© Алмаев Б.Ф., 2025

СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ГИДРОГЕЛЯ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА ДЛЯ ГИБКИХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ СЕНСОРОВ

Анисимова М.М., Фомина Е.Д., Рябков Е.Д., Гервальд А.Ю.

МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких химических технологий им. Ломоносова, Москва, Россия

В настоящее время можно наблюдать существенный прогресс в области гибкой электроники с использованием гидрогелей в качестве материалов для гибких носимых устройств. В работе изучен синтез гидрогелевой матрицы на основе природного полимера – хитозана [1].

Для синтеза хитозанового гидрогеля смешивали раствор хитозана с раствором альгината натрия. В качестве сшивающего агента использовали глутаровый альдегид, в качестве катализатора – соляную кислоту [2].

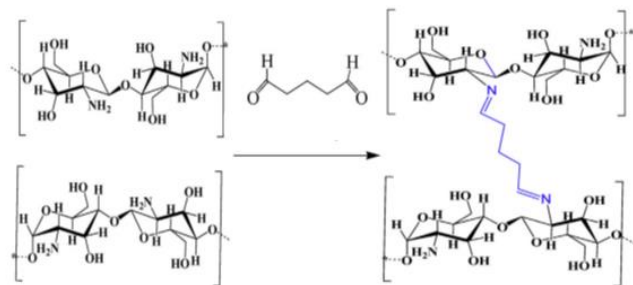


Рис. 1. Механизм получения хитозанового гидрогеля в присутствии глутарового альдегида

Также в работе были получены гидрогелевые матрицы с иммобилизованным пилокарпином. Такие материалы можно использовать в системах доставки активных компонентов методом ионофореза. Пилокарпин был выбран как активное вещество для стимуляции выработки пота, в котором затем определяют концентрацию глюкозы.

В качестве наполнителя использовали углеродные нанотрубки. Их введение позволяет достигнуть токопроводящих свойств, за счет чего будет повышена эффективность контролируемого выхода фермента.

Для определения токопроводящих свойств с помощью вольтамперометрического анализа полученные гидрогели в виде тонких пленок наносили на медные электроды. В качестве фоновой жидкости использовали 0,1 М NaOH. Проводимость мембран оценивали по величине разницы значений токов максимума и минимума анодной ветви вольтамперограммы и разрешенности пиков, соответствующих переходам $\text{Cu}^0 \rightarrow \text{Cu}^+$ при потенциале -400 мВ и $\text{Cu}^+ \rightarrow \text{Cu}^{2+}$ при потенциале -100 мВ.

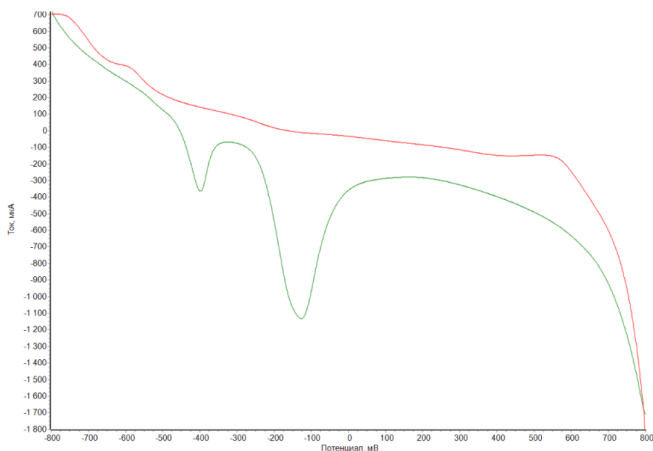


Рис. 2. Циклическая постоянноточковая вольтамперограмма медного электрода с гидрогелевой мембраной

Полученный гидрогель возможно использовать в медицинских устройствах, например, для ионофореза.

Литература

1. Emaminejad S., Wang J., et al. Autonomous sweat extraction and analysis applied to cystic fibrosis and glucose monitoring using a fully integrated wearable platform // Proceedings of the National Academy of sciences. – 2017. – Vol. 114. – № 18. – P. 4625-4630.
2. Cahyaningrum S. E., et al. Synthesis and characterization chitosan-glutaraldehyde alginate blends for candidate hemodialysis membrane // Rasayan J. Chem. – 2017. – Vol. 3. – P. 959-966.

© Анисимова М.М., Фомина Е.Д., Рябков Е.Д., Гервальд А.Ю., 2025

УДК 678.83:541.64

АМИНОПРОПИЛЕНАМИННАЯ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ ГИПЕРРАЗВЕТВЛЕННЫХ ПОЛИЭФИРОПОЛИОЛОВ

Вагапова А.И., Кутырев Г.А.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия*

Дендридная структура гиперразветвленных полимеров (ГРП) выделяет их среди традиционных полимеров и придает им комплекс уникальных свойств, таких как большое количество функциональных групп в терминальных положениях, низкая вязкость растворов, высокая

растворимость. Благодаря возможности легкой функционализации такие полимеры нашли широкое применение в самых разных сферах: медицине, электронике, модификаторах полимерных материалов, лакокрасочных покрытиях и т.д. [1]. ГРП состоят из ядра и дендронов – разветвляющихся частей молекул, состоящих из повторяющихся мономерных звеньев. ГРП могут содержать три и более дендрона, которые определяют химические и физические свойства макромолекул [2].

В данной работе была проведена функционализация двух гиперразветвленных полиэфиополиолов Boltorn H20, содержащего 4 дендрона (рисунок 1, соединение **1**), и Boltorn H2003, содержащего 3 аналогичных дендрона (рисунок 1, соединение **2**). Ядром Boltorn H20 является этоксилированный пентаэритрит, а Boltorn H2003 – 3,3,3-тригидроксиметилпропан, мономером для дендронов является 2,2-дигидроксиметилпропановая кислота.

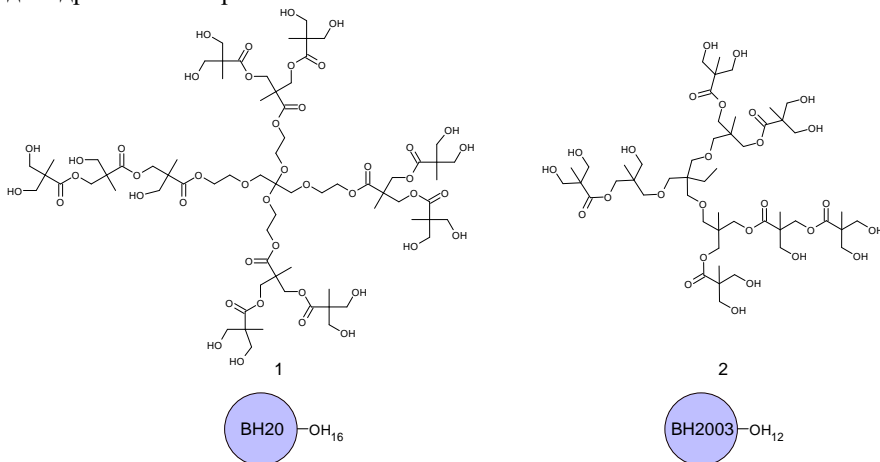


Рис. 1. Структуры полиэфиополиолов Boltorn H20 **1** и Boltorn H2003 **2**

Функционализация ГРП [(диметиламино)пропил]карбаматными группами происходила два этапа. На первом этапе проведена реакция диметилкарбоната с Boltorn H20 **1** и Boltorn H2003 **2** с получением соединений **3** и **4** соответственно (рисунок 2, реакция А). В ИК-спектрах **3** и **4** отмечено уменьшение в интенсивности пика валентных колебаний ОН групп в диапазоне 3700-3080 см⁻¹ и увеличение в интенсивности пика валентных колебаний С=О сложноэфирных групп при 1732 см⁻¹. Методам ЯМР ¹H спектроскопии установлено, что модификации на карбонатные фрагменты подверглось 9 из 16 исходных гидроксильных групп для соединения **3** и 9 из 12 для соединения **4**. Далее проводили реакцию соединений **3** и **4** с 3-диметиламино-1-пропиламином с получением соединений **5** и **6** соответственно (рисунок 2, реакция В). Степень

модификации, установленная методом ЯМР ^1H , для соединения **5** составила 50%, а для **6** 75%.

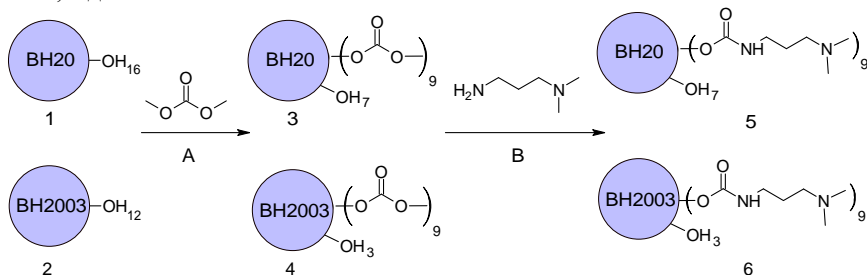


Рис. 2. Схемы синтеза гиперразветвленных полиэфирополи[(диметиламино)пропил]карбаматов **5** и **6**

Boltorn H2003 демонстрирует более высокую степень функционализации, что по-видимому обусловлено большей пространственной доступностью линейных OH групп в макромолекуле **2**, имеющей три дендритных звена. В соединении **1**, содержащему четыре дендрона, возникают большие стерические препятствия подходу реагентов функционализации OH групп, особенно тех, что находятся не на периферии макромолекулы.

Литература

1. Zhang Y., Yu W. Synthesis of hyperbranched polymers and prospects for application in oilfield chemistry //Frontiers in Energy Research. – 2022. – Т. 10. – С. 894096.
2. Кутырева М.П. и др. Новые материалы: биологически активные гиперразветвленные полимеры и их металлокомплексы. – 2014.

© Вагапова А.И., Кутырев Г.А., 2025

УДК 638

ВЛИЯНИЕ РАЗЛИЧНЫХ ДОБАВОК ПРИРОДНОГО НАПОЛНИТЕЛЯ НА БИОРАЗЛАГАЕМОСТЬ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНА НИЗКОЙ ПЛОТНОСТИ

Варьян И.А.^{1, 2}, Тюбаева П.М.^{1, 2}, Попов А.А.^{1, 2}

¹ ФГБОУ ВО РЭУ им. Г.В. Плеханова, Москва, Россия

² ФГБУН ИБХФ им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия

Проблема полимерного мусора (пластиковых отходов) — это одна из наиболее острых экологических проблем современности. Она связана с огромным количеством производимого пластика и его медленным разложением в окружающей среде.

Долгосрочные исследования, направленные на биологическое разложение полиэтилена, однако, дали скромные результаты. В целом, борьба с загрязнением полимерным мусором требует комплексного подхода, включающего изменения в потребительском поведении, инновации в

области материалов и технологий, а также эффективное управление отходами.

В данной работе в качестве решения данной проблемы предлагается модификация полиэтилена низкой плотности путем добавления природного наполнителя – натурального каучук (рис. 1).

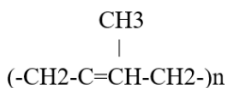


Рис. 1. Структурная формула натурального каучука

Многие бактериальные штаммы, способные использовать каучук в качестве источника углерода и энергии, были описаны в течение последних ста лет [1].

Основные элементы научной новизны заявленной работы: впервые проведено комплексное изучение свойств смесей и отдельных компонентов полимерных композиций на основе полиолефинов и натурального каучука, рассмотрены физико-химические способы модификации; установлены ранее не изученные зависимости межфазного взаимодействия в многокомпонентных полимерматричных системах.

По результатам работы определено оптимальное соотношение компонентов в полимерной смеси, особенности процесса деструкции, оценена перспективность применения в дальнейшем полученных материалов.

Литература

1. Jendrossek D., Tomasi G., Kroppenstedt R. M. Bacterial degradation of natural rubber: A privilege of actinomycetes? // FEMS Microbiology Letters. 1997. № 2 (150).

© Варьян И.А., Тюбаева П.М., Попов А.А., 2025

УДК 544.777

СИНТЕЗ ПОЛИМЕРНЫХ ДИСПЕРСИЙ В МИЦЕЛЛЯРНЫХ РАСТВОРАХ ТРИБЛОКСОПОЛИМЕРА PLURONIC P123

Водолазская Т.К., Бессонова А.М., Слепцова О.В.

Воронежский государственный университет, Воронеж, Россия

Исследование процессов самоорганизации в растворах полимерных ПАВ, которые обладают не только адсорбционной, но и мицеллообразующей способностью представляет несомненный научный интерес в области полимерного материаловедения. Особое внимание привлекают полимерные мицеллярные структуры, которые могут быть использованы для проведения различных форм мицеллярного катализа, а также синтеза полимерных наноразмерных систем.

Целью настоящей работы заключалась в исследовании процессов саморганизации полимерного ПАВ Pluronic P123 и его бинарных композиций с анионоактивными ПАВ в водных растворах, а также синтез дисперсий гидрофобного полимера методом радикальной эмульсионной полимеризации при участии в качестве ПАВ-эмульгаторов данных композиций.

Pluronic P123 представляет собой амфифильный триблоксополимер этиленоксида и пропиленоксида и является неионным водорастворимым мицеллообразующим ПАВ. Методом динамического рассеяния света обнаружено образование моодисперсной системы при формировании мицеллярной структуры Pluronic P123, гидродинамический радиус мицелл составляет примерно 9 нм. В бинарных композициях Pluronic P123 с лаурилсульфатом натрия SLS не удалось зафиксировать моодисперсную систему, которая могла бы свидетельствовать об образовании смешанных мицелл одного типа. Ассоциация Pluronic P123 с анионоактивным ПАВ приводит к образованию мицеллярных комплексов разного размера и состава.

Важной стадией проведения мицеллярного синтеза является солубилизация гидрофобных компонентов в ядре мицелл. Спектрофотометрическим методом была определена солубилизирующая способность по отношению к олеофильному красителю как индивидуальных ПАВ, так и их бинарных композиций, рассчитана солубилизационная емкость.

Мицеллярный синтез проводили методом радикальной эмульсионной полимеризации. В качестве модельного полимера был выбран полистирол. Мономер стирол практически не растворим в воде и из водных эмульсий полимеризуется по мицеллярному механизму. Дисперсии, синтезированные в присутствии полимерного ПАВ Pluronic P123, являются моодисперсными системами с гидродинамическим радиусом частиц порядка 100 нм и представлены частицами сферической формы. Гидрозоли полистирола, синтезированные с использованием бинарных композиций ПАВ, обладают полидисперсностью, что предполагает наличие в исходной реакционной смеси смешанных мицелл разного размера и состава.

© Водолазская Т.К., Бессонова А.М., Слепцова О.В., 2025

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИНСТРУМЕНТА FORCITE В ПРОГРАММЕ
MATERIALS STUDIO ДЛЯ РАСЧЕТА НЕКОТОРЫХ ПАРАМЕТРОВ
РАСТВОРА ПЕКТИН-ВОДА.

Галимов Д.А., Кулиш Е.И.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Materials Studio — это передовая среда для компьютерного моделирования в области химии, материаловедения и нанофизики. Программа предоставляет широкий спектр возможностей для исследования и проектирования новых материалов.

В данной работе в качестве объекта изучения использовали смесь пектина с водой. Смоделированная система была рассчитана с помощью набора инструментов Forcite, это приближение позволила посчитать вязкость раствора задав ключевые параметры.

Используя порядок выполнения моделирования:

1. Создание молекулы галактурановой кислоты.
2. Создание молекулы воды.
3. Геометрическая оптимизация молекулы воды и галактурановой кислоты.
4. Создание пектина.
5. Построение системы воды-пектин.
6. Геометрическая оптимизация системы вода-пектин с помощью набора инструментов Forcite Geometry optimization.
7. Запуск расчётов Forcite shear.

Полученные результаты не согласовывались с экспериментальными данными, поэтому вводится работа по устранению ошибок в этапах моделирования.

Набор инструментов Forcite показал, что способен рассчитывать более большие системы, состоящие из миллиона звеньев полимера пектина в растворителе. В дальнейшем программа Materials Studio поможет предварительно рассчитать некоторые искомые величины с помощью набора инструмента Forcite.

© Галимов Д.А., Кулиш Е.И., 2025

УДК 541.64

ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ
НА ОСНОВЕ СМЕСЕЙ ПОЛИЛАКТИД-ПОЛИКАПРОЛАКТОН-
ХИТОЗАН-ЦЕФТРИАКСОН

Гарипова Л.Г.

(руководитель: Кулиш Е.И.)

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Антибиотик цефтриаксон относится к группе цефалоспоринов — класса β -лактамных антибиотиков. Цефалоспорины занимают лидирующую позицию среди антибиотиков, применяемых в клинической практике, что объясняется многими их положительными свойствами, среди которых: широкий спектр антимикробного действия; бактерицидный механизм действия; низкая частота резистентности микроорганизмов; устойчивость к действию многих бета-лактамаз; хорошая переносимость и низкая частота побочных эффектов. Антибактериальная активность цефалоспоринов обусловлена торможением синтеза пептидогликана — структурной основы микробной стенки. Данная работа посвящена получению пленочных материалов на основе смесей синтетических полиэфиров полилактида и поликапролактона, наполненных хитозаном и цефтриаксоном. Данные материалы могут быть перспективны в качестве защитных материалов для лечения долго незаживающих и вялотекущих ран с контролируемым выходом лекарственного вещества.

Получение композиций осуществляли на пластографе Брабендера при температуре 160 °С, времени смешения 10 минут и скорости вращения роторов 10 об/мин [1]. После процесса пластикации образцы композитов помещались в автоматический гидравлический пресс «AutoMH-NE» (Carver, США) для формирования пленок толщиной 0,3 мм. Температура в прессе составляла 160 °С, давление 1000 кгс.

Проведенные исследования показали, что чем больше хитозана и цефтриаксона находится в композиции, тем быстрее осуществляется выход антибиотика из пленочного материала. При этом, наличие хитозана более 70 мас.ч. существенно затрудняет переработку композиции и приводит к ухудшению физико-механических свойств материала.

Литература:

1. Бакирова Э.Р., Лаздин Р.Ю., Гизбуллина Е.М., Кулиш Е.И. Влияние условий переработки на некоторые характеристики поликапролактона. Бутлеровские сообщения. 2023. Т. 74. № 4. С. 72-76.

© Гарипова Л.Г., 2025

РАЗРАБОТКА ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА ДЛЯ
ПОЛИУРЕТАНОВЫХ ТРУБОК (СТЕНТОВ)

Графченко С.Ю., Гегель Н.О., Шиповская А.Б.

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

Использование мочеточниковых стентов при различных урологических заболеваниях часто связано с рядом осложнений: формированием биопленки, инфекцией мочевыводящих путей, инкрустацией и т.д. Поверхностная модификация стентов биосовместимым и антибактериальным покрытием, например, на основе хитозана (ХТЗ), может помочь устранить данные осложнения [1]. Цель работы – разработать покрытие для полиуретановой трубки урологического стента и оценить его поверхностный рельеф, баланс гидрофильно-гидрофобных свойств, способность адсорбировать микроорганизмы и неорганические соли.

Использовали ХТЗ с ММ = 700 кДа и СД = 80 мольн.% (ЗАО «Биопрогресс»), 57% молочную кислоту (МК), 50% триэтаноламин (ТЭА), ε -аминокапроновую кислоту (АмК), дистиллированную воду. Исходные растворы ХТЗ концентрации $C_{\text{ХТЗ}} = 3.0$ г/дл в 1.5% МК готовили по стандартной методике. Покрытие на основе ХТЗ наносили погружением стента в раствор полимера. Поскольку поверхность полиуретановой трубки является гидрофобной, перед нанесением гидрофильного раствора ХТЗ трубку покрывали мелкодисперсным порошком АмК. Стент с нанесенным раствором ХТЗ высушивали при 55°C в течение 40 мин. Полученный образец помещали в 50% водный раствор ТЭА на 10 мин для протекания реакции нейтрализации и отмывали дистиллированной водой [2].

Методом световой микроскопии показано, что покрытие толщиной 100 ± 5 мкм полностью повторяет рельеф трубки, равномерно по толщине всего образца, гладкое, без видимых дефектов.

Методом сидячей капли стандартной жидкости с известным поверхностным натяжением оценены гидрофильно-гидрофобные свойства модифицированной системы. Рассчитанные значения гистерезиса краевого угла составили 11° , критического поверхностного натяжения для трубки без и с покрытием – 96 и 36 мДж/м², соответственно.

В опытах *in vitro* выявлено, что модификация хитозановым покрытием, несмотря на понижение гидрофобности материалов, приводит к уменьшению инкрустации и образованию биопленки на поверхности стента после выдерживания в моче с патогенными микроорганизмами в течение 14-ти суток, по сравнению со стентом без покрытия.

Литература

1. Wu T., Yang Y., Su H., et. al. Colloids and Surfaces B: Biointerfaces. 2022. Vol. 219. P. 112837.
2. Шиповская А.Б., Гегель Н.О., Бабичева Т.С., Голядкина А.А. Журнал прикладной химии. 2023. Т. 96. № 1. С. 69-83.

Закиева А.И.¹, Нафикова Р.Ф.³, Мазина Л.А.², Ахметханов Р.М.¹

¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

²Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, Стерлитамак, Россия

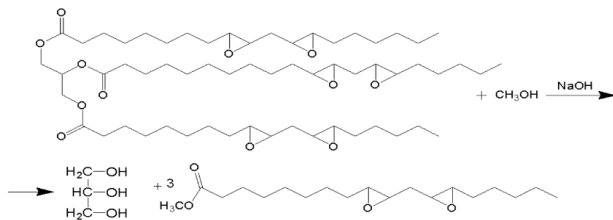
³Стерлитамакский филиал Уфимского государственного нефтяного технического университета, Стерлитамак, Россия

Для получения малотоксичных пластифицированных ПВХ материалов в технологии производства материалов используют эпоксидированное соевое масло (ЭСМ) добавлением к базовому пластификатору диоктилфталату (ДОФ), при этом он наряду с пластифицирующим действием обладает стабилизирующей способностью. ЭСМ, в отличие от ДОФ, включен в список безопасных пластификаторов.

В качестве замены ЭСМ в ПВХ-пластикатах в последнее время находит применение метиловый эфир эпоксицированного соевого масла (МЭЭСМ).

Данный эфир в сравнении с ЭСМ обладает такими достоинствами как более высокая экологичность, способность к биологическому разложению, хорошей тепло- и светостойкость. Он заметно лучше совмещается с ПВХ и способствует более высокому повышению термостабильности пластика.

Метиловый эфир эпоксицированного соевого масла получают реакцией перэтерификации эпоксицированного соевого масла метанолом (рисунк 1).



353

МЭЭСМ представляет собой высококипящую жидкость, практически не растворимая в воде, при обычных условиях устойчивая к гидролизу

В данной работе изучены закономерности термического и термоокислительного дегидрохлорирования ПВХ пластифицированного МЭЭСМ в сравнении с пластикатами содержащими ЭСМ.

В условиях термической деструкции ПВХ в присутствии МЭЭСМ при 175° С за счет сольватационного и стабилизирующего эффектов наблюдается снижение скорости дегидрохлорирования полимера. Ингибирующая эффективность для МЭЭСМ незначительно превышает ЭСМ. При содержании МЭЭСМ 10 масс.ч./100 масс.ч. ПВХ скорость дегидрохлорирования полимера достигает предельных значений и сохраняется при дальнейшем увеличении содержания пластификатора.

Показано, при термоокислительной деструкции ПВХ, пластифицированного МЭЭСМ и ЭСМ в концентрациях до 40 масс.ч./100 масс. ч. ПВХ обе добавки заметно замедляют распад ПВХ. При этом стабилизирующая эффективность метилового эфира и ЭСМ практически не отличается.

Метилловый эфир в инертной и окислительной среде в как и ЭСМ проявляют большую стабилизирующую эффективность, очевидно, за счет дополнительного проявления эпоксидной группой термостабилизирующего эффекта при акцептировании HCl по реакции (рисунок 2) [2]:

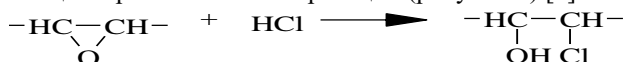


Рис. 2. Реакция метилового эфира в инертной и окислительной среде и взаимодействии эпоксидных групп эфира с лабильными группами в структуре ПВХ, ответственными за аномально низкую термоустойчивость полимера, с образованием 1,3 диоксоланов (рисунок 3):

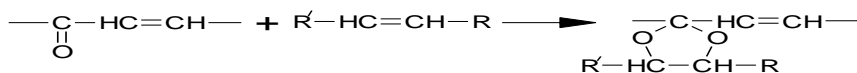


Рис. 3. Реакция образования 1,3 диоксоланов

Проведена оценка реологических свойств модельных ПВХ – пластикатов по показателю текучести расплава (ПТР). Показано, что в широком интервале концентраций пластифицирующая способность метилового эфира заметно превосходит пластифицирующую эффективность эпоксидированного соевого масла

Таким образом на основании полученных результатов можно констатировать, что МЭЭСМ по некоторым показателям, в т.ч. по пластифицирующей способности, превосходит ЭСМ и его можно использовать для получения нетоксичных пластифицированных материалов на основе ПВХ.

Литература

1. Уилки Ч., Саммерс Дж., Даниэлс Ч. Поливинилхлорид. // Пер. с англ. под ред. Г.Е. Заикова. СПб.: Профессия, 2007. – 728 с
2. Минскер К.С., Абдуллин М.И. Эффект “эхо-стабилизации” при термодеструкции поливинилхлорида. Доклады АН СССР. – 1982. – Т. 263. – № 1. – С. 140-143.

© Закисва А.И., Нафикова Р.Ф., Мазина Л.А., Ахметханов Р.М., 2025

УДК 54.022:54.057

НАНОЧАСТИЦЫ Ni НА ПЛАТФОРМЕ ГИПЕРРАЗВЕТВЛЕННОГО ПОЛИАМИНОЭТИЛЕНКАРБОНАТА ЧЕТВЕРТОЙ ГЕНЕРАЦИИ

Иванова А.И., Максимов А.Ф., Кутырев Г.А.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия*

В последние годы возрос интерес к гидрированию ненасыщенных связей, особенно к получению аминов гидрированием ароматических нитросоединений [1]. Актуальна разработка эффективных и селективных катализаторов, в частности, для гидрирования нитробензола в анилин, широко используемый в различных отраслях промышленности [2]. Традиционные катализаторы имеют недостатки, которые можно решить, используя гиперразветвленные полимеры в качестве подложки [3]. В данной работе синтезированы и изучены наночастицы никеля, нанесенные на гиперразветвленный полиаминоэтиленкарбонат четвертой генерации, для оценки их каталитических свойств в реакции гидрирования нитробензола до анилина.

Получена каталитическая система: наночастицы никеля на гиперразветвленном полиаминоэтиленкарбонате четвертой генерации. Синтез двухстадийный (рис. 1): 1) взаимодействие полимера с гексагидратом хлорида никеля(II) (выход 91%, образование координационных связей Ni(II) с полимером подтверждено ИК-спектроскопией); 2) восстановление ионов Ni(II) боргидридом натрия до наночастиц Ni на платформе полимера. Каталитическая система – черный порошок, активна в гидрировании нитробензола до анилина при 90°C в диметилформамиде и инертной атмосфере аргона.

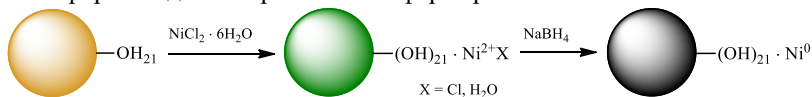


Рис. 1. Схема синтеза наночастиц Ni на платформе гиперразветвленного полиаминоэтиленкарбоната четвертой генерации

Литература

1. Hydrogenation of aromatic nitro compounds to amines on nickel and iron-containing catalysts / L.R. Sassykova, A.R. Sassykova, S.N. Kubekova [et al.] // *Rasayan J. Chem.* 2021. – V. 14 № 2. – P. 1223-1229.
2. Selective hydrogenation of nitrobenzene to aniline over LaNiO_3 / O.P. Tkachenko, E.V. Shuvalova, P.V.E. Zemlianskii, // *Mendeleev Communications.* – 2025. – V. 35 № 2. – P. 228-230.
3. Новые гибридные палладиевые катализаторы на подложках γ -оксида алюминия и гиперразветвленных полиаминоэтиленкарбонатов второй и третьей генераций / Н.Х. Мухаметова, А.Ф. Максимов, М.А. Бочков [и др.] // *Вестник технологического университета.* – 2024. – Т. 27. № 10. – С. 33-38.

© Иванова А.И., Максимов А.Ф., Кутырев Г.А., 2025

УДК 66.095.26

СИНТЕЗ СТОМАТОЛОГИЧЕСКИХ БАЗИСНЫХ САМООТВЕРЖДАЕМЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА

Игошина В.И., Ширшин К.К.

*Нижегородский государственный технический университет
им. Р.Е. Алексеева, Нижний Новгород, Россия*

Базисные полимерные композитные материалы на основе полиметилметакрилата (ПММА) давно и весьма успешно применяются в различных областях медицины, в частности, в стоматологии. Особое применение исследуемые композитные материалы находят в производстве пломбировочных, лечебных, профилактических, ортопедических и зуботехнических материалов. Получаемые полимерные композиции на основе ПММА и его сополимеров имеют множество уникальных свойств.

Данная работа посвящена поиску наиболее оптимального варианта синтеза ПММА и сополимеров на его основе, т.к. свойства ПММА существенно зависят от метода полимеризации.

Микросферы ПММА могут быть синтезированы методами эмульсионной полимеризации, суспензионной полимеризации [1], дисперсионной полимеризации и затравочной полимеризации. Среди всех этих методов суспензионная полимеризация ММА имеет много преимуществ, таких как, возможность легкого отвода тепла через водную фазу и точного контроля температуры. Природа диспергатора и скорость перемешивания при проведении полимеризации играют важную роль для получения ПММА с заданным диаметром частиц. Средний диаметр частиц ПММА резко уменьшается с ростом скорости перемешивания. Это связано с тем, что суспензионная полимеризация ПММА происходит в

нерастворимых в воде каплях. Выбор диспергатора определяется доступностью реагентов, требуемым размером частиц полимера и наличием оборудования для дальнейшей нейтрализации и удаления его остатков.

В процессе выполнения данной работы было получено положительное заключение о возможности применения синтезированных авторами образцов полиметилметакрилата и его сополимеров в базисных самоотверждаемых материалах.

Литература

1. Villanova J.C.O., Ayres E., Carvalho S.M., Patrício P.S., Pereira F.V., Oréfice R.L. Pharmaceutical acrylic beads obtained by suspension polymerization containing cellulose nanowhiskers as excipient for drug delivery. – Europe Journal Pharmacology, 2011. – № 42, 405-416 p.

© Игошина В.И., Ширшин К.К., 2025

УДК 541.64

ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СМЕСЕЙ ПОЛИЛАКТИД- ПОЛИКАПРОЛАКТОН-ХИТОЗАН-АМИКАЦИН

Казыргалин А.И.

(руководитель: Кулиш Е.И.)

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Аминогликозиды являются одним из ранних классов антибиотиков. Первый аминогликозид - стрептомицин был получен в 1944 г. В настоящее время выделяют три поколения аминогликозидов и амикацин относится к третьему поколению этого класса антибиотиков. Основное клиническое значение аминогликозидов заключается в их активности в отношении аэробных грамотрицательных бактерий. Аминогликозиды обладают более мощным по сравнению с бета-лактамами бактерицидным действием, которое развивается более быстро. Антибактериальный эффект аминогликозидов связан с нарушением синтеза белка на рибосомах. Данная работа посвящена созданию защитных раневых покрытий с контролируемым выходом лекарственного препарата. В качестве полимерной основы пленочных материалов были выбраны смеси поликапролактона с полилактидом и хитозаном. В качестве лекарственного вещества – амикацин.

Получение композиций осуществляли на пластографе Брабендера при температуре 160 °С, времени смешения 10 минут и скорости вращения роторов 10 об/мин [1]. После процесса пластикации образцы композиций помещались в автоматический гидравлический пресс «AutoMH-NE» (Carver, США) для формирования пленок толщиной 0,3 мм. Температура в прессе

составляла 160 °С, давление 1000 кгс. Содержание амикацина составляла от 2,5 до 10 мас% по отношению к массе полимерной основы.

Проведенные исследования показали, что чем больше хитозана и амикацина находится в композиции, тем быстрее осуществляется выход антибиотика из пленочного материала. При этом, наличие хитозана более 70 мас.ч. существенно затрудняет переработку композиции и приводит к ухудшению физико-механических свойств материала.

Литература:

1.Бакирова Э.Р., Лаздин Р.Ю., Гизбуллина Е.М., Кулиш Е.И. Влияние условий переработки на некоторые характеристики поликапролактона. Бутлеровские сообщения. 2023. Т. 74. № 4. С. 72-76.

© Казыргалин А.И., 2025

УДК 541.64

СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА И НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ГИДРОФУРАНА

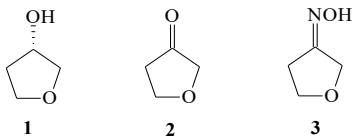
Калеева В.В., Охиров Ш.М.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Хитозан, благодаря своим биосовместимым, биоразлагаемым и антимикробным свойствам, способности ускорять регенерацию тканей и уменьшать воспаление делает его перспективным материалом для медицинских применений, в частности для создания раневых покрытий. При этом эффективные раневые покрытия должны обладать высокой сорбционной способностью для удаления экссудата, обеспечивать газообмен, поддерживать влажную среду, предотвращать инфицирование и способствовать регенерации тканей. Хитозан отвечает большинству этих требований, что делает его ключевым материалом для разработки современных раневых покрытий.

Сорбционные свойства играют ключевую роль в эффективности раневых покрытий, так как они определяют способность материала поглощать экссудат и поддерживать оптимальные условия для заживления. Исследование сорбционной способности пленок на основе хитозана и их модификаций позволяет оптимизировать состав покрытий для различных типов ран. В связи с этим целью работы стало изучение сорбционных свойств пленок на основе хитозана и некоторых производных тетрагидрофурана.

В качестве производных тетрагидрофурана были исследованы следующие соединения



Их включение в состав покрытий может усилить сорбционные свойства, улучшить антимикробную активность и ускорить процесс заживления ран.

Согласно проведенным исследованиям, было установлено, что скорость сорбции паров воды полимерным пленками с включенными производными тетрагидрофурана увеличивается при переходе от соединения (1) к соединению (3).

Таким образом, комбинирование хитозана с производными тетрагидрофурана представляет собой перспективное направление для разработки эффективных раневых покрытий с улучшенными сорбционными и функциональными свойствами, что может значительно повысить качество лечения ран в клинической практике.

© Калеева В.В., Охиров Ш.М., 2025

УДК 541.64

ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ РЕЦЕПТОРНОЙ СРЕДЫ НА ПРОЦЕСС ВЫСВОБОЖДЕНИЯ ЦЕФАЗОЛИНА ИЗ ЖИДКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ

Караськина К.Д.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

С развитием современной фармацевтики, все более актуальной становится задача разработки вспомогательных веществ с характеристиками, которые могут, в зависимости от терапевтических требований, улучшать биодоступность и устойчивость препарата, а также обеспечивать создание лекарственных форм с контролируемым или локализованным высвобождением активного вещества. Наиболее распространенными лекарственными формами являются жидкие лекарственные формы (ЖЛФ). Один из составляющих компонентов жидких лекарственных форм — это полимерные соединения.

Одними из перспективных полимеров для создания ЖЛФ являются полисахариды, например, пектин, хитозан и его производные, натриевая соль карбоксиметилцеллюлозы. Использование полимерных производных ЖЛФ позволяет пролонгировать высвобождение лекарственных веществ (ЛВ) из них [1].

Но при разработке ЖЛФ необходимо учитывать и физиологические условия высвобождения ЛВ. В связи с этим встает задача правильного выбора рецепторной среды, поскольку это является критически важным этапом планирования *in vitro* исследований. Неправильно подобранная среда

может искажать данные, в то время как грамотно выбранная рецепторная среда позволяет корректно оценить профиль высвобождения препарата, его стабильность и фармакокинетическую перспективу. Так, например, физиологический раствор (0,9% NaCl) имитирует внеклеточную жидкость, кровь, плазму. При использовании его в качестве рецепторной среды наблюдается уменьшение скорости высвобождения цефазолина (ЦФЗ) из ЖЛФ через полупроницаемую мембрану по сравнению с водным раствором (в качестве рецепторной среды).

При использовании в качестве рецепторной среды растворов, совпадающих по вязкости с кровью, наблюдается также уменьшение скорости высвобождения ЦФЗ из ЖЛФ через полупроницаемую мембрану.

Таким образом, правильно выбранная рецепторная среда позволяет достоверно предсказать поведение препарата в организме и повысить точность моделирования его фармакокинетических характеристик.

Литература

1. Shurshina A., Afanasyeva M., Chernova V., Lazdina M., Kulish E. // *Macromolecular Research*. 2024. V. 32. № 3. P. 231-241.

© Караськина К.Д., 2025

УДК: 547.995.1

ВЛИЯНИЕ ЦИНКА КАК ПРОТИВОИОНА НА СВОЙСТВА ХОНДРОИТИН-4,6-СУЛЬФАТОВ ХРЯЩЕВОЙ ТКАНИ

Козырев С.В., Понеделькина И.Ю.

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Хондроитин-4,6-сульфаты (ХС) из хрящевой ткани обладают специфической биологической активностью, антиоксидантными, антирадикальными [1], противовоспалительными и др. свойствами. Хелатирование с таким жизненно важным элементом, как цинк (II) (схема 1), в значительной мере усиливает антиоксидантные свойства [1] и сообщает антибактериальную активность [2] ХС, открывая перспективы к разработке новых биомедицинских материалов.

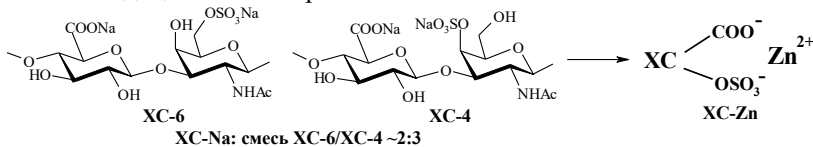


Схема 1

В настоящей работе соль XC-Zn (получена как в [2]) была исследована, во-первых, как ловушка дифенилпикрилгидразильного радикала (ДФПГ), во-вторых, как соединение, способное обладать мукоадгезивностью при контакте с биологическими поверхностями. В качестве референс использовали XC-Na.

Нами было установлено, что в реакции с ДФПГ ХС-Na проявлял антирадикальную активность, соответствующей активности 0.25 мг Тролокса (ТР) в расчете на 1 г ХС-Na (ср. с [1]). Но при замене иона Na^+ на Zn^{2+} антирадикальная активность ХС снижалась на ~30% (0.17 мг ТР/г ХС).

Методом турбидиметрического титрования было обнаружено, что соль ХС-Na при pH 2.0, 4.0 и 6.5 не проявляла мукоадгезивных свойств, а оказывала на макромолекулы свиного желудочного муцина (тип III) дезагрегирующее действие, равно как и соль ХС-Zn при pH 2 и 4. Мукоадгезивные свойства ХС-Zn обнаруживались только при pH 6.5.

Литература

1. Ajisaka K., Oyanagi Y., Miyazaki T., Suzuki Y. Effect of the chelation of metal cation on the antioxidant activity of chondroitin sulfates. – Bioscience, Biotechnology, and Biochemistry. 2016; 80 (6): 1179-1185.
2. Wu G. *et al.* Chondroitin sulfate zinc with antibacterial properties and anti-inflammatory effects for skin wound healing. – Carbohydr. Polym. 2022. V. 278, 118996.

© Козырев С.В., Понеделькина И.Ю., 2025

УДК 541.64+541.68+54-148

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ДАННЫЕ И ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ НАБУХАНИЯ КОВАЛЕНТНО-ИОННОГО ГИДРОГЕЛЯ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА И 5-НОРБОРНЕН-2,3-ДИКАРБОНОВОГО АНГИДРИДА

Абдурахимов Т.Д., Мулюкова С.М., Королев И.Н., Мингалеева Г.Р.,
Мингалеев В.З.

Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

В данной работе представлено получение ковалентно-ионных (CI-ChN-rt) гелей при комнатной температуре на основе хитозана с использованием в качестве кросс-линкера норборнен дикарбоновый ангидрид (рисунок 1).

Приведены реологические данные полученных гидрогелей (рисунок 2а) и представлены значения равновесного набухания (Se) (рисунок 2б) в различных растворах в зависимости от содержания кросс-линкера, где CI-1ChN-rt – с 0.5М раствором кросс-линкера, CI-2ChN-rt – 0.25М, CI-3ChN-rt – 0.125М.

Для характеристики вязкоупругих свойств полученных гидрогелей хитозана использовались реологические тесты с разверткой частоты от 0,1 до 15 Гц при деформации 1-10%. Благодаря вязкоупругой модели Максвелла [1] были рассчитаны физические параметры сетки исследуемых гидрогелей (Таблица 1). Для гидрогелей ковалентно-ионного типа CI-ChN-rt характерны значения модуля упругости от ~ 2998.3 Па до ~ 3718.0 Па (Таблица 1). Снижение концентрации кросс-линкеров для гидрогелей, приводит к снижению модулей сдвига, что коррелирует со снижением уровня величин модулей накопления (Рисунок 2а). Из данных таблицы 1 следует, что в

изученном диапазоне концентраций кросс-линкеров концентрация сшивок меняется от 1.21 до 1.5 моль/м³, а средний размер ячеек от 12.83 до 13.78 нм. Из этих данных видно, что при увеличении концентрации сшивателя средний размер ячеек хитозановых гидрогелей уменьшается.

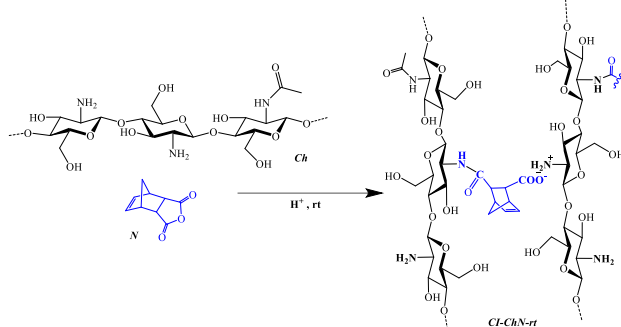


Рис. 1. Схема синтеза ковалентно-ионных гидрогелей из хитозана с применением кросслинкера 5-норборнен-2,3-дикарбонового ангидрида

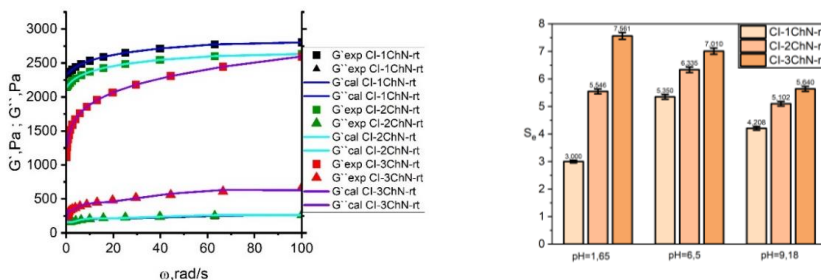


Рис. 2. а: Зависимость модуля накопления G' и модуля потерь G'' от угловой частоты для гидрогелей. По всем осям используется линейный масштаб. Точки – экспериментальные значения, линии – расчет с использованием обобщенной вязкоупругой модели Максвелла. б: Значения равновесного набухания (Se) гидрогелей с разным содержанием кросс-линкеров в растворах с разным значением pH

Таблица 1

Модуль сдвига и параметры молекулярного строения полимерных сетей гидрогелей

Наименование	G, Па	ν , моль/м ³	ξ , нм	Мс, г/моль
CI-3 ChN-rt	2998,38±239,86	1,21±0,06	13,78±0,37	13771,64±1101,73
CI-2ChN-rt	3205,05±192,31	1,29±0,07	13,48±0,27	12883,68±773,02
CI-1 ChN-rt	3718,09±148,72	1,50±0,06	12,83±0,16	11105,93±444,23

Для всех этих гидрогелей хитозана с 300 до 1440 минут коэффициент набухания остается постоянным в пределах ошибки эксперимента. Поэтому экспериментальную величину равновесного набухания, Se , рассчитывали по уравнению (1).

$$S_e = S(1440) = \frac{m(1440) - m_0}{m_0} \quad (1)$$

Результаты определения величины Se показаны на рис. 2b. Из рис. 2b видно, что гидрогель CI-1ChN-rt, приготовленный при высоком содержании кросс-линкера, демонстрирует увеличение величины Se с 3.04 г/г при $pH=1.85$ до 5.35 г/г при $pH=6.85$ и до 4.21 г/г при $pH=9.18$. Снижение концентрации кросс-линкера приводит к некоторому понижению чувствительности ионно-ковалентных гидрогелей хитозана к изменению pH .

Литература:

1. G. R. Mingaleeva, T. D. Abdurahimov, L. R. Yakupova, E.M. Zaharova, V.Z. Mingaleev // Russian Journal of General Chemistry. 2024. Vol. 94, No. 10. P. 2638-2646

© Абдурахимов Т.Д., Мулюкова С.М., Королев И.Н.,
Мингалеева Г.Р., Мингалеев В.З., 2025

УДК 665.622.43

РАЗРАБОТКА РЕАГЕНТА КОМПЛЕКСНОГО ДЕЙСТВИЯ ДЛЯ ПОДГОТОВКИ ТЯЖЁЛОЙ ВЫСОКОВЯЗКОЙ НЕФТИ

Красильников А.В., Амангельда А.А., Ширяева Р.Н.

Уфимский государственный нефтяной технический университет, Уфа, Россия

В настоящее время большинство нефтяных месторождений Российской Федерации находятся на поздней стадии эксплуатации. Нефть на таких месторождениях, в основном, высоковязкая, а обводнённость многих нефтяных скважин составляет до 90% [1]. При добыче образуются тяжёлые высоковязкие водонефтяные эмульсии. Наличие воды и солей в нефти ухудшает её качества, сокращает срок службы оборудования нефтедобычи и нефтепереработки, затрудняет транспортировку и переработку нефти.

Разработка методов для улучшения свойств добываемой нефти является важной задачей в области нефтедобычи и нефтепереработки. Один из современных методов для решения данной задачи заключается в разработке и использовании реагентов комплексного действия (РКД) [2-3]. Данные реагенты при использовании проявляют как деэмульгирующие свойства, так и свойства ингибиторов асфальтосмолопарафиновых отложений (АСПО). Такой подход позволяет улучшить качество нефти, упростить и, соответственно, удешевить процесс добычи, транспортировки и переработки нефти. Также в условиях экономической и политической нестабильности в мире при разработке РКД всё более актуальным становится

импортозамещение - применение в составе компонентов отечественного производства.

Целью настоящей работы являлась разработка деэмульгатора для разрушения тяжелых водонефтяных эмульсий, также проявляющего свойства ингибитора АСПО и оценка эффективности применения данного деэмульгатора на нефтяных месторождениях Российской Федерации.

В качестве неионогенного ПАВ в композиции использовался блоксополимер оксида этилена и пропилена (Лапрол). Для улучшения свойств основного вещества были использованы вспомогательные вещества – активная основа для деэмульгаторов DeKemix (производства АО «ОЗНХ») и соль алкилбензолсульфокислоты (АБСК).

Деэмульгирующую эффективность композиционного деэмульгатора оценивали на водонефтяной эмульсии с обводненностью 50%.

Количество остаточной воды в водонефтяной эмульсии определялось согласно ГОСТ 2477-2014. Изучение структурных фрагментов исходного лапрола и композиционного деэмульгатора проводилось методом ИК-спектроскопии в области от 4000-650 см⁻¹.

В ходе проведения работы было получено несколько деэмульгаторов, в составе которых использовались компоненты исключительно отечественного производства, определены их физико-химические свойства. По результатам проведенных лабораторных испытаний установлено, что разработанный композиционный деэмульгатор за счет проявления синергизма компонентов, входящих в состав композиции, обеспечивает высокую степень разрушения эмульсии, а также проявляет свойства ингибитора коррозии и парафиноотложений.

Литература

- 1.Данилин И.К., Рахимкулов А.Г., Коркушко Д.А., Сыркин А.М. Реагент комплексного действия на основе альдегидов и аминов для нефтедобычи // Фундаментальные исследования. 2015. № 2 (часть 10). С. 2099-2105. EDN: TQVINN.
- 2.Садырбаева А.С., Байботаева С.Е., Турбекова А.М., Жанабай С.Ж. Эффективность воздействия деэмульгатора на процесс разрушения водонефтяных эмульсий // Международный студенческий научный вестник. – 2019. – № 2.
- 3.Хамидуллина Ф.Ф. Композиционный деэмульгирующий состав для системы сбора и промысловой подготовки высоковязкой продукции нефтяных скважин: специальность 02.00.13 «Нефтехимия»: автореферат диссертации на соискание учёной степени кандидата технических наук / Хамидуллина Фарида Фаритовна; Казанский национальный исследовательский технологический университет. – Казань, 2014. 20 с.

© Красильников А.В., Амангельда А.А., Ширяева Р.Н., 2025

КОМПОЗИТНЫЕ ГЕЛЬ-ПЛЕНКИ ПОЛИСАХАРИД-ЖЕЛАТИНА БИОМЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ

Лепехин Е.С., Чиняев А.В., Малинкина О.Н., Шиповская А.Б.

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

Гели желатины (G) термообратимы и в сочетании с биоактивными полисахаридами, такими как хитозан (CS), глюкоманнан (GM), ксантан (XG), могут рассматриваться в качестве основы получения атравматичных, биосовместимых и биорезорбируемых муко/дермоадгезивных гель-пленок широкого спектра медицинского применения.

В настоящей работе проведена оценка влияния состава гелеобразующей композиции на упруго-пластические свойства композитных полисахаридсодержащих гель-пленок без и с использованием ферментативного сшивания в мягких условиях.

Гелеобразующую композицию получали смешением исходных растворов полимеров: 4% гликолята CS (с добавкой триэтаноламина до pH=5), 10% G, 0.5% GM и 0.5% XG. Соотношение желатиновая основа : полисахаридная компонента : сшиватель = 3 : 2 : 1. В качестве мягкого сшивающего агента использовали водный раствор 4% транслугтаминазы (mTG), в качестве вспомогательного компонента добавляли глицерин (GlyOH). Гелеобразование проводили при $40 \pm 0.1^\circ\text{C}$ в инкубаторе Being BI35TL течение 17 ч, составы образцов гель-пленок приведены в табл. 1.

Таблица 1
Влияние состава полисахаридной компоненты на упруго-пластические свойства
гель-пленок

№	Содержание компонентов, мас. %						Параметры		
	G	GM	XG	CS	mTG	GlyOH	ε_b , %	σ_b , кПа	E , кПа
1	5.0	—	—	1.2	0.6	5.0	185	11.1	5.93
1.1					—		139	14.5	10.4
2		0.08	—	0.6	0.6		93	5.2	5.6
2.1					—		137	50.0	36.5
3		—	0.08	0.6	0.6		159	11.2	7.0
3.1					—		103	6.7	6.5

4		—	0.16	—	0.6		197	58.3	29.6
4.1					—		145	44.0	30.0
5		0.08	0.08	—	0.6		146	14.7	10.0
5.1					—		148	8.6	5.8
6		0.16	—	—	0.6		179	17.0	12.7
6.1					—		153	20.8	13.6

Упруго-пластические свойства оценивали на разрывной машине Tinius Olsen HIKS в режиме одноосного растяжения со скоростью 0.1 мм/с (рис. 1). Относительное удлинение (ε_b , %) и напряжение при разрыве (σ_b , кПа), модуль Юнга (E , кПа) определяли из усредненных деформационных кривых «нагрузка–удлинение» трех параллельных экспериментов с учетом первоначальных геометрических размеров гель-пленочных образцов.

(а)

(б)

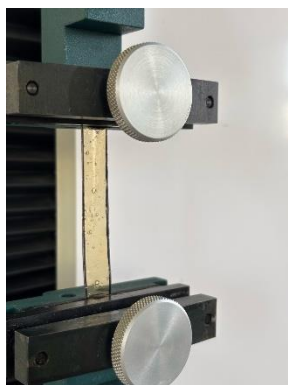


Рис. 1. Фотографии исходного образца гель-пленки (а) и в процессе одноосного растяжения (б)

Установлено, что гелеобразующие композиции с добавкой фермента в процессе инкубирования формируют монолитные эластичные гель-пленки, проявляющие адгезивные и конгруэнтные свойства к дермальной поверхности. Композиции без mTG остаются в тех же условиях текучими системами, но в воздушной атмосфере переходят через 24 ч в пленкоподобное состояние. Анализ физико-механических свойств показал, что введение mTG вносит положительный вклад в процесс структурообразования гель-пленок, что проявляется в улучшении их упруго-

пластических характеристик и значимом повышении высокоэластической (на основе индивидуальных CS, GM и XG), прочностной (XG) и упругой составляющей деформации (XG). Образцы с многокомпонентным полисахаридным составом (CS-GM, CS-XG, GM-XG, CS-GM-XG) не показали явных преимуществ по сравнению с индивидуальными полисахаридами (CS, GM, XG). Возможно, это связано с незначительным влиянием межмолекулярных взаимодействий высокомолекулярных углеводных компонентов смесевой системы. Особенностью гель-пленок с mTG является сохранение свойств высокоэластического гидрогеля более 6 месяцев при хранении без защитной упаковки.

© Лепехин Е.С., Чиняев А.В., Малинкина О.Н., Шиповская А.Б., 2025

УДК 541.14:547.551.2

СОЗДАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ТОКОПРОВОДЯЩИХ И МАГНИТОВОСПРИИМЧИВЫХ ГИДРОГЕЛЕВЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА И ЖЕЛАТИНА

Лимаренко В.И., Фомина Е.Д., Крапивко А.Л.

*МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких
химических технологий им. М.В. Ломоносова, Москва, Россия*

Современная медицина сталкивается с рядом проблем, требующих разработки инновационных подходов и материалов для диагностики и лечения. Одной из ключевых задач является необходимость в локализованных и эффективных системах доставки лекарств, а также в материалах для тканевой инженерии. В этом контексте токопроводящие и магнитовосприимчивые гидрогели представляют собой многообещающую альтернативу традиционным материалам благодаря их уникальным свойствам. Преимущества гидрогеля, содержащего магнитные наночастицы, заключаются в его способности к доставке терапевтических препаратов в определенные очаги воспаления с длительным временем пребывания в желаемой зоне под действием внешнего магнитного поля. В сфере каркасов для роста тканей гидрогелевые материалы обеспечивают не только механическую поддержку, но и электрофизиологическую активность, благодаря наличию токопроводящих наночастиц. В данной работе рассматривается синтез гибридного гидрогеля на основе поливинилового спирта и желатина, модифицированного углеродными нанотрубками для обеспечения токопроводящих свойств, а также магнетитом для обеспечения магнитных свойств.

Синтез гидрогеля осуществляли по механизму химической сшивки желатина и поливинилового спирта в подкисленном растворе. В качестве сшивающего агента использовали глутаровый альдегид [1].

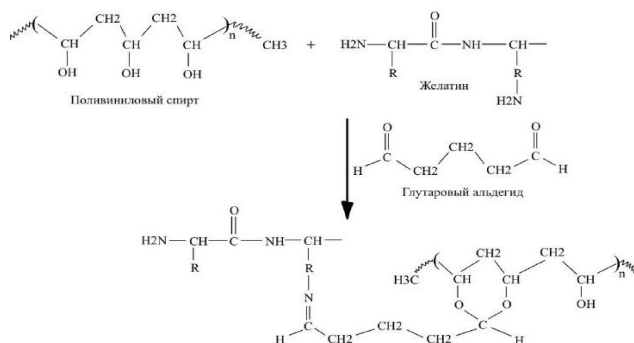


Рис. 1. Схема синтеза гидрогеля желатина и ПВС с использованием глутарового альдегида в качестве сшивающего агента

В качестве модифицирующего наполнителя использовали углеродные нанотрубки и магнетит. Синтез композитного материала проводили путем введения наночастиц в сеть полимера. Для этого на первоначальном этапе в случае магнетита проводили модификацию поверхности частиц с целью образования на их поверхности реакционноспособных функциональных групп. А затем модифицированные наночастицы вместе с углеродными нанотрубками вводили в раствор предварительно синтезированного гидрогеля [2].



Рис. 2. Схема синтеза композитного гидрогеля методом сшивания

В ходе данной работы были получены токопроводящие и магнитовосприимчивые гидрогелевые материалы. Данные гидрогели являются чрезвычайно перспективными для широкого спектра медицинских применений - от локализованной терапии до регенерации тканей и

диагностики. Кроме того, мягкая и эластичная гидрогелевая структура обеспечивает композитным материалам высокую деформируемость, что также важно для биомедицины.

Литература

1. Kunal P., Ajit K., Dipak K. Preparation and Characterization of Polyvinyl Alcohol–Gelatin Hydrogel Membranes for Biomedical Applications // AAPS PharmSciTech. 2017. Vol. 8. №. 21.
2. Shakeria A., Taghvay M., Farnaz G. Preparation of polymer-carbon nanotubes composite hydrogel and its application as forward osmosis draw agent // Journal of Water Process Engineering. 2018. Vol. 24. P. 42-48.

© Лимаренко В.И., Фомина Е.Д., Крапивко А.Л., 2025

УДК 678

ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА И ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА

Макогон А.А., Базунова М.В.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В настоящее время полипропилен (ПП) широко используется в различных сферах, благодаря своим уникальным свойствам: химической стойкости, прочности, теплостойкости и ряду других преимуществ. Поливинилиденфторид (ПВДФ) сегодня становится все популярнее благодаря высоким пьезоэлектрическим свойствам, прочности и химической стойкости. Поэтому данная работа, связанная с исследованием улучшения свойств вышеупомянутых полимеров, в частности теплостойкости, является актуальной.

В качестве опытных образцов использовались: полипропилен (ПП) марки H350FF/3 (Сибур), поливинилиденфторид (PVDF). В качестве наполнителя использовалось стекловолокно (СВ) для стеклоткани И-200 (АО Стеклонит). Модификация полимерного композита на основе полипропилена данным наполнителем должно смещать температуру плавления и кристаллизации в область более высоких температур [1].

Отжиг — это процесс термической обработки, используемый для улучшения свойств пластмасс путем снятия внутренних напряжений, которые могут быть вызваны производственными процессами или факторами окружающей среды. Процедура отжига заключалась в постепенном нагреве образцов до температуры вблизи температуры плавления каждого из них (для ПП – 125-150 °С, для PVDF - 110-168 °С). После достижения температуры плавления, нагрев останавливался и образцы помещались на горизонтальную поверхность без доступа солнечных лучей.

Для контроля возможных изменений химической и надмолекулярной структуры полимерной матрицы образцов в результате отжига использовалась ИК-спектроскопия. Как следует из результатов исследования, в случае индивидуального ПП температурная закалка практически не влияет на степень кристалличности ПП, а в присутствии наполнителей интенсивность полос кристалличности незначительно увеличивается.

Одним из показателей изменения степени кристалличности полимерной матрицы в результате температурного отжига является изменение физико-механических свойств полимерных материалов. В качестве метода оценки данных изменений выбрано испытание на статический изгиб. Установлено, что введение неорганического наполнителя (СВ) существенным образом влияет на отклик физико-механических характеристик образцов композитов на основе ПП на температурный отжиг.

Одними из самых значимых показателей теплостойких материалов являются температура размягчения и коэффициент термического расширения (КТР) образцов. В данной работе данные показатели до и после отжига определяли методом термомеханического анализа.

Таблица 1

Значения температуры размягчения некоторых опытных образцов до и после отжига

	Содержание наполнителя, %	КТР·10 ⁻⁶ , 1/К		Температура размягчения, °С	
		До отжига	После отжига	До отжига	После отжига
ПП+СВ	0	148,5	129,5	145,1	149,5
	5	130,3	132,1	146,3	152,1
	10	89,8	123,4	149,8	153,4
PVDF+СВ	0	160,7	238,0	140,0	140,1
	3	103,3	125,4	141,2	143,1
	5	76,2	88,9	143,4	147,9

Для большинства образцов на основе ПП и PVDF, подвергнутых температурному отжигу, наблюдается увеличение степени кристалличности, при этом существенного изменения физико-механических характеристик не происходит. Температура размягчения образцов на основе PVDF после

отжига незначительно увеличивается и ее значения достигают величины 148°C в случае композитов PVDF+CB 5%. Стоит отметить, что присутствие CB в композите существенно снижает его КТР (на 40-50 %) (табл. 1).

Таким образом, температурный отжиг влияет на надмолекулярную структуру и степень кристалличности исследованных термостойких материалов. Для материалов на основе ПП можно утверждать, что присутствие CB приводит к улучшению значений физико-механических характеристик в результате температурного отжига. В целом, проведение температурного отжига для композитов ПП и PVDF с CB вполне оправдано.

Литература

1. Псянчин А.А., Захарова Е.М., Бабунова М.В., Захаров В.П. // Бутлеровские сообщения. – 2023. – Т. 75, № 9. – С. 33-39.

© Макогон А.А., Бабунова М.В., 2025

УДК 541.64

СИНТЕЗ ГИДРОГЕЛЕЙ ИЗ АКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ И НОВОГО КРОСС-ЛИНКЕРА 3,4-ДИМЕТАКРИЛКАРБОКСИСУЛЬФОЛАН

Мулюкова С.М., Сагитова А.Ф., Королев И.Н., Мингалеева Г.Р.

Мингалеев В.З.

Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Сетчатые гидрогели, представляющие собой класс биосовместимых полимеров, обладают значительным потенциалом для применения в различных областях биомедицины, в качестве платформы для адресной доставки терапевтических агентов, компонентов контактных линз, роговичных имплантатов в регенеративной медицине [1].

В работе получены гидрогели из акрилата натрия, где впервые в качестве кросс-линкера использовали 3,4-диметакрилкарбоксисульфолан.

Производные сульфолана обладают выраженной противовоспалительной активностью, очень низкой токсичностью и хорошей растворимостью [2].

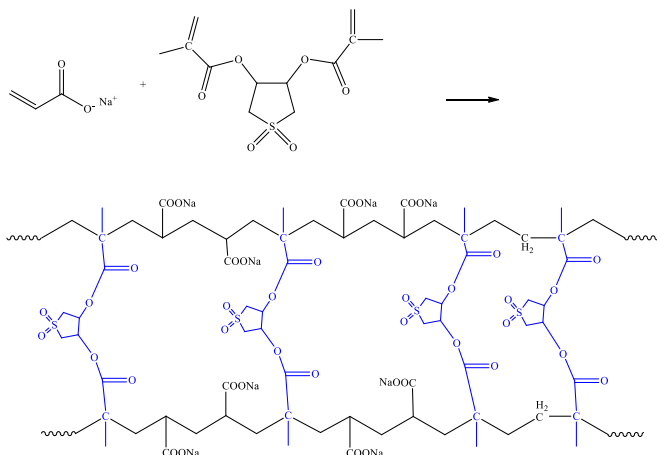


Рис. 1. Схема реакции синтеза гидрогеля

3,4-Диметакрилкарбоксисульфолан имеет низкие значения DL_{50} (5,8 г/кг) DL_{84} (10 г/кг), что делает его привлекательным в качестве сшивающего агента для получения гидрогелей для медицинских приложений. Он был синтезирован из 3,4-дигидроксисульфолана и хлорангидрида метакриловой кислоты в присутствии пиридина при 65-70 °С [3].

Полученные гидрогели были исследованы на реологические и набухающие свойства в зависимости от содержания сшивателя: 1 мг - для NaPAA-1 и 2 мг - для NaPAA-2.

Молекулярные параметры полученных гидрогелей оценивались на основе модуля сдвига (G), отражающего упругие свойства материала и его устойчивость к сдвиговым деформациям. Для расчета модуля сдвига на основе реологических данных использовалась обобщенная вязкоупругая модель Максвелла (таблица 1), более подробно описанная [4].

Таблица 2

Реологические показатели акрилата натрия

Шифр	G	ν , моль/м ³	ξ , ячейка, нм	Mc, кг/моль
NaPAA-1	1225,62	0,49	18,57918	20,21485
NaPAA-2	1489,959	0,6	17,40819	16,62846

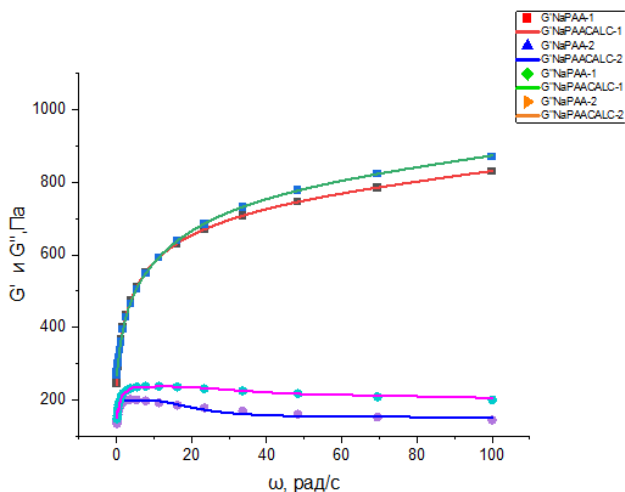


Рис. 2. Зависимость модуля накопления G' и модуля потерь G'' от угловой частоты для гидрогелей. По всем осям используется линейный масштаб. Точки – экспериментальные значения, линии – расчет с использованием обобщенной вязкоупругой модели Максвелла

Литература

- 1.Stojkov G. et al. //Gels. – 2021. – Т. 7. – № 4. – С. 255.
- 2.Камалова, Э. Г. // Фармакология и токсикология. – 1979. – Т. 42, № 3. – С. 261-265.
- 3.Tolstikov G.A., Novitskaya N.N., Flekhter B.V. et al. // Pharmaceutical Chemistry Journal. – 1978. – Vol. 12, No. 12. – P. 33-38.
- 4.Mingaleeva G.R., Abdurahimov T.D., Yakupova L.R., Zaharova E.M., Mingaleev V.Z. // Russian Journal of General Chemistry. 2024. V. 94. N10. P. 2638–2646

© Мулюкова С.М., Сагитова А.Ф., Королев И.Н.,
Мингалеева Г.Р., Мингалеев В.З., 2025

УДК 544.77

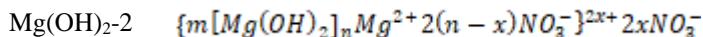
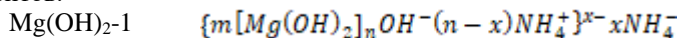
ПОЛУЧЕНИЕ ПОЛИМЕР-КОЛЛОИДНЫХ ДИСПЕРСИЙ НА ОСНОВЕ КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ ГИДРОКСИДА МАГНИЯ, СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ ПОЛИ-N-ВИНИЛПИРРОЛИДОНОМ Мустафина С.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В настоящее время ультрадисперсные системы в виде коллоидов, полимерных нанокомпозитов и наночастиц нашли широкое применение в промышленности и медицине. В последнее время растет интерес к полимер-коллоидным системам на основе водорастворимых полимеров и наночастиц лиофобных зольей [1]. Прежде всего это связано с возможными

перспективами их использования в медицине, фармацевтике, парфюмерно-косметологической и нефтяной промышленности.

В данной работе изучены возможности стабилизации отрицательно и положительно заряженных мицелл золя гидроксида магния водорастворимым синтетическим физиологически-активным полимером ПВП. Для получения полимер - коллоидных дисперсий на основе ПВП и золь $Mg(OH)_2$ навеску полимера определенной массы добавляли в свежеприготовленный золь гидроксида магния в различном соотношении компонентов.



Присутствие макромолекул полимера (ПВП) в золе приводит к однозначному увеличению его агрегативной устойчивости, о чём свидетельствуют изменение характера зависимости оптической плотности систем от времени. ПКД сохраняют устойчивость в течение более длительного времени, чем золь гидроксида магния. Причем, ПКД на основе золя гидроксида магния с положительно заряженными коллоидными частицами более устойчивы, чем ПКД с отрицательно заряженными частицами золя. О стабильности ПКД говорит и отсутствие увеличения размеров частиц ПКД в течение более длительного времени, чем в случае золя без полимерного стабилизатора. Устойчивость ПКД возрастает с ростом концентрации полимера. Так, система ПВП-золь $Mg(OH)_2-2$ с положительно заряженными коллоидными частицами является устойчивой (от 6 суток в зависимости от концентрации полимера). В случае системы ПВП-золь $Mg(OH)_2-1$ наблюдается меньшая устойчивость (от 5 суток в зависимости от концентрации полимера).

Литература

1. Bazunova M.V., Chernova V.V., Kulish E.I. Russian Journal of Physical Chemistry B. 2024. V.18. N.5. P. 1358-1388

© Мустафина С.А., 2025

УДК 541.64

ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАТОРОВ НА ПРОЦЕСС ВЫСВОБОЖДЕНИЯ ЦЕФАЗОЛИНА ИЗ ЖИДКОЙ ЛЕКАРСТВЕННОЙ ФОРМЫ НА ОСНОВЕ ПЕКТИНА

Мухамедзянова Д.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В настоящее время полимерные лекарственные формы приобрели особую популярность. Выделяют жидкие (растворы, суспензии, эмульсии), мягкие (мази, гели, суппозитории, пленки) и твердые формы (таблетки, капсулы, порошки, драже). Жидкие лекарственные формы (ЖЛФ) особенно

удобны благодаря высокой биодоступности, биосовместимости, стабильности, гибкости дозирования и простоте применения. Однако они обладают рядом недостатков, среди которых основным является быстрое высвобождение лекарства (ЛВ), что приводит к необходимости частого дозирования, колебаниям концентрации препарата в крови и снижению терапевтической эффективности. Кроме того, ЖЛФ могут быть химически и физически нестабильными, что ограничивает их срок годности. Для преодоления ограничений, связанных с быстрым высвобождением ЛВ, разрабатываются методы модификации ЖЛФ. К ним относятся: использование матричных систем на основе полимеров, которые замедляют высвобождение активного вещества; инкапсуляция БАВ в липосомы или наночастицы; применение гелеобразующих систем, которые изменяют свои свойства под воздействием физиологических условий (например, температуры или pH) и т.д.

Одним из перспективных методов модификации является использование полимерных производных. В работе [1] было показано, что использование пектина в качестве основы для создания ЖЛФ позволяет пролонгировать высвобождение ЛВ.

В нашей работе для усиления эффекта пролонгации высвобождения ЛВ из ЖЛФ на основе пектина мы модифицировали полимерную матрицу используя сшивающие агенты. В качестве сшивающего агента использовали соли магния. В качестве модельного ЛВ – цефазолин (ЦФЗ). В процессе исследования было установлено, что увеличение концентрации лактата магния приводит к снижению скорости высвобождения ЦФЗ.

Таким образом, оптимизация концентрации сшивающих агентов может сыграть ключевую роль в формировании нужного профиля высвобождения ЦФЗ, что, в свою очередь, может существенно повлиять на его эффективность и продолжительность действия в лечебных целях.

Литература

1. Shurshina A., Afanasyeva M., Chernova V., Lazdina M., Kulish E. // Macromolecular Research. 2024. V. 32. № 3. P. 231-241.

© Мухамедзянова Д.А., 2025

УДК 541.64

ИССЛЕДОВАНИЕ ОБРАЗЦОВ ВТОРИЧНОГО ПОЛИЭТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТА, ПРЕДОСТАВЛЕННОГО АО «ПОЛИЭФ»

Мухаметдинов А.Д.

(руководитель: Кулиш Е.И.)

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Работа посвящена возможности вовлечению в рециклинг образцов вторичного полиэтилентерефталата (ПЭТФ). ПЭТФ составляет четвертую часть всех полимерных отходов, складываемых на полигонах. Благодаря

высокой стойкости к воздействию окружающей среды данные материалы на основе ПЭТФ сохраняются в естественных условиях в течение длительного времени (порядка 80 лет). Первым и наиболее важным шагом в вовлечении отходов ПЭТФ в рециклинг является идентификация типа вторичного полимерного материала. Поэтому для установления возможности использования вторичного ПЭТФ в том или ином виде материалов, необходимо тщательно охарактеризовать вторичное сырье, что и стало целью данной работы.

В работе использованы методы ИК-спектроскопии, а также реологические методы – определение показателя текучести расплава (ПТР) и динамической вязкости в режиме сдвига и осцилляции. В исследовании участвовали 10 образцов, предоставленных заводом «Полиэф» (ПАО Сибур, Благовещенск, Башкортостан). Образец №10 представлял собой образец исходного ПЭТФ. Образец №9 – полимерный компаунд, с содержанием 25% вторичной фракции, полученной из потребительских отходов. Образцы 1 и 2 – отходы переработки вторичного ПЭТФ первой и второй категории, соответственно. Образцы 3,4, 6 и 5,7 и 8 – отходы, полученные при синтезе ПЭТФ первой и второй категории, соответственно. ИК-спектры исследуемых образцов проводились на ИК-Фурье спектрометр «IRAffinity-1S» (Shimadzu, Япония) с приставкой НПВО. В работе были оценены значения показателя текучести расплава (при 260°C) и динамической вязкости, определенной в двух режимах – осцилляции и сдвига на модульном динамическом реометре HaakeMarsIII.

Исследование данных образцов методом ИК-спектроскопии показало, что только спектры образцов 1,2, 9 и 10 явно соответствуют спектрам ПЭТФ. В остальных случаях ПЭТФ не идентифицируется. Значения ПТР образцов 1 и 2 также близки к образцам 9 и 10. Остальные образцы характеризуются крайне высокими значениями ПТР, что говорит о высокой вязкости образцов. Реологические исследования отходов ПЭТФ показали, что кроме образцов №1, 9 и 10 значения вязкости не обладают сходимостью.

© Мухаметдинов А.Д., 2025

УДК 614.841.332

ПОЛУЧЕНИЕ ОГНЕСТОЙКОГО ЖЁСТКОГО ПЕНОПОЛИУРЕТАНА И ИЗУЧЕНИЕ ЕГО СВОЙСТВ

Никифоров Г.А., Фомина Е.Д., Рябков Е.Д., Гервальд А.Ю.

*МИРЭА – Российский технологический университет, Институт тонких
химических технологий им. Ломоносова, Москва, Россия*

Жёсткий пенополиуретан широко используют в строительстве. Он является износостойким, газонепроницаем и теплостойким материалом,

который соответствует нормам экологической безопасности при его эксплуатации. Для получения жёстких пенополиуретанов используют сильно разветвлённые полиолы, которые способны образовывать полимеры с большой степенью сшивки. В работе изучали процесс получения жёсткого пенополиуретана, который обладает огнестойкими свойствами [1].

Для получения жесткого пенополиуретана смешивали компонент А и компонент Б. Компонент А готовили на основе полиэфиров линейного строения с большой молекулярной массой и разветвлённого с меньшей молекулярной массой. В качестве высокомолекулярного полиола использовали продукт сополимеризации окиси пропилена с окисью этилена на основе глицерина с молекулярной массой 4000 г/моль; в качестве разветвлённого полиола использовали низкомолекулярный (480 г/моль) полиол на основе сорбитола, содержащий карбонат кальция. В качестве катализатора полимеризации использовали октоат олова, катализатора реакции вспенивания – триэтилендиамин, агента вспенивания – дистиллированную воду. В компонент А добавляли также краситель, золу уноса и антипирен.

Компонент Б представлял собой форполимер на основе метилendiфенилдиизоцианата, который обладает низким уровнем токсичности. Форполимеры готовили смешением метилendiфенилдиизоцианата с низкомолекулярными полиолами с гидроксильным числом 280 мгКОН/г и 400-500 мгКОН/г.

Для полученных пен исследовали физико-механические свойства и огнестойкость. Показано, что исследуемые образцы обладают высокими показателями плотности, модуля упругости, твёрдости, а также огнестойкостью, о чем свидетельствовала способность пен к самозатуханию.

Таким образом, полученный в работе жёсткий пенополиуретан можно с успехом использовать в строительстве, например, в качестве герметика.

Литература

1. Sonnenschein, Mark. Polyurethanes (Science, Technology, Markets, and Trends) // POLYURETHANE FLEXIBLE FOAMS. – 2020. – P. 273-316. – ISBN 9781119669401

© Никифоров Г.А., Фомина Е.Д., Рябков Е.Д., Гервальд А.Ю., 2025

УДК 541.64

ПЛЕНОЧНЫЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ СМЕСИ ПОЛИМЕРОВ

Николайчук А.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В современных реалиях с увеличением частоты военных конфликтов, усилением антибиотикорезистентности микроорганизмов, повышенными требованиями к биосовместимости и экологической безопасности

материалов, а также развитием технологий персонализированной медицины особенно актуальна разработка новых пленочных покрытий для лечения ран различной этиологии. Современные покрытия должны удовлетворять таким требованиям, как биосовместимость, биodeградируемость, бактериостатичность, оптимальная влагопоглощающая способность, паро- и газопроницаемость. Интерес в качестве основы для создания таких покрытий представляют биополимеры, а в частности пектин (ПК) и сукцинат хитозана (СХТЗ). Они обладают собственной биологической активностью, а наличие функциональных групп в их структуре позволяет закреплять биологически активные вещества и модифицировать материал для создания систем с контролируемым высвобождением [1].

Несмотря на перспективность пленок из ПК и СХТЗ, они обладают рядом ограничений, таких как недостаточная механическая прочность, чувствительность к влаге, ограниченный контроль высвобождения лекарственных веществ, а также неоптимальные барьерные свойства.

Использование матрицы, полученной на основе смеси полимеров, позволяет устранить указанные недостатки за счет:

1. Увеличения механической прочности за счет комбинирования структурных особенностей обоих полимеров.
2. Оптимизации влагопоглощения, предотвращающей как пересыхание, так и избыточное набухание покрытия.
3. Контролируемого высвобождения активных веществ, обеспечивающего пролонгированный терапевтический эффект.
4. Улучшенных барьерных свойств, обеспечивающих баланс между защитой от микроорганизмов и необходимым уровнем газообмена.

Таким образом, пленки на основе смеси полимеров пектина и сукцинат хитозана представляют собой перспективные ранозаживляющие покрытия, обеспечивающие оптимальное сочетание биосовместимости, механической устойчивости и функциональности, что позволяет значительно повысить эффективность лечения ран различной природы.

Литература

1. Shurshina A., Afanasyeva M., Chernova V., Lazdina M., Kulish E. On the possibility of obtaining soft dosage forms based on polyanionic polysaccharides with prolonged yield of drugs // *Macromolecular Research*. 2024. V. 32. № 3. P. 231-241.

© Николайчук А.А., 2025

АНАЛИЗ УПРУГО-ГИСТЕРЕЗИСНЫХ СВОЙСТВ НАПОЛНЕННЫХ ЭЛАСТОМЕРОВ ПРИ ВВЕДЕНИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ДОБАВОК

Острохижко Е.А., Меренкова Е.А., Карманова О.В.

*Воронежский государственный университет инженерных технологий,
Воронеж, Россия*

Вопрос перерабатываемости эластомеров связан с утилизацией изношенных автомобильных шин. Эта проблема имеет большое экологическое значение. Для того, чтобы решить её, используют термопластичные и жидкие пластификаторы, опасные для окружающей среды, так как в них содержится большое количество полициклических ароматических углеводородов [1], которые также могут негативно сказываться на термоокислительной стойкости эластомеров. Исследование направлено на решение актуальной проблемы снижения содержания нефтепродуктов в пластификаторах и разработки экологически безопасных добавок на основе карбоксилатов цинка, способствующих улучшению перерабатываемости эластомерных материалов [2].

Поэтому для решения данной проблемы были синтезированы технологически активные добавки (ТАД), изготовленные на основе экологически безвредных сырьевых материалов. В настоящее время в технологии шин и резинотехнических изделий для улучшения диспергирования наполнителей широко используется продукт иностранного производства марки Struktol A50. Разработанные ТАД представляют собой химикаты полифункционального действия, которые влияют на распределение наполнителей, улучшая перерабатываемость эластомеров путём воздействия на внутри- и межмолекулярные связи в каучуке [3].

Целью работы являлось изучение и анализ упруго-гистерезисных свойств эластомеров с применением испытуемых добавок, которые получены в ходе синтеза солей жирных кислот из оксида цинка и высших карбоновых кислот.

В работе был проведён синтез ТАД, представляющих собой карбоксилаты цинка различного стехиометрического состава (от 7 до 20 % мас. цинка) и на их основе были получены эластомерные композиции. Для получения резиновых смесей выбраны каучуки следующих марок СКИ-3, СКД и ККС-30АРК. Опытные ТАД вводили в количестве 5 мас.ч на 100 мас.ч. каучука. Вулканизаты, содержащие Struktol A50, в тех же дозировках использовались в качестве образца сравнения.

На основе экспериментальных данных построены диаграммы «растяжение-сжатие» с временем выдержки 30 секунд (рис. 1) и 5 минут (рис. 2), анализ которых показал, что у образцов в присутствии исследуемых

ТАД площадь петли гистерезиса меньше, чем у образца сравнения. Это означает, что энергопотери при динамических нагрузках будут существенно снижены.

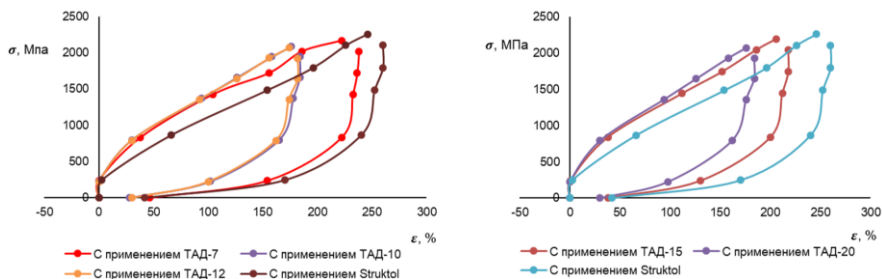


Рис. 3. Комбинированные диаграммы «растяжение-сжатие» (время выдержки 30 с)

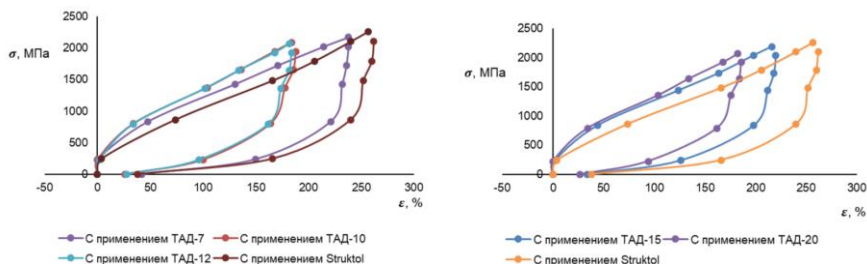


Рис. 4. Комбинированные диаграммы «растяжения-сжатие» (время выдержки 5 мин).

Таким образом, применение ТАД позволяет не только улучшить диспергирование наполнителей в каучуке, но и улучшить эксплуатационные характеристики резиновых изделий на их основе. Кроме того, регулируя содержание цинка при синтезе ТАД можно регулировать свойства получаемых вулканизатов.

Литература

1. Патент RU2531271C2. Способ получения нефтяного пластификатора / Нигматуллин И.Р., Нигматуллин В.Р., Константинова С.А. Заявл. 25.12.2012. Оpubл. 20.10.2014
2. Использование сопутствующих продуктов масложировой промышленности в рецептурах резиновых смесей / Л.В. Попова, О.В. Карманова, С.Г. Тихомиров, С.И. Корыстин // Каучук и резина. – 2008. – № 4. – С. 45-46.
3. Попова Л.В., Карманова О.В., Ревин П.С., Тарасевич Т.В. Нетрадиционные методы утилизации побочных продуктов масложировой промышленности // Экология производства. 2012. – № 12. – С. 42-45.

© Острожижко Е.А., Меренкова Е.А., Карманова О.В., 2025.

ПОЛУЧЕНИЕ ИОНООБМЕННОЙ СМОЛЫ
НА ОСНОВЕ МАЛЕИНОВОГО АНГИДРИДА

Пантелеев Н.А., Мухамедзянова А.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

На сегодняшний день, несмотря на огромные природные ресурсы, стоит острая проблема очистки и повышения качества воды. Содержание в воде растворенных солей кальция, магния и других поливалентных катионов, придает ей свойство, называемое жесткостью. Жесткая вода снижает эффективность мыла, вызывает образование накипи на стенках котлов и в трубах, имеет металлический привкус, наносит ущерб здоровью людей. Одним из наиболее эффективных и доступных способов умягчения воды является метод, основанный на использовании ионообменных смол, способных замещать ионы кальция и магния жесткой воды на катионы щелочных металлов. В целях повышения селективности, безопасности и снижения стоимости очистки воды предложен синтез ионообменной смолы на основе малеинового ангидрида, карбоксильные группы которого способны связывать катионы двухвалентных металлов с образованием устойчивых комплексов [1,2].

Синтез ионообменной смолы проводили в три стадии: этерификация акриловой кислоты и бутанола, сополимеризация полученного бутилакрилата с малеиновым ангидридом в присутствии инициатора АИБН, сшивание полимера этиленгликолем для получения сетчатой структуры. Определены оптимальные условия синтеза ионообменной смолы на основе малеинового ангидрида, акриловой кислоты, бутилового спирта и этиленгликоля. Выход бутилакрилата на первой стадии составил 93%.

Установлено, что скорость сополимеризации бутилакрилата с малеиновым ангидридом в присутствии инициатора АИБН выше при использовании в качестве растворителя бензоле, по сравнению с ацетоном.

Целевая ионообменная смола успешно прошла апробацию в снижении жесткости технической воды, используемой в процессах водоподготовки и организации оборотного водоснабжения на предприятии ООО «Акрил Салават». Показатель теоретической обменной емкости смолы составил 24%, фактической – 18%.

Литература

1. Liu G., Xue M. et al. Maleic anhydride-allylpolyethoxy carboxylate copolymer as an effective and environmentally benign inhibitor for calcium carbonate in industrial cooling systems //Royal Society of Chemistry Advances. 7, 24723. – 2017.
2. Liu X., Pang S. et al.. Preparation of a polymer-based weak cation exchanger for ion chromatography via atom transfer radical polymerization //Journal of Chromatography A. 1648, 462187. – 2021

© Пантелеев Н.А., Мухамедзянова А.А., 2025

ИЗУЧЕНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РАСТВОРОВ
ПОЛИЛАКТИДА

Пляшечникова Д.В.

(руководитель: Лаздин Р.Ю.)

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Биодеградируемый полимер на основе молочной кислоты (полилактид) является крайне перспективным полимером для медицины. Его отличает биосовместимость с тканями организма и биодеградируемость. Полилактид обладает термопластичностью и растворимостью в большом числе растворителей. Варьирование концентрации полимера в растворе и природы растворителя позволяет регулировать как реологические характеристики раствора полимеров, так и некоторые свойства материалов, получаемых из растворов.

Данная работа посвящена изучению реологических свойств растворов полилактида. В работе использовали образец полилактида (ПЛ) марки L175 (Product Data Sheet Luminy). В качестве растворителя использовали трихлорметан марки х.ч. производства ЗАО «Вектор» (Россия) без дополнительной очистки. ПЛ подвергался предварительной сушке при 65°C в течении двух суток [1]. Концентрация ПЛ в растворе варьировалась от 1 до 20 г/дл. Реологические исследования проводили на модульном динамическом реометре Haake Mars III (Thermo Fisher Scientific, США) в осцилляционном режиме при температуре 190°C в диапазоне амплитуд от 0,1 до 10 Па и частот осцилляции от 0,1 до 10 Гц. Испытания получаемых материалов на разрыв определяли на универсальной испытательной машине ShimadzuAGS-X. Толщина пленочного материала составляла $\pm 0,3$ мм.

В ходе работ было установлено, что повышение концентрации ПЛ в растворе позволяет варьировать надмолекулярную структуру ПЛ последовательно от разбавленного раствора, для которого характерно ньютоновское поведение, до упруго-вязкого нетекучего геля, с явно выраженным преобладанием значений модуля накоплений над модулем потерь. Важно то, что пленочные материалы, полученные из растворов с различной исходной надмолекулярной структурой характеризуются различными свойствами.

Литература:

1. Бакирова Э.Р., Лаздин Р.Ю., Шуршина А.С., Чернова В.В., Захарова Е.М., Кулиш Е.И.. Влияние условий получения материалов на основе полилактида на их физико-механические и реологические характеристики. Химическая физика. 2024. Т. 43. № 3. С. 95-102.

© Пляшечникова Д.В., 2025

ВЛИЯНИЕ АЛЮМОСИЛИКАТНЫХ МИКРОСФЕР НА РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА

Пыжьянова А.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Известно, что композиционным материалом считается материал, состоящий из двух и более компонентов с четкой фазовой границей. С целью усиления желательных и ослабления нежелательных свойств полимерной матрицы в нее вводят наполнители. В подавляюще большом числе случаев они обеспечивают повышение прочности или других свойств полимерных материалов. Например, каолин способствует значительному повышению вязкости, а также повышает модуль упругости, улучшает электрические свойства и увеличивает влагостойкость. Тальк отличается низкой абразивностью, придает композитам повышенную жесткость.

Включение алюмосиликатных микросфер в состав пластмасс и композитов повышает их прочность, устойчивость к воздействию химических веществ и термостойкость.

Однако, количество вводимого наполнителя может оказать принципиально важную роль не только на комплекс проявляемых материалом свойств, но и на особенности переработки полимеров, поскольку введение нетекучего компонента может резко ухудшить его реологические характеристики. Таким образом, основополагающим при создании композитов на основе термопластов, таких, например, как ПП должно стать соблюдение баланса между условиями их получения (главным образом реологических характеристик) и комплексом формируемых свойств.

В ходе проведенного исследования было установлено, что наполнение полипропиленовой матрицы наполнителем (алюмосиликатными микросферами) сопровождается усложнением перерабатываемости композиции, а именно – увеличением максимального крутящего момента, уменьшением показателя текучести расплава и увеличением вязкости. Доказано, что использование в качестве способа приготовления метода прессования более предпочтительно, нежели метода литья под давлением, так как в последнем более выражены деструктивные процессы. Не рекомендуется наполнение композиции более чем 30 мас.ч. алюмосиликатных микросфер в связи со значительным увеличением вязкости расплава.

© Пыжьянова А.А., 2025

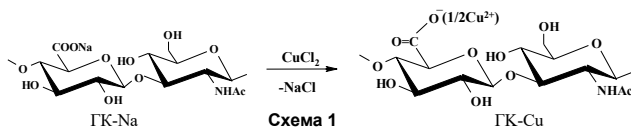
УДК: 547.995.1

ПОЛУЧЕНИЕ ГИАЛУРОНАТА МЕДИ КАТИОНООБМЕННОЙ РЕАКЦИЕЙ $\text{Na}^+/\text{Cu}^{2+}$ В СУСПЕНЗИОННОЙ СРЕДЕ

Рахимова Л.Ю., Башловкин С.К., Понеделькина И.Ю.

Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Медь (II), жизненно важный элемент, входит в состав ряда ферментов – тирозиназы, цитохромоксидазы, стимулирует кроветворную функцию костного мозга. Медь обладает противовоспалительными, иммуномодулирующими, противоопухолевыми, антимикробными и антигрибковыми свойствами. Гиалуроновая кислота (ГК) известна своими уникальными репаративно-регенеративными свойствами, широко применяется в медицине и косметике и представляет собой Na^+ соль (ГК-Na). К настоящему времени известны комплексные соединения ГК-Na с солями меди, также известен способ получения гиалуроната меди (ГК-Cu) катионообменной реакцией $\text{Na}^+/\text{Cu}^{2+}$ (схема 1) в среде $\text{H}_2\text{O}/\text{C}_2\text{H}_5\text{OH}$ (80:70), в которой ГК-Na растворяется [1].



Нами был впервые осуществлен способ получения ГК-Cu в суспензионной среде, технологически удобный для выделения и высушивания продукта катионного обмена $\text{Na}^+/\text{Cu}^{2+}$: мелкодисперсный порошок ГК-Na суспендировали в изопропиловом спирте (ИПС), затем медленно добавляли раствор безводного CuCl_2 (мольное соотношение ГК-Na: CuCl_2 =2:1) в ИПС, содержащем 1% пропиленгликоля. Далее приливали H_2O до концентрации ИПС 80% об., поддерживая pH 4.0-4.5, время реакции 15-20 мин. при комнатной температуре. Осадок ГК-Cu зеленоватого цвета фильтровали, промывали сначала 80% ИПС, затем безводным ИПС и высушивали. Для водного раствора ГК-Cu уширенный пик поглощения в УФ-спектре наблюдался в области 780-830 нм и демонстрировал гипсохромный сдвиг по сравнению с CuCl_2 (810-850 нм). Содержание Cu, найденное методом комплексонометрии в присутствии индикатора мурексид А (pH 8-9), составило 6.47% мас. (степень замещения $\text{Na}^+/\text{Cu}^{2+}$ 83.5%).

Литература

1. Pat. EP 2559708A1 (publ. 2013). Process for producing hyaluronic acid metal salt, process for producing cosmetic containing hyaluronic acid metal salt, and zinc hyaluronate and process for producing same.

© Рахимова Л.Ю., Башловкин С.К., Понеделькина И.Ю., 2025

ПОЛИМЕРНАЯ КОМПОЗИЦИОННАЯ СМЕСЬ С РАЗЛИЧНЫМИ
СФЕРАМИ ПРИМЕНЕНИЯ

Рябова В.О., Рогов В.Е.

Байкальский институт природопользования СО РАН, Улан-Удэ, Россия

Полимерные композиционные материалы (ПКМ) создаются путем соединения полимерной матрицы с наполнителями для улучшения характеристик. Их преимущества обусловлены возможностью получения уникальных свойств, регулируемых составом.

В работе представлена полимерная смесь на основе высокомолекулярных солей полигексаметиленгуанидина (ПГМГ), которая может использоваться как антимикробный и огнезащитный компонент. ПГМГ перспективны для применения в промышленности и строительстве, особенно в водоразбавляемых лакокрасочных материалах (ЛКМ), обеспечивая защиту от микроорганизмов и плесени. Также, ПГМГ могут использоваться как добавка в строительные материалы в качестве антипиренов. Разработка эффективных методов повышения огнестойкости ПКМ является приоритетной задачей. ПГМГ удовлетворяют требованиям к биоцидам, обеспечивая защиту от биологического разрушения и совместимость с компонентами ЛКМ.

В работах [1] и [2] изучены пленки из ПВС и полигексаметиленгуанидин гидрохлорида, полученные в воде, с акцентом на процесс изготовления [1] и анализ краевого угла смачивания (Θ) [2]. Результаты показали гидрофильность пленок (хорошее смачивание водой), что свидетельствует о высокой адгезии. Авторы создали гидрофильные пленки из полимерной смеси и подтвердили их гидрофильность измерением краевого угла смачивания, что указывает на хорошее взаимодействие пленки с водными средами. Предполагается, что при нанесении на поверхность пленка будет длительно сохранять свойства и проявлять биоцидную активность.

Смачиваемость в огнезащитных растворах оказывает влияние на огнестойкость древесины хвойных пород, таких как сосна и тополь. При этом высокая концентрация огнезащитных растворов приводит к существенным различиям в углах смачивания (от 50° до 80°).

Так, гидрофильные материалы при нагревании начинают активно выделять ранее поглощенную влагу и играют важную роль в поведении строительных материалов при воздействии огня.

В целях определения степени пожароопасности древесных материалов были исследованы физико-химические процессы, возникающие при воздействии высоких температур на образцы древесины как лиственных, так

и хвойных пород. Для регистрации этих процессов был использован термический анализ.

Для проведения термического анализа образцов древесины применялся метод дифференциально-сканирующей калориметрии в сочетании с термогравиметрическим методом (см. рис. 1). Термический анализ проводился в температурном диапазоне от 30 до 800 °C со скоростью нагрева 10 °C/мин.

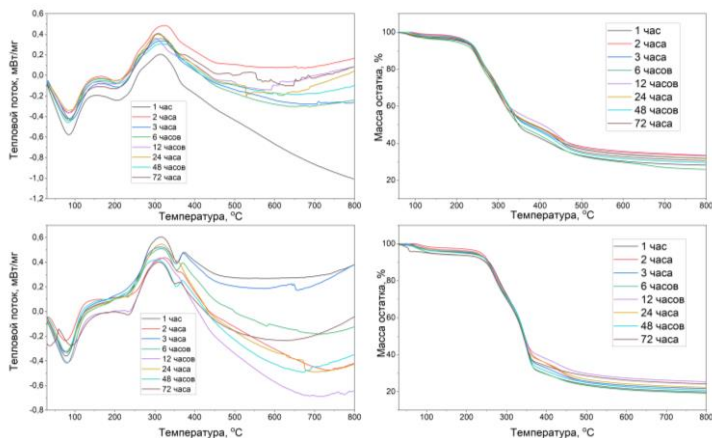


Рис. 1. Кривые ТГ-ДСК древесины ДСП и сосны

При термической обработке сосны и ДСП в диапазоне 50-230 °C удаляется гигроскопическая влага. При нагреве до 200-230 °C начинается деструкция целлюлозы. Экзотермический пик при 328-350 °C указывает на декристаллизацию целлюлозы и разрушение ее кристаллической структуры.

В ходе настоящего исследования были использованы методы синхронного термического анализа, включающие дифференциальную сканирующую калориметрию и термогравиметрический анализ, для изучения образцов древесины. В дальнейшем планируется провести исследования, направленные на повышение огнестойкости полимерных композиционных материалов путем добавления в их состав неорганических соединений.

Литература

1. Окладникова В.О., Очиров О.С., Григорьева М.Н., Стельмах С.А. Полимер-полимерная смесь поливинилового спирта и полигексаметиленгуанидин гидрохлорида для задач антимикробной защиты поверхностей // Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология. – 2022. – Т. 12., № 4. – С. 627-632.
2. Рябова В.О., Аюрова О.Ж., Очиров О.С., Григорьева М.Н., Стельмах С.А. Термомеханические и механические свойства биоцидных материалов на основе полигексаметиленгуанидин гидрохлорида и поливинилового спирта. Известия вузов. Прикладная химия и биотехнология. 2024. – № 14(1). – С. 27-34.

© Рябова В.О., Порог В.Е., 2025

СПОСОБЫ МОДИФИКАЦИИ ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЫ НА ОСНОВЕ
ПЕКТИНА

Седунова Е.Б.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Современная фармацевтическая промышленность предлагает широкий спектр лекарственных форм, однако не все они способны обеспечивать пролонгированное высвобождение действующего вещества. Это может приводить к снижению терапевтической эффективности вследствие недостаточного поступления препарата в целевой орган или его быстрого выброса, что, в свою очередь, повышает риск развития побочных эффектов. В связи с этим разработка лекарственных форм с контролируемым высвобождением является актуальной задачей.

Одним из перспективных решений для создания пролонгированных лекарственных форм является применение полимерных материалов. В зависимости от типа лекарственной формы полимер может выполнять функцию носителя либо служить пролонгатором, регулирующим скорость высвобождения. Среди различных полимеров, используемых для создания пролонгированных лекарственных форм, особый интерес представляет пектин, который обладает такими преимуществами, как: биосовместимость, антибактериальные свойства, гелеобразующие свойства (способность формировать вязкие структуры, регулирующие высвобождение лекарственного вещества), биodeградируемость. Но в ряде случаев для усиления эффекта пролонгирования высвобождения биологически активных веществ необходима модификация полимерной матрицы. Например, за счет применения сшивающих агентов [1]. Или же использования соразтворителей для модификации полимерной матрицы [2]. Так, введение глицерина приводит к уменьшению скорости высвобождения лекарственного вещества, что сопровождается усилением пролонгирующего действия полимера на выход лекарства из жидкой лекарственной формы за счет повышения общей вязкости системы.

Таким образом, модифицированный пектин представляет собой перспективный материал для разработки пролонгированных лекарственных форм, соответствующих современным требованиям к эффективности, безопасности и удобству применения.

Литература

1. Shurshina A., Afanasyeva M., Chernova V., Lazdina M., Kulish E. On the possibility of obtaining soft dosage forms based on polyanionic polysaccharides with prolonged yield of drugs // *Macromolecular Research*. 2024. V. 32. № 3. P. 231-241.
2. Shurshina A.S., Galina A.R., Lazdin R.Y., Chernova V.V., Kulish E.I. Influence of modifying additives on the process of the release of medicinal substances from liquid medicinal forms // *Russian Journal of Physical Chemistry B*. 2021. V. 15. № 4. P. 724-731.

© Седунова Е.Б., 2025

О ВОЗМОЖНОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ ПОРИСТЫХ
РАНЕЗАЖИВЛЯЮЩИХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ КОМПОЗИЦИЙ
ПОЛИСАХАРИДОВ И НАНОЧАСТИЦ ЙОДИДА СЕРЕБРА

Алмаев Б.С., Соснина Д.А.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В настоящее время ультрадисперсные системы в виде коллоидных растворов, порошков и гибридных полимерных нанокомпозитов широко применяются в различных областях науки и техники, таких как наноэлектроника, охрана окружающей среды и медицина. Широкий спектр медицинского использования возможен для препаратов на основе наноразмерного серебра. Однако, Ag^0 начинает проявлять антимикробные свойства только после поверхностного окисления, т.е. при образовании ионов Ag^+ . В то же время, водорастворимые соли серебра в некоторой степени токсичны и могут вызывать аргирию, в связи с чем, более перспективны для применения коллоидные растворы, например, золи йодида серебра. Коллоидные золи йодида серебра отличаются отсутствием мутагенного действия и не оказывают дестабилизирующего действия на мембраны эритроцитов [1]. Одной из основных проблем получения лиофобных золей, к которым относятся и золи йодида серебра, является их термодинамическая неустойчивость и склонность к агрегации, обуславливающая необходимость стабилизации. Одним из эффективных способов является стабилизация макромолекулами. К тому же, введение полимеров в коллоидные растворы – это один из путей создания материалов на основе полученных полимер-коллоидных дисперсий (ПКД). Понятно, что агрегационная и седиментационная стабильность ПКД должна быть сопоставимой с временем формирования материала на основе данной ПКД.

Целью данной работы было изучение влияния полисахаридов натриевых солей N-сукцинилхитозана (СХТЗ) и карбоксиметилцеллюлозы на агрегативную и седиментационную устойчивость коллоидных частиц йодида серебра и подбор оптимального состава ПКД для получения пористых пластин методом лиофилизации.

Стабилизация полимерами, по сути, обусловлена либо увеличением вязкости дисперсионной среды (диффузионный фактор), либо специфической адсорбцией макромолекул на поверхности коллоидных частиц, создающей на их поверхности структурно-механический барьер, препятствующий слипанию частиц.

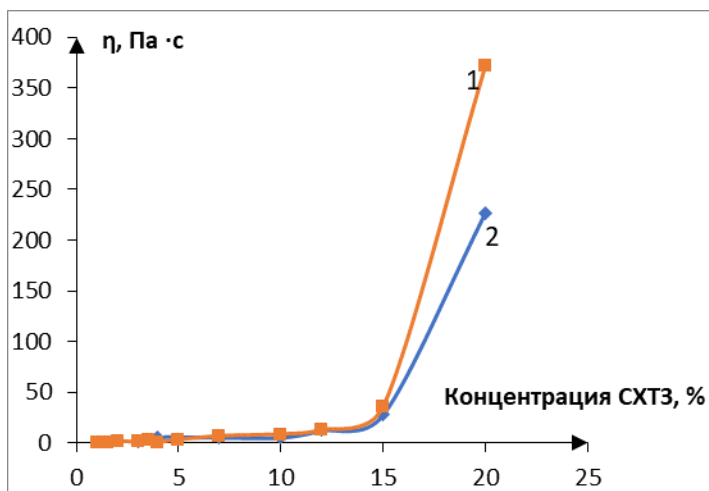


Рис. 1. Зависимость вязкости полимерных растворов от концентрации: индивидуальный СХТЗ (1), СХТЗ + Золь AgI 0,01N (2)

Как следует из данных, представленных на рисунке 1, существенное увеличение вязкости дисперсионной среды ПКД в случае коллоидных частиц йодида серебра полимером стабилизации СХТЗ наблюдается при концентрациях СХТЗ более 10-12 %, причем ПКД остаются агрегативно и седиментационно-устойчивы в широком интервале концентраций СХТЗ (от 1 до 20 %) в течении длительного времени (до 6 суток). Следовательно, и диффузионный фактор, и специфическая адсорбция вносят вклад в стабилизацию.

На основе ПКД получены пористые пластины с удовлетворительными деформационно-прочностными и сорбционными свойствами, которые могут быть использованы как ранезаживляющие покрытия.

Литература

1. Bazunova M.V. Stabilization of Silver Iodide Sol Particles by Acetate and N-Succinyl of Chitosan / M.V. Bazunova, V.V. Chernova, E.I. Kulish // Russian Journal of Physical Chemistry B. – 2024. – Vol. 18, No. 5. – P. 1382-1388.

© Алмаев Б.С., Соснина Д.А., 2025

Поликапролактон (ПКЛ) – биоразлагаемый полиэфир, который нашёл широкое применение во многих областях, наиболее важной из которых на сегодняшний день является медицина. Возможность модификации полимера позволяет получать новые материалы с точно отрегулированными химическими и физико-механическими свойствами. Например, в сердечно-сосудистой трансплантологии высоко оценены композиты на основе ПКЛ и природных полимеров, таких как хитозан и коллаген. Такие уникальные характеристики, как высокая адсорбционная способность, полное биоразложение, бактериостатичность и фунгистатичность, противоопухолевое воздействие, прочно укрепили позицию хитозана (ХТЗ) в тканевой инженерии. Целью данной работы стала оценка сорбционной способности материалов на основе поликапролактона и хитозана.

Композиты на основе ПКЛ-ХТЗ были получены на лабораторном пластографе. После процесса пластикации образцы композитов помещали в автоматический гидравлический пресс для формирования пленок. Эксперименты по сорбции воды пленками проводили при 100% влажности в термостатируемых условиях. Степень набухания определяли как отношение массы воды, поглощенной пленкой в определенный момент времени, к исходной массе пленки. Через некоторое время достигалась равновесная степень набухания, при которой пленочный образец прекращал дополнительно сорбировать воду [1].

На основании проведённых экспериментов установлено, что плёнки индивидуального полимера обладают небольшой водопоглощающей способностью. Равновесная степень набухания ПКЛ составила 1.2%. К существенному увеличению влагопоглощающей способности приводит добавление хитозана к поликапролактону. Значение равновесной степени набухания для композиции, содержащей 70 масс. ч. ХТЗ, составило 20%. Таким образом, можно сделать вывод, что присутствие ХТЗ в композициях на основе поликапролактона позволяет регулировать сорбирующую способность получаемого материала. Наполнение ПКЛ 70 масс. ч. ХТЗ приводит к поглощению композитами воды в 17 раз большем количестве, чем пленка индивидуального ПКЛ.

Литература

1.Бакирова Э.Р., Лаздин Р.Ю., Гизбуллина Е.М., Кулиш Е.И. Влияние условий переработки на некоторые характеристики поликапролактона. Бутлеровские сообщения, 2023. Т. 74, № 4. С. 72-76. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/23-74-4-72.

© Сунаргулов А.Б., Бакирова Э.Р., 2025

ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ ПЛЁНОЧНЫХ КОМПОЗИЦИЙ
НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА И ХИТОЗАНА

Сунаргулов А.Б.

(руководитель: Бакирова Э.Р.)

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Полилактид (ПЛ) – алифатический полиэфир, мономером которого является молочная кислота. В настоящее время ПЛ является наиболее часто используемым материалом в тканевой инженерии, регенеративной медицине, стоматологии, системах доставки лекарственных средств. К преимуществам полимера можно отнести экологичность, простоту производства, возможность вторичной переработки, компостируемость, биосовместимость и практически полное отсутствие канцерогенного воздействия. Индивидуальное применение этого материала в биомедицинских целях несколько ограничено из-за его некоторых физико-механических свойств. Решением данной проблемы стало включение функциональных наполнителей в матрицу ПЛ. Одним из наиболее удачных наполнителей при создании композиций стал природный полимер – хитозан. Хитозан (ХТЗ) – это полисахарид, полученный путём деацетилирования хитина. Полная биоразлагаемость, биосовместимость и противомикробная активность за счёт реактивных функциональных групп стали определяющими факторами, благодаря которым ХТЗ успешно применяется в медицине по сей день. Целью данной работы стало изучение сорбционных свойств плёночных композиций на основе полилактида и хитозана.

Процесс получения материала на основе ПЛ и ХТЗ осуществлялся путем переработки расплава на лабораторном пластографе. Прессование осуществлялось на автоматическом гидравлическом прессе. Эксперименты по сорбции воды пленками проводили при 100% влажности в термостатируемых условиях. Степень набухания определяли как отношение массы воды, поглощенной пленкой в определенный момент времени, к исходной массе пленки. Через некоторое время достигалась равновесная степень набухания, при которой пленочный образец прекращал дополнительно сорбировать воду [1].

В ходе эксперимента установлено: несмотря на то что ПЛ является гидрофильным полимером, его равновесная степень набухания невелика и составила 1.9 – 2.2%. Добавление в композицию ХТЗ приводит к увеличению влагопоглощающей способности. Так, для композиции, содержащей 70 масс. ч. ХТЗ, равновесная степень набухания составила 14 %. Наполнение ПЛ 70 масс. ч. ХТЗ приводит к увеличению водопоглощающей способности композитов в 7 раз большем количестве, чем плёнка индивидуального ПЛ.

Литература

1. Bakirova E.R., Lazdin R.Y., Shurshina A.S. [et al.]. Influence of Conditions for Obtaining Polylactide-Based Materials on Their Physical-Mechanical and Rheological Characteristics. Russian Journal of Physical Chemistry B. 2024. Vol. 18, No. 2. P. 549-554.

© Сунаргулов А.Б., 2025

УДК 541.124:542.952.6:547.313

ПРИМЕНЕНИЕ ЙОДИДА СЕРЕБРА В МАТРИЦЕ ХИТОЗАНА КАК ФОТОРЕЗИСТИВНЫЙ ДАТЧИК

Терегулов Т.Б

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Полисахариды привлекают большое внимание благодаря своим уникальным свойствам, таким как биосовместимость и способность образовывать тонкоплёночные материалы. Эти характеристики позволяют использовать его в различных областях, включая медицину, экологию и электронику. В задачах оптоэлектроники полисахарид – хитозан использован в качестве матрицы фоторезистора, с функциональной добавкой - частицы йодида серебра (AgI) [1, 2]. Йодид серебра имеет фоторезистивные свойства, которые использовались ранее для фотографирования. Такие композиты обладают оптическими и электрическими свойствами, что делает их привлекательными для разработки высокочувствительных и стабильных фоторезисторов. Механизм: под действием света в AgI возникают электронно-дырочные пары, что приводит к увеличению проводимости. То есть при воздействии на матрицу фотонами с энергией, превышающей ширину запрещенной зоны AgI, возникает генерация электронно-дырочных пар, что приводит к увеличению проводимости всего материала. Это явление лежит в основе работы фоторезистора, где изменение сопротивления под воздействием света используется для детектирования оптических сигналов.

В работе использовали хитозан со степенью деацетилирования 82% и молекулярной массой 80 кДа. Отрицательно заряженные наночастицы йодида серебра размером 50-80 нм получены путем смешения растворов нитрата серебра (х.ч.) и йодида калия (х.ч.) концентрацией 0,01 моль/л в объемном соотношении 7:10. Для создания полимер-коллоидных дисперсий растворы хитозана с концентрацией 2,0% смешивали с предварительно приготовленным золем йодида серебра в объемном соотношении 1:1.

Матрица формировалась на основе индивидуального хитозана и полимер-коллоидных дисперсий методом полива растворов на обезжиренную поверхность чашек Петри. На установке УВП-250 на

пленочные материалы был напылён алюминий. Для экспериментов использовались 3 вида лазера: УФ- излучение (длина волны 405+-10нм).

В проделанной работе видно (рис. 1), что композитные пленки хитозан-йодид серебра демонстрируют высокую чувствительность к воздействию УФ-излучения. На графике наблюдается значительное снижение сопротивления материала при облучении, что подтверждает эффективность генерации электронно-дырочных пар в йодиде серебра под действием света.

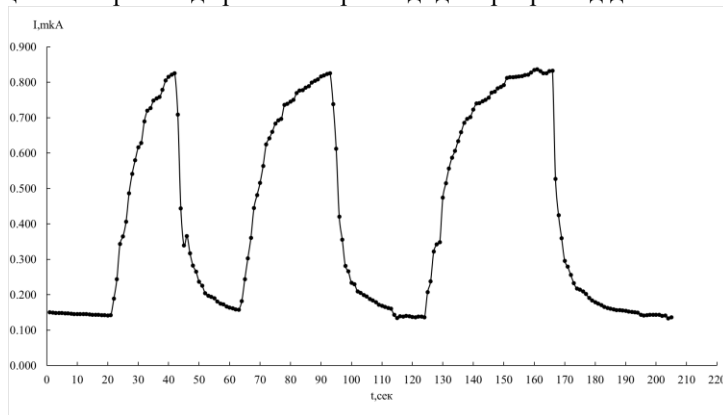


Рис. 5. График электропроводности матрицы от подаваемого излучения

Кинетика изменения проводимости имеет нелинейный характер, что может быть связано с процессами рекомбинации носителей заряда и особенностями переноса в полимерной матрице. Важно отметить, что стабильность характеристик сохраняется в течение многократных циклов облучения, что делает материал перспективным для практического применения.

Таким образом, полученные данные подтверждают, что композитные системы на основе хитозана и йодида серебра обладают высокой фоторезистивной активностью и могут быть использованы в оптоэлектронных устройствах, включая датчики УФ-излучения и элементы светочувствительных матриц.

Литература

1. Bazunova M.V., Chernova V.V., & Kulish E.I. (2024). Stabilization of Silver Iodide Sol Particles by Acetate and N-Succinyl of Chitosan. Russian Journal of Physical Chemistry B, 18(5), 1382-1388.
2. Нанокompозитные тонкопленочные материалы на основе полисахаридов и наночастиц иодида серебра для использования в сенсорных устройствах / М.В. Базунова, Р.Б. Салихов, Т.Б. Терегулов [и др.] // Журнал прикладной химии. – 2024. – Т. 97, № 4. – С. 347-353.
3. Кумар С., Кумар А. Bandgap Engineering of Silver Iodide for Optoelectronic Applications // Journal of Materials Chemistry C. – 2023. – Т. 11, № 15. – С. 5123-5135.

© Терегулов Т.Б. 2025

ВЛИЯНИЕ ОБРАБОТКИ ОЗОНОМ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА
ПОЛИ-3-ГИДРОКСИБУТИРАТАТюбаева П.М.^{1,2}, Варьян И.А.^{1,2}, Попов А.А.^{1,2}¹ ФГБОУ ВО РЭУ им. Г.В. Плеханова, Москва, Россия² ФГБУН ИБХФ им. Н.М. Эмануэля РАН, Москва, Россия

Биодеградация полимеров – это сложный многоступенчатый процесс, который протекает под влиянием множества и характеризуется разрушением макромолекул под действием аэробных или анаэробных микроорганизмов на продукты с более низкой молекулярной массой. Поли-3-гидроксibuтират (ПГБ) является одним из самых распространенных биодеградируемых полимеров бактериологического происхождения благодаря таким преимуществам, как: биосовместимость, термостабильность, устойчивость к гидролизу, возможность контроля надмолекулярной структуры и широкий диапазон молекулярных масс. В зависимости от степени кристалличности, морфологии поверхности и молекулярной массы ПГБ может разлагаться в почвенном грунте от 25 до 250 дней [1]. Цель данной работы: исследовать перспективы применения озона для модификации ПГБ и контроля скорости деградации ПГБ в почвенном грунте.

В результате серии исследований методами ДСК, РСА, ГПХ, СЭМ и экспонирования в лабораторном почвенном грунте в течение 300 дней было установлено, что озонирование пленок ПГБ в течение 5 часов приводит к снижению скорости биодеградации в 1,5 раза. Озонирование предотвращает фрагментаризацию образца, приводит к росту механической прочности с 25 до 42 Мпа, затрудняет диффузию деструкторов почвенного грунта в глубь образца, замедляя его деградацию.

Было показано, что озон может быть привлекательным окислителем, который взаимодействует со всей доступной поверхностью образца, а также является эффективным средством для стерилизации ПГБ. Перспектива использования озона для модификации поверхности, в частности для контроля скорости биодеградации может быть интересна в виду простоты и низкой стоимости реализации.

Литература

1. Волова Т.Г. Разрушаемые микробные полигидроксиканоаты в качестве технического аналога неразрушаемых полиолефинов // Журнал СФУ. Биология. 2015. № 2.

© Тюбаева П.М., Варьян И.А., Попов А.А., 2025

ВЛИЯНИЕ АЛЮМОСИЛИКАТНЫХ МИКРОСФЕР И СТЕКЛОВОЛОКНА НА ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИПРОПИЛЕНА

Хазиева Р.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Известно, что композиционными называют материалы, образованные объемным сочетанием двух или большего числа химически разнородных компонентов. В последние годы наиболее распространены полимерные композиционные материалы, в которых в качестве матрицы выступают полимеры. Наполненные композиционные материалы содержат в матрице наполнители – дисперсные (т.е. мелкие) частицы неорганических или органических веществ. Тщательное смешение компонентов как правило приводит к формированию у композиционного материала улучшенных характеристик –повышенных значений прочности, модуля упругости, ударной вязкости и др.

Ранее на кафедре Высокомолекулярных соединений и общей химической технологии были рассмотрены физико-механические свойства композиций на основе вторичных полиолефинов и наполнителей растительного происхождения [1]. Целью данной работы также стало изучение влияния количества вводимого наполнителя на физико-механические свойства формируемого композиционного материала, а именно, на значения модуля упругости полимерной матрицы и значений разрывного напряжения. В качестве полимерной матрицы –основы были использованы два полимера –полипропилен марки Н350FF/3 Сибур (ПП) и полипропилен марки бален– 01030. В качестве наполнителя были использованы алюмосиликатные микросферы и стекловолокно.

Установлено, что введение алюмосиликатных микросфер и стекловолокну в композицию на основе ПП марки Н350FF/3 приводит к увеличению значений модуля упругости и значений разрывного напряжения, в то время как введение изучаемых наполнителей в композицию на основе ПП-бален 01030 не приводит к положительным эффектам.

Литература

1. Базунова М.В., Чернова В.В., Салихов Р.Б., Кулиш Е.И., Захаров В.П. физико-химические свойства полимерных композитов на основе полиолефинов и их отходов и луги подсолнечника. Вестник Башкирского университета. 2018. Т. 23. № 1. С. 70-74.

© Хазиева Р.Р., 2025

РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОБРАЗЦОВ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ,
СИНТЕЗИРУЕМЫХ УКСУСНО-КИСЛЫМИ БАКТЕРИЯМИ

Хлескин В.С.

(руководитель: Кулиш Е.И.)

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Бактериальная целлюлоза (БЦ) является особым полимерным материалом, продуцируемым уксуснокислыми бактериями. В отличие от растительной целлюлозы, она не только отличается высокой прочностью, но и обладает эластичностью, выраженной пористостью и заметной биосовместимостью. Благодаря этим качествам БЦ рассматривается как перспективный материал для применения в медицине. К примеру, наряду с хитозаном [1], она отвечает требованиям, предъявляемым к материалам для изготовления раневых повязок: поддерживает оптимальную влажность, способствует нормальной теплоизоляции и обеспечивает доступ кислорода к поврежденной поверхности, одновременно выполняя защитную функцию от бактериальных инфекций и не вызывая аллергических реакций. Кроме того, поскольку в организме человека отсутствуют ферменты, способные разрушать целлюлозу, биодegradация БЦ происходит крайне медленно, что даёт возможность длительно использовать подобные покрытия.

В данной работе была исследована БЦ, синтезированная на кафедре биохимии и технологии микробиологических производств ФГБОУ ВО «УГНТУ». В качестве продуцентов использовали штаммы уксуснокислых бактерий *Komagataeibacter raeticus*, *Komagataeibacter sucrofermentans* и *Novoacetomonas hansenii*. Культивирование осуществляли в статических условиях в колбах на 250 мл в 50 мл питательной среды Хестрина-Шрамма следующего состава: глюкоза - 2%, дрожжевой экстракт -0,5%, пептон - 0,5%, двузамещенный фосфат натрия -0,27%, лимонная кислота -0,15%. В качестве дополнительного источника углерода использовали этанол (1%). Целью данного исследования была оценка реологического поведения синтезированных гелей БЦ. Вязкость измеряли на ротационном модульном реометре Thermo Scientific HAAKE MARS III в осцилляционном режиме. Диапазон частот осцилляции составлял от 0,01 до 10 Герц, геометрия конус –плоскость с диаметром 35 мм.

В ходе выполнения исследования установлено различие в вязкостных свойствах образцов БЦ, синтезированных разными штаммами бактерий.

Литература:

1.Sadritdinov A.R., Shurshina A.S., Elinson M.A., Kulish E.I. The research of physical and mechanical properties of plasticized chitosan films Vestnik Bashkirskogo Universiteta. 2016. T. 21. № 2. С. 332.

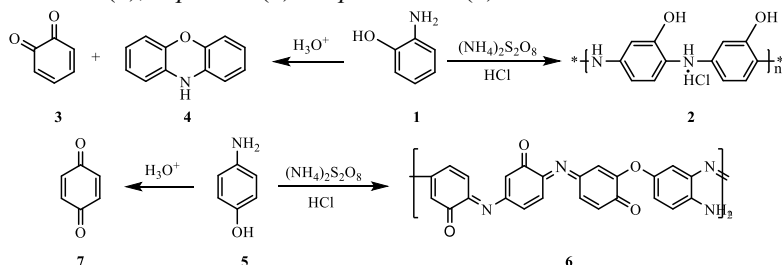
© Хлескин В.С., 2025

ОКИСЛИТЕЛЬНАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ ОРТО- И ПАРА-АМИНОФЕНОЛОВ

Шайдуллина Г.А.¹, Гимадиева А.Р.²¹Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия²Уфимский институт химии УФИЦ РАН, Уфа, Россия

Полианилин является одним из наиболее перспективных электропроводящих полимеров в силу простоты получения, низкой стоимости исходного мономера и способности изменять свои физико-химические свойства в зависимости от кислотности среды и степени окисления основной цепи полимера. Одним из основных способов улучшения технологичности полианилина является полимеризация производных анилина, например аминофенола (АФ). Ранее полиаминофенол (ПАФ) в основном получали электрохимическим окислением в кислых средах и использовали в качестве модифицированных электродов в биосенсорах [1-2] или электрохронных устройствах [3-4].

Нами изучена окислительная полимеризация *орто*-(**1**) и *пара*-(**5**)-аминофенолов действием персульфата аммония в мольном соотношении мономер:окислитель:кислота 1:1.25:1. В результате выделены полимеры **2** и **6** с выходами 49 и 37% соответственно. Низкая реакционная способность аминофенолов в полимеризации, вероятно, связана с образованием побочных продуктов окисления. При полимеризации *орто*-АФ (**1**) в качестве побочных продуктов возможно образование *орто*-хинона (**3**) и феноксазина (**4**), *пара*-АФ (**5**) - *пара*-хинона (**7**).



Литература

1. L. Castànon, A.J. Miranda Ortiers, P. Tuñon Blanco, Anal. Chim. Acta 346 (1997) 165.
2. M.A. Valdés Garcia, P. Tuñon Blanco, A. Ivaska, Electrochim. Acta 23 (1998) 3533.
3. T. Kobayaski, H. Honeyama, H. Tamura, J. Electroanal. Chem. 161 (1984) 419.
4. T. Ohsaka, S. Kunitamura, N. Oyama, Electrochem. Acta 33 (1988) 639.

© Шайдуллина Г.А., Гимадиева А.Р., 2025

ВЛИЯНИЕ МОДИФИЦИРУЮЩИХ ДОБАВОК НА ПРОЦЕСС ВЫСВОБОЖДЕНИЯ ЛЕКАРСТВЕННОГО ВЕЩЕСТВА ИЗ ЖИДКОЙ ЛЕКАРСТВЕННОЙ ФОРМЫ НА ПОЛИМЕРНОЙ ОСНОВЕ

Шарафутдинова И.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Пролонгированные лекарственные формы представляют собой важное направление в современной фармацевтической технологии, направленное на повышение эффективности и безопасности терапии. Их использование позволяет поддерживать терапевтическую концентрацию активного вещества в организме в течение длительного времени, что снижает частоту приема препарата, минимизирует колебания концентрации в крови и уменьшает риск побочных эффектов. Это особенно актуально для препаратов с коротким периодом полувыведения, а также для лечения хронических заболеваний, где требуется длительное и равномерное воздействие. Кроме того, пролонгированные формы повышают приверженность пациентов к лечению, что является ключевым фактором успешной терапии.

Для создания пролонгированных жидких лекарственных форм (растворов, суспензий, эмульсий) применяются различные методы модификации. Например, использование полимерных матриц. Введение полимеров (например, сукцинила хитозана [1]) позволяет замедлить высвобождение активного вещества за счет, например, повышения вязкости или возможного взаимодействия в системе полимер-лекарственное вещество.

Для повышения эффективности полимерных систем в жидких лекарственных формах могут быть применены следующие подходы: комбинирование различных полимеров для создания синергетического эффекта, улучшающего контроль высвобождения; модификация полимерной матрицы путем введения соразтворителей; использование стимул-чувствительных полимеров, которые изменяют свои свойства в ответ на внешние стимулы (например, pH или температура), что позволяет достичь таргетного высвобождения лекарства в определенных тканях или органах; оптимизация концентрации полимеров и их молекулярной массы для достижения оптимального баланса между скоростью высвобождения и стабильностью препарата.

Таким образом, модификация жидких лекарственных форм с использованием полимерных производных представляет собой перспективное направление в фармацевтической технологии, позволяющее преодолеть ограничения традиционных форм и повысить эффективность терапии.

Литература

1. Shurshina A.S., Galina A.R., Kulish E.I. Features of the use of polyelectrolytes to prolong the action of medicinal substances // Russian Journal of Physical Chemistry B. 2022. Т. 16. № 2. С. 353-360.

© Шарафутдинова И.Р., 2025

УДК 544.77.022.532

ПОЛУЧЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНОГО КОМПЛЕКСА ХИТОЗАН/КАРРАГИНАН И ИЗУЧЕНИЕ ИХ АДсорбционных ХАРАКТЕРИСТИК ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ТЕРАНОСТИКЕ

Шелепова А.С., Миргалеев Г.М., Шилова С.В, Галяметдинов Ю.Г.

*Казанский национальный исследовательский технологический университет,
Казань, Россия*

Сейчас в медицине активно разрабатываются инновационные способы доставки лекарств, среди которых особое место занимают наночастицы на основе полисахаридов. Эти наноструктуры обладают большой удельной поверхностью, что позволяет значительно улучшить процесс заживления ран. Уникальная структура наночастиц способствует быстрому проникновению активного вещества непосредственно в зону воспаления. Комплексы на основе хитозана и каррагинана демонстрируют высокую эффективность в создании систем с контролируемым высвобождением препарата. Особенно актуально создание биосовместимых форм антибиотиков, таких как ванкомицин, поскольку эти препараты имеют узкое терапевтическое окно и проявляют токсичность при повышенных дозировках.

Объектами исследования исследовательской работы являлся хитозан с молекулярной массой M_r 38700, степенью деацетилирования 80% (ЗАО «Биопрогресс», г. Щелково) и к-каррагинан («Molecularmeal»). В качестве модельного лекарственного средства использовали ванкомицин (антибиотик группы гликопептидов), торговое название «Ванкомицин-Эльфа» (Эльфа Лабораториз, Индия).

Чтобы синтезировать каррагинан-хитозановые наночастицы, к 20 мл 0.00925%-го раствора каррагинана добавляли 20 мл 2 мМ раствора хитозана при непрерывном перемешивании на магнитной мешалке (со скоростью 800 оборотов в минуту). После тщательного смешивания двух растворов готовую суспензию микрочастиц дополнительно перемешивали на магнитной мешалке в течение 30 минут с той же скоростью вращения. Затем частицы комплекса выделяли из раствора методом центрифугирования при скорости 7000 оборотов в минуту в течение 40 минут. Чтобы получить частицы полиэлектролитного комплекса каррагинан-хитозан, содержащие

биологически активное вещество (антибиотик ванкомицин), его предварительно добавляли в раствор каррагинана перед введением хитозана.

С помощью метода динамического светорассеяния было изучено изменение электрокинетического потенциала частиц комплекса каррагинан-хитозан в присутствии антибиотика ванкомицина. В водной среде ζ -потенциал полученных частиц положителен, что связано с зарядом протонированных аминогрупп хитозана. После добавления каррагинана происходит снижение ζ -потенциала частиц из-за нейтрализации зарядов ионогенных групп полиэлектролитов во время их электростатического взаимодействия. Присутствие ванкомицина вызывает незначительное уменьшение дзета-потенциала частиц. При соотношении концентраций полиэлектролитов хитозан-каррагинан 1:1 формируются наночастицы диаметром более 100 нм. Снижение заряда ζ -потенциала частиц комплекса после введения антибиотика указывает на образование связи между противоположно заряженными макромолекулами хитозана и ванкомицина.

Хитозан, содержащий аминогруппы, характеризуется отличными адсорбционными свойствами в отношении анионных соединений, эффективно связывая их как в концентрированных, так и в разбавленных растворах.

Используя изотерму Ленгмюра, определяли безразмерный параметр адсорбционного равновесия R_L :

$$R_L = \frac{1}{1 + K_L C_{max}},$$

где C_{max} – наибольшая начальная концентрация адсорбата.

Параметр R_L определяет тип адсорбции: при $R_L = 0$ она является необратимой, при $0 < R_L < 1$ — благоприятной, а при $R_L > 1$ — неблагоприятной

Процесс адсорбции ванкомицина на неоднородной поверхности адсорбента также характеризовали с помощью модели Фрейндлиха.

$$q_e = KC_e^{1/n},$$

где K – константа адсорбции Фрейндлиха; n – параметр, указывающий на степень неоднородности поверхности адсорбента.

Равновесная концентрация ванкомицина в растворе была определена путем измерения оптической плотности при длине волны 280 нм, используя калибровочную кривую.

Модель адсорбции Ленгмюра обеспечивает наилучшее соответствие экспериментальным данным сорбции ВНЦ на частицах ПЭК. Это подтверждается более высокими коэффициентами корреляции, полученными при линеаризации экспериментальной изотермы по модели Ленгмюра в сравнении с моделью Фрейндлиха.

Параметр адсорбционного равновесия R_L в модели Ленгмюра составил 0.037, что свидетельствует о благоприятных условиях для адсорбции ВНЦ

на частицах комплекса КРГ-ХТЗ. Поскольку значение параметра n положительно, это означает, что при накоплении анкомицина на поверхности полиэлектролитного комплекса энергия связи между ними и наночастицами уменьшается.

Экспериментальные результаты показали способность полученных частиц адсорбировать антибиотики и выделять их в различные приемные среды (воду и трис-буфер), что делает эти наночастицы перспективной формой для доставки биологически активных соединений.

© Шелепова А.С., Миргалеев Г.М., Шилова С.В., Галяметдинов Ю.Г., 2025

УДК 541.64

ВЛИЯНИЕ СТЕКЛОВОЛОКНА НА РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА

Юмагулова А.Ф.

(руководитель: Лаздин Р.Ю.)

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Известно, что сочетание полимеров с наполнителями позволяет получать материалы с качественно новыми эксплуатационными свойствами. Каждый из наполнителей имеет свои особенности. Например, основные преимущества композитов, армированных стекловолокном, — высокие значения прочности и модуля упругости, а также устойчивость к усталостным повреждениям. Эти свойства делают их идеальным материалом для создания различных конструкций, открытых площадок, элементов корпусов и оболочек, а также для использования в сфере электроники и техники. Однако, введение стекловолокна в полимер может приводить к существенным усложнениям перерабатываемости композита, что требует дополнительного исследования.

Ранее на кафедре Высокомолекулярных соединений и общей химической технологии были рассмотрены физико-механические свойства композиций на основе полипропилена [1]. Целью данной работы стало изучение влияния количества вводимого наполнителя на реологические характеристики композиционного материала. В качестве полимерной матрицы были использованы два образца полипропилена (ПП) - марки Н350FF/3 и марки бален 01030. В качестве наполнителя – стекловолокно со средним размером волокна 0,1х4 мм.

Показано, что введение стекловолокна в расплав ПП и ПП-бален сопровождается увеличением максимального крутящего момента и экстремальным изменением значений показателя текучести расплава (ПТР). При небольшом количестве наполнителя имеет место уменьшение ПТР, а при дальнейшем наполнении композита, напротив, увеличение, что

очевидно обусловлено протеканием процессов деструкции. Анализ реологического поведения расплава композиции при скоростях сдвига показал, что данные относительной реометрии (значения ПТР) коррелируют и с данными абсолютной реометрии.

Литература

1. Базунова М.В., Мустакимов Р.А., Садритдинов А.Р., Кулиш Е.И., Захаров В.П. Изучение изменения физико-механических свойств композитов на основе вторичного полимерного сырья в присутствии неорганических наполнителей под действием факторов внешней среды. Вестник Башкирского университета. 2019. Т. 24. № 1. С. 49-54.

© Юмагулова А.Ф., 2025

УДК 541.64

ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СМЕСЕЙ ПОЛИЛАКТИД- ПОЛИКАПРОЛАКТОН-ХИТОЗАН-ОКСИД ЦИНКА

Якупов М.Р.

(руководитель: Кулиш Е.И.)

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Препараты на основе цинка относятся к противовоспалительным средствам местного применения. При нанесении на пораженную поверхность кожи они уменьшают выраженность экссудативных процессов, устраняют местные проявления воспаления и раздражения; обладает адсорбирующим действием, образует защитное покрытие на коже, которое уменьшает воздействие на нее раздражающих факторов. Данная работа посвящена созданию защитных раневых покрытий, содержащих в качестве действующего начала оксид цинка и хитозан. В качестве полимерной основы пленочных материалов были выбраны смеси поликапролактона с полилактидом.

Получение композиций осуществляли на пластографе Брабендера при температуре 160 °С [1]. После процесса пластикации образцы композитов помещались в автоматический гидравлический пресс «AutoMN-NE» для формирования пленок толщиной 0,3 мм. Температура в прессе составляла 160 °С, давление 1000 кгс. Содержание хитозана варьировалось от 5 до 70 мас.ч. Содержание оксида цинка составляла от 2,5 до 10 мас% по отношению к массе полимерной основы.

В ходе исследования установлено, что добавление оксида цинка и особенно, хитозана, как нетекучих компонентов, существенным образом сказывается на способности композиции к переработке. С повышением их содержания в композиции происходит закономерное уменьшение показателя текучести расплава и увеличение динамической вязкости

наполнителя. Данный факт должен быть обязательно учтен в процессе получения защитных пленочных покрытий.

Литература:

1. Бакирова Э.Р., Лаздин Р.Ю., Гизбуллина Е.М., Кулиш Е.И. Влияние условий переработки на некоторые характеристики поликапролактона. Бутлеровские сообщения. 2023. Т. 74. № 4. С. 72-76.

© Якупов М.Р., 2025

УДК 691.175

ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ НАПОЛНИТЕЛЯ НА ТЕМПЕРАТУРУ ПЛАВЛЕНИЯ ОБРАЗЦОВ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПВДФ

Яхина Г.С., Набутова К.В., Бикбулатов В.Р.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В наше время для производства трубопроводов тепловых сетей из полимерных материалов используют ненаполненные термопласты и термостойкие композиты. Термостойкие материалы являются плохими проводниками тепла, так как не имеют свободных электронов, которые доступны для механизмов электронной и теплопроводности. Среди доступных термостойких термопластов, которые можно использовать в качестве основы для трубопроводов тепловых сетей, стоит выделить поливинилиденфторид (ПВДФ). Для улучшения свойств материала, вводят дисперсные или армирующие наполнители. Наполнение является одним из самых распространенных способов создания различных полимерных композитных материалов. Наполнение представляет собой процесс совмещения материала с различными веществами, которые должны равномерно распределиться в объеме и иметь четко выраженную границу с непрерывной полимерной матрицей. Выбор наполнителя зависит от размера его частиц и их распределения по размерам. Важным фактором при выборе наполнителя является форма частиц и характер их упаковки. В производстве полимерных композиционных материалов используют наполнители в форме сфер, порошков, волокон, гранул и листов. Введение требуемого количества наполнителей позволяет значительно улучшить физико-механические характеристики, также позволяет снизить стоимость и увеличить сырьевую базу полимерных композиционных материалов.

В данной работе в качестве наполнителей полимерных композиционных материалов использовались алюмосиликатные полые микросферы (АСМ) и стекловолокно (СВ). АСМ представляет собой стеклокристаллические алюмосиликатные шарики, внутренняя полость которых заполнена азотом и диоксидом углерода. АСМ используется в качестве изоляционного материала. СВ является распространенным неорганическим наполнителем,

который имеет отличную прочность, долговечность, термостабильность, устойчивость к ударам, химическим веществам и износу.

Для определения температуры плавления образцов был использован метод дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК). Данный метод является одним из наиболее эффективных способов исследования. Испытание основано на измерении количества теплоты, поглощенной образцом или выделившейся из образца при непрерывном повышении или понижении температуры. С помощью метода ДСК определяют область стеклования полимера, значения температур плавления или кристаллизации, устанавливают температуру термической деструкции полимера. Также, метод позволяет изучить кинетику кристаллизации и дает количественную информацию о компонентах и добавках, которые содержатся в композитах, а именно, поглотителей УФ-излучения, антистатиков и модификаторов ударной прочности.

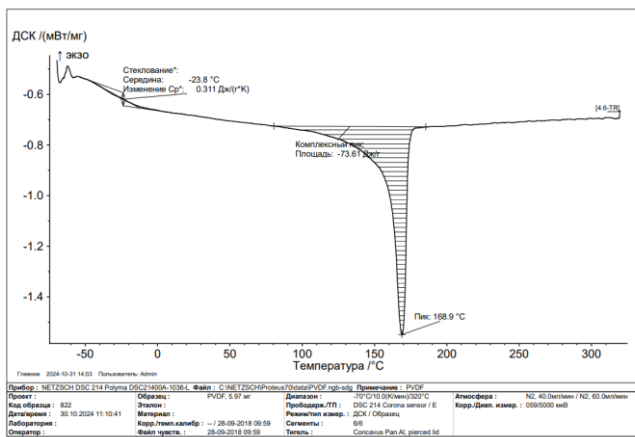


Рис. 1. Термограмма ДСК образца ПВДФ

По ДСК-анализу образца ПВДФ получены следующие данные: $T_{пл}=168,9^{\circ}\text{C}$, $\Delta H_{пл}=-73,6$ Дж/г.

В результате проведенного ДСК-анализа, можно сделать вывод, что образцы ПВДФ являются хорошим материалом для создания термостойких композитов трубопроводов тепловых сетей.

Работа выполнена при финансовой поддержке АНО «УК НОЦ РБ» (договор № ЦДП-РФ-ЛАБ-1/24 от 20.09.2024)

Литература

1. Полимерные композиты на основе вторичного полипропилена, наполненного алюмосиликатными микросферами и полиэтиленом, модифицированный малеиновым ангидридом / А.А. Псянчин, Е.М. Захарова, М.В. Базунова, В.П. Захаров // Бутлеровские сообщения. – 2023. – Т. 75, № 9. – С. 33–39.

© Яхина Г.С., Набутова К.В., Бикбулатов В.Р., Базунова М.В., 2025

ИЗУЧЕНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА

Яхина Г.С., Набутова К.В.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

Для увеличения безаварийного срока службы трубопроводных сетей, эксплуатирующихся при температурах выше 115°C, можно использовать полимерные композитные материалы с высокой термостойкостью. Наполнение полимеров представляет собой процесс совмещения исходного материала с различными веществами, которые равномерно распределяются в объеме и имеют четко выраженную границу с матрицей. Добавление небольшого количества неорганических частиц в матрицы композитного материала приводит к улучшению жесткости и твердости материала [1], а также к повышению термических и барьерных свойств термопластов. В изготовлении трубопроводов применяют ПВДФ, который представляет собой высокочистый полукристаллический фторполимер.

Физико-механические свойства – это совокупность свойств, проявляемые полимерными композитными материалами в процессе их механических испытаний, таких как: прочность, относительное удлинение, модуль упругости и т.д.

Использование наполнителей в исследуемый полимер ведет к изменению свойств материала. Так, наполнение ПВДФ алюмосиликатными микросферами (АСМ) или стекловолокном (СВ) приводит к увеличению температуры размягчения и температуры изгиба под нагрузкой, что объясняется жесткостью СВ в сравнении с ПВДФ. СВ обладает высокой температурой плавления и термостойкостью, поэтому использование его в качестве наполнителя увеличивает общую термостойкость композитного материала и увеличивает температуру размягчения композита.

Показатель хрупкости системы ПВДФ-СВ при введении 3% СВ ведет к увеличению температуры хрупкого удара. Введение 5% наполнителя в систему ПВДФ-АСМ протекает без ухудшения показателя хрупкости. Так, при измерении показателя хрупкости сделан вывод, что лучшим наполнителем для композитного материала можно считать АСМ. Наполнение ПВДФ АСМ или СВ в количестве, не превышающем 10% ведет к изменению жесткости, прочности и относительного удлинения.

Модуль упругости композитных материалов увеличивается по мере наполнения полимеров наполнителями. Так, при использовании метода литья под давлением, полученные образцы теряют прочность. Метод прессования ведет к увеличению относительного удлинения образцов.

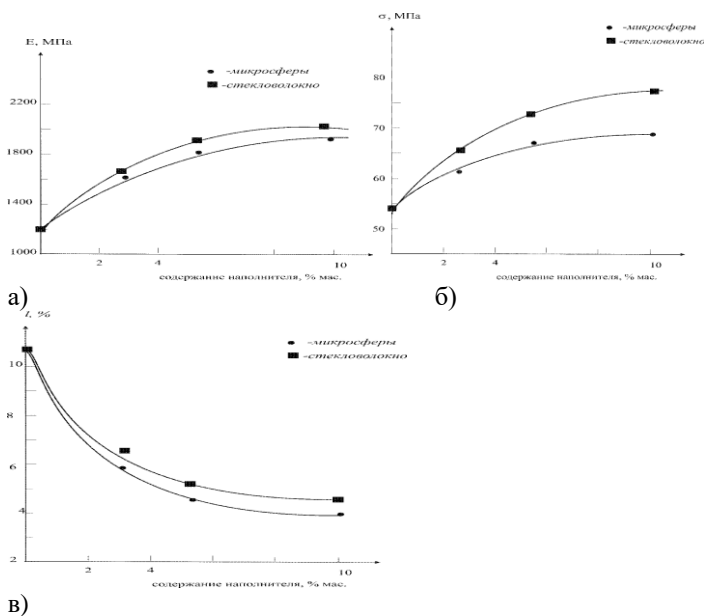


Рис. 1. Зависимость модуля упругости(а), напряжения(б), относительного удлинения(в), определенного в эксперименте на изгиб в трех точках от содержания наполнителя в композиции основе ПВДФ, полученного методом литья под давлением

Исходя из анализа рисунков, видно, что во всех случаях наполнение ПВДФ сопровождается увеличением жесткости, прочности и уменьшением относительного удлинения.

В результате анализа проведенных исследований физико-механических испытаний, можно утверждать, что наполнение образцов ПВДФ АСМ и СВ ведет к увеличению жесткости, прочности и уменьшению относительного удлинения композитов.

Работа выполнена при финансовой поддержке АНО «УК НОЦ РБ» (договор № ЦДП-РФ-ЛАБ-1/24 от 20.09.2024)

Литература

1. Полимерные композиты на основе вторичного полипропилена, наполненного алюмосиликатными микросферами и полиэтиленом, модифицированный малеиновым ангидридом / А.А. Псянчин, Е.М. Захарова, М.В. Базунова, В.П. Захаров // Бутлеровские сообщения. – 2023. – Т. 75, № 9. – С. 33-39.

© Яхина Г.С., Набутова К.В., Базунова М.В., 2025

СЕКЦИЯ
«ДОСТИЖЕНИЯ ШКОЛЬНИКОВ В ХИМИИ»

ХИМИЯ БЕЗ СТРАХА: КАК РАБОЧИЕ ЛИСТЫ ДЕЛАЮТ ПРОЦЕСС
ОБУЧЕНИЯ БОЛЕЕ КОМФОРТНЫМ

Герасименко Б.В. Громова Ю.А., Медведева Е.С.

Южный федеральный университет, Россия

Успеваемость обучающегося складывается из ряда факторов, одним из которых можно выделить эмоциональное состояние. Эмоциональное состояние школьника точно песочные часы, в которых песок - эмоции, постоянно перетекает из одного состояния в другое. Это обусловлено рядом физиологических (гормональное изменение и физическое развитие) и психологических (личностное развитие, переходные периоды, социальные конфликты и др.) причин. Одним из проявлений нестабильного эмоционального состояния является тревожность. Если рассматривать тревогу как состояние, то для нее характерно неприятное эмоциональное состояние, наличие субъективного ощущения напряжения, беспокойства [1]. С физиологической точки зрения, тревога сопровождается активизацией автономной нервной системы [1]. Школьная тревожность является специфическим видом тревожности, который проявляется во взаимодействии обучающегося с различными компонентами образовательной среды [2]. Тревожность может проявляться по-разному, включая повышенное беспокойство, неуверенность в себе и ожидание негативных оценок. Несмотря на то, что умеренная тревога может способствовать обучению, избыточная тревожность может вызывать дезорганизацию и мешать эффективному усвоению материала.

Так, опираясь на статистику, полученную авторами статьи, почти у половины учеников средней школы высокий уровень тревожности [3].

Проведя исследование в группе разновозрастных детей (14 – 17 лет), было выявлено, что изучение такой дисциплины, как химия, вызывает тревогу у более чем половины опрошенных (рис.1), а сама тревожность обусловлена чувством беспокойства и напряжения, возникающим в связи со страхом непредсказуемости и неопределенности на контрольных работах, чрезмерным ожиданиями успеха со стороны социума, а также недостаточной уверенностью в своих знаниях.

Педагог, как один из участников образовательного процесса, может помочь снизить уровень тревоги, используя такой инструмент, как рабочий лист.

Рабочий лист - дидактическое средство организации самостоятельной учебной деятельности ученика [4]. Работа над рабочим листом позволяет обучающимся самостоятельно выделить пробелы и своевременно их заполнить, создает ощущение предсказуемости и контроля над ситуацией,

структурированности и как следствие повышает уверенность в себе и своих знаниях.

Так же, рабочий лист - как свободное пространство, подразумевает обратную связь “ученик-учитель”, в котором можно уточнить, в чем состояла сложность при выполнении заданий, описать свои эмоции и предложить свои идеи.



Рис. 1. Диаграмма опрошенных до использования «Рабочий лист»



Рис. 2. Диаграмма опрошенных после использования «Рабочий лист»

В течение полугода в процессе обучения группы разновозрастных детей были применены разработанные персонализированные рабочие листы по дисциплине “химия”. В результате последующего опроса было выявлено, что уровень тревоги снизился (рис.2).

Таким образом, использование рабочих листов в процессе обучения может стать действенным методом для уменьшения уровня тревожности среди обучающихся средней школы. Такой педагогический инструмент поможет структурировать учебный материал, развивать уверенность в своих силах и создавать более комфортные условия для обучения.

Литература

1.Вахтель Л.В. Соотношение понятий «тревожность» и «школьная тревожность» в отечественной и зарубежной литературе / Л.В. Вахтель, Н.Е. Климова // Результаты современных научных исследований и разработок: сборник статей VI

Международной научно-практической конференции, Пенза, 27 апреля 2019 года. – Пенза: Наука и Просвещение (ИП Гуляев Г.Ю.), 2019. – С. 241-243.

2. Тревожность как фактор возникновения дезадаптации младших школьников // ИНФОУРОК URL: <https://infourok.ru/kursovaaya-rabota-trevozhnost-kak-faktor-voznikoveniya-dezadaptacii-mladshih-shkolnikov-971056.html> (дата обращения: 28.03.2025).

3. Политика О.И., Нагуманова Э.Р., Асафьева Н.В. Возрастная динамика тревожности у школьников // Проблемы современного педагогического образования. 2018. № 61-3.

4. Залесская А.В. Электронные рабочие листы как средство обучения химии / А.В. Залесская // Молодость. Интеллект. Инициатива: материалы X Международной научно-практической конференции студентов и магистрантов, Витебск, 22 апреля 2022 года. – Витебск: Витебский государственный университет им. П.М. Машерова, 2022. – С. 399-401.

© Герасименко Б.В. Громова Ю.А., Медведева Е.С., 2025

УДК 504.054

ЭКОЛОГИЧЕСКИЙ МОНИТОРИНГ РЕК ГОРОДА БАРНАУЛА ПО ХИМИЧЕСКИМ ПОКАЗАТЕЛЯМ

Гичев С.А.¹, Калюта Е.В.²

¹МБОУ «Лицей 86», Барнаул, Россия

²Алтайский государственный аграрный университет, Барнаул, Россия

Барнаул находится в северной части Алтайского края, располагаясь на берегу р. Оби (в левобережной ее части), у устья р. Барнаулки. В пределах границ города протекают постоянные водотоки – реки Обь, Барнаулка, Лосиха, Талая, а также ряд временных водотоков, из которых наиболее значимыми являются Пивоварка и Сухой Лог. Левыми притоками Оби являются Барнаулка и Пивоварка [1]. В силу особенностей рельефа городской территории поверхностный сток практически без какой-либо очистки поступает в р. Барнаулку, которая служит концентратором и транспортером загрязнений урбанизированной территории в р. Обь. Приоритетными загрязнениями р. Барнаулки являются органические и азотсодержащие вещества [2]. Река Пивоварка, протекающая исключительно по городской территории в густонаселенных и промышленных зонах, оказывает огромное влияние на загрязнение р. Барнаулки, а, следовательно, и реки Обь [3]. Целью работы является оценка экологического состояния рек г. Барнаула (Барнаулки, Пивоварки и Оби) на основе химико-аналитического исследования поверхностных вод.

Отбор проб воды проводили 10 ноября 2024 года. Пункты отбора проб выбраны с учетом нарастания антропогенного влияния на реку Обь. Образцы воды анализировали по химическим показателям (общая и карбонатная жесткость, содержание хлоридов и сульфатов) по общепринятым методикам.

Все исследуемые пробы воды по величине водородного показателя не выходили за указанные границы допустимого.

Наиболее загрязнена по показателям жесткости река Пивоварка (таблица 1). Следует отметить, что в процессе анализа воды из реки Барнаулки на содержание ионов кальция при добавлении щелочи выпадал белый осадок, что привело к получению недостоверных результатов.

Таблица 1

Результаты определения общей и карбонатной жесткости проб воды рек города Барнаула

источник воды	Ж _{общ} , мг-экв/л	Ж _{Ca2+} , мг-экв/л	Ж _{Mg2+} , мг-экв/л	карбонатная жесткость, мг-экв/л
р. Обь	2,41	1,65	0,76	2,8
р. Барнаулка	4,40	5,04	-0,635	6,6
р. Пивоварка	5,36	3,55	1,81	6,6
водопроводная вода	2,20	1,65	0,55	2,2

Из ГОСТ 31954-2012 следует, что при комплексонометрическом (титриметрическом) определении жесткости ионы алюминия, кадмия, свинца, железа, кобальта, меди, марганца, олова и цинка влияют на установление эквивалентной точки и мешают определению. Ионы ортофосфата и карбоната могут осаждать кальций в условиях титрования. Кроме того, при подщелачивании может выпадать в осадок ионы кальция в виде гидроксида. Определению могут также мешать некоторые органические вещества. [5]. Поэтому далее мы провели качественные реакции на катионы, мешающие определению кальция, и результат оказался отрицательный. Положительной была только проба на магний.

В таблице 2 приведены экспериментальные значения содержания хлоридов и сульфатов в пробах воды исследуемых рек. Из экспериментальных данных следует, что содержание этих анионов наибольшее в воде реки Пивоварка.

Таблица 2

Содержание хлоридов и сульфатов в пробах воды рек
города Барнаула

показатель	р. Обь	р. Барнаулка	р. Пивоварка	водопроводная вода
Содержание SO_4^{2-} , мг/л	менее 10	менее 10	92,2	менее 10
Содержание Cl^- , мг/л	7,20	11,0	70,0	5,7

Таким образом, по химическому составу наиболее загрязненной являлась проба воды из реки Пивоварка, как это и описывается в литературе:

$\text{Ж}_{\text{общ}} = 5,36$ мг-экв/л, карбонатная жесткость = 6,6 мг-экв/л, $\text{C}(\text{SO}_4^{2-}) = 92,2$ мг/л, $\text{C}(\text{Cl}^-) = 70,0$ мг/л.

Литература

1. Барнаул: Природа и природообустройство. – Барнаул: Изд-во ООО «Типография Триада». – 2018. – 80 с.
2. Марусин К.В., Дьяченко А.В. Экологический мониторинг состояния реки Барнаулки по химическим показателям // Известия Алтайского отделения Русского географического общества. – 2019. – № 4 (55). – С. 130-136.
3. Маматов С.Ю., Яценко Е.С. Оценка качества воды реки Оби в зоне влияния ОСК-2 ООО «Барнаульский Водоканал» // Инновационные научные исследования. – 2022. – № 5-1(19). – С. 22-28.

© Гичев С.А., Калюта Е.В., 2025

УДК 631.8

**ИЗУЧЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ СВОЙСТВ РАСТВОРОВ
ПИЩЕВЫХ ДОБАВОК E401, E1521, E1442 И КМК В СМЕСИ
С АЗОТНЫМИ УДОБРЕНИЯМИ**

Рыжиков Р.Д.¹, Новиков П.А.¹, Калюта Е.В.²

¹Лицей №124, Барнаул, Россия

²Алтайский государственный аграрный университет, Барнаул, Россия

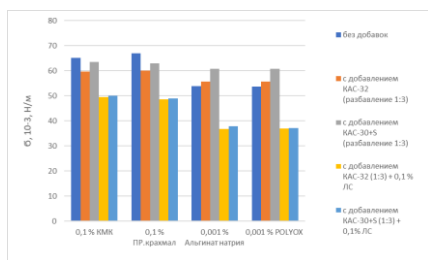
По данным станции защиты растений ежегодно в Алтайском крае вредителями и болезнями поражается около пятой части от общей площади посевов. Единственным экономически обоснованным средством повышения урожайности в настоящее время является химический метод защиты растений с использованием различных пестицидов [1]. В состав пестицидных препаратов добавляют адъюванты (прилипатели), которые снижают поверхностное натяжение воды, тем самым помогают увеличить

площадь обрабатываемой поверхности, улучшить проникновение активных компонентов в листья растений, снизить негативное влияние климатических условий на эффективность растворов и уменьшить расход удобрений и пестицидов [2]. В качестве новых прилипателей нами предложены пищевые добавки Е401, Е1521, Е1442 и КМК, которые не уступают по свойствам используемым в настоящее время прилипателям и могут быть рекомендованы к применению в качестве адъювантов при пестицидных обработках с/х культур [3-4].

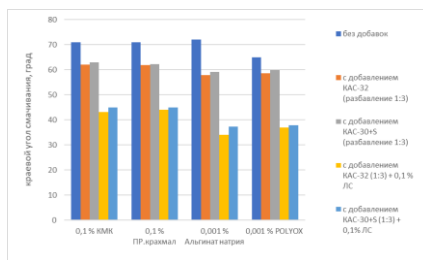
Цель исследования: изучить физико-химические свойства растворов пищевых добавок Е401, Е1521, Е1442 и КМК при внесении в них азотных удобрений КАС-32 и КАС-30+S.

Из экспериментальных данных следует, что предлагаемые нами в качестве адъювантов растворы Е401 и Е1521 можно использовать как прилипатели с концентрацией 0,001-0,01%, Е1442 и КМК - при концентрации 0,01-0,1%. При большей концентрации вязкость растворов сильно возрастает, что может быть связано со значительными межмолекулярными взаимодействиями функциональных групп макромолекул данных полимеров.

Добавление в растворы предлагаемых адъювантов широко используемых в сельском хозяйстве азотных удобрений КАС-32 и КАС-30+S не значительно изменяет их поверхностно-активные свойства. Внесение минеральных удобрений в 0,1% растворы КМК и прежелатинизированного крахмала снижает поверхностное натяжение воды на 3-10%, а в 0,001% растворы альгината натрия и POLYOX – увеличивает на 3-10% (рисунок).



а)



б)

Рис. 1. Влияние добавления азотных удобрений физико-химические свойства растворов предлагаемых адъювантов: а) на поверхностное натяжение, б) растворов на краевой угол смачивания

Как правило, современные составы прилипателей состоят из нескольких адъювантов. Добавление в растворы пищевых добавок с КАСами лаурилсульфата значительно улучшает поверхностно-активные свойства

препаратов: поверхностное натяжение 0,1% растворов КМК и Е1442 снижается на 23-24%, 0,001% растворов Е401 и Е1521 – на 30-31%, краевой угол смачивания 0,1% растворов КМК и Е1442 снижается на 37-39%, 0,001% растворов Е401 и Е1521 – на 40-50%.

Таким образом, растворы пищевых добавок Е401, Е1521, Е1442 и КМК при оптимальных концентрациях совместимы с азотными удобрениями и могут быть рекомендованы к применению в качестве адъювантов для садоводов и представителям АПК.

Литература

1. Калюта Е.В., Мальцев М.И., Базарнова Н.Г. Анализ пестицидной нагрузки при возделывании зерновых культур в Алтайском крае // Теоретическая и прикладная экология. – 2022. – № 1. – С. 175-181.
2. Иванцова Е. А. Основы применения пестицидов // Фермер. Поволжье. – 2015. – № 4(35). – С. 44-47.
3. Новиков П.А., Рыжиков Р.Д., Калюта Е.В. Изучение физико-химических свойств поверхностно-активных веществ, рекомендуемых к применению в сельском хозяйстве в качестве адъювантов // тезисы докладов XI Международной молодежной научной конференции, «ФТИ». – Екатеринбург: УрФУ, 2024. – С. 751-752.
4. Рыжиков Р.Д., Новиков П.А., Калюта Е.В. Изучение адгезионных свойств адъювантов, рекомендуемых к применению в сельском хозяйстве // тезисы докладов XI Международной молодежной научной конференции, «ФТИ». – Екатеринбург: УрФУ, 2024. – С. 753-754.

© Рыжиков Р.Д., Новиков П.А., Калюта Е.В., 2025

УДК 54

ХЛЕБ, КОТОРЫЙ МЫ ЕДИМ

Сираев М.Д., Фаттахов А.Х.

Уфимский университет науки и технологий, Уфа, Россия

В наше время на прилавках магазинов можно найти хлеб практически на любой вкус, но несмотря на огромный ассортимент, совершенствование технологии производства, качество хлеба снижается. Использование дрожжей, консервантов, усилителей вкуса, соевой муки, пальмового масла являются доказательством того, что девизом современных кулинаров является: минимум затрат, максимум готовой продукции. Не секрет, что хлебопекарный бизнес в небольших масштабах (мини-пекарни) - перспективный бизнес как для небольшого города, так и для мегаполиса. Только на улице Ленина нашей столицы мы насчитали более восьми пекарней, среди которых «Брауни», «Круассан», «Zurrahmat» и др. Даже на менее оживленной улице Загира Исмагилова, одна да пекарня нам встретилась - «Добрый пекарь».

Актуальность выбранной темы обусловлена тем, что хлеб в России-социальный продукт, который ежедневно присутствует в рационе человека.

В среднем за всю жизнь человек съедает в общей сложности 15 тонн хлеба, причем даже не отдельно, а как необходимая добавка почти к любой пище [1-3].

Цель исследовательской работы: определить органолептические свойства и кислотность хлеба разных производителей, как показатель его качества [4-6].

Поставленная цель определяет следующие **задачи**:

1. Изучить научную литературу о хлебе, как составляющей части основы рационального питания человека;

2. С помощью анкетирования изучить потребительский спрос и предпочтения хлебу различных производителей;

3. Определить органолептические свойства следующих видов хлеба: пшеничный хлеб «Ремесленный подовый» уфимского хлебозавода «Восход», ржано-пшеничный хлеб «Деревенский» стерлитамакского хлебокомбината «Стерх», бездрожжевой хлеб «Бородинский» московского хлебозавода «Хлеб на радость», реализуемого в супермаркете Вкусвилл;

4. С помощью лабораторного исследования определить кислотность пшеничного хлеба «Ремесленный подовый» уфимского хлебозавода «Восход»;

5. С помощью лабораторного исследования определить кислотность ржано-пшеничного хлеба «Деревенский» стерлитамакского хлебокомбината «Стерх»;

6. С помощью лабораторного исследования определить кислотность бездрожжевого хлеба «Бородинский» московского хлебозавода «Хлеб на радость», реализуемого в супермаркете Вкусвилл.

Предмет исследования: хлеб от разных производителей.

Гипотеза: соответствие физико-химических показателей хлеба ГОСТам.

Методы исследования: изучение литературы и информации в сети Интернет, социологический опрос, лабораторные опыты, анализ изученных данных.

Были рассмотрены органолептические свойства трех видов хлеба и результаты показали, что все они соответствуют ГОСТу.

Кислотность хлеба является результатом присутствия в нем уксусной и молочной кислоты. Повышенная кислотность вызывает увеличение желудочной секреции, ухудшает вкусовые качества хлеба. Для пшеничного хлеба кислотность не должна превышать 3°, для ржано-пшеничного - 11°, для Бородинского - 10°. По нашим исследованиям хлеб «Ремесленный» хлеб- 2,625°, «Бородинский» - 8,625° и «Деревенский» - 4,875°, что соответствует санитарно- гигиеническим нормам. Дрожжевой хлеб обычно менее кислый, так как дрожжи в основном производят углекислый газ и спирт, а не кислоты.

Гипотеза о том, что исследуемые виды хлебов соответствует ГОСТу, подтвердилась.

Литература

1. <https://dzen.ru/a/YDtW0Um05yiQBmDO>
2. Андреевская Е.А. Изучение культуры потребления хлеба подростками // Старт в науке. – 2017. – № 5-1.
3. Барыкин К.К. Хлеб, который мы едим. – М.: Госполитиздат, 2019.
4. Журнал «Наука и жизнь» – <http://www.nkj.ru/archive/articles/16507/>
5. Патт В.А. Наш хлеб. – М.: Лёгкая и пищевая промышленность, 2018.
6. Чижикова О.Г., Коршенко Л.О. Технология производства хлеба и хлебобулочных изделий. – М.: Юрайт, 2025.

© Сираев М.Д., Фаттахов А.Х., 2025

УДК 664.7

ИССЛЕДОВАНИЕ ПШЕНИЧНОЙ МУКИ НА СОДЕРЖАНИЕ АМИНОКИСЛОТ

Шафигуллина А.Р.¹, Михайлова Н.Н.²

¹*Средняя общеобразовательная школа № 4, Уфа, Россия*

²*Уфимский государственный нефтяной технический университет», Уфа, Россия*

Белок - один из главных компонентов пищи. Белок - это «строительные кирпичики» необходимые для роста, поддержания здоровья всего организма. Качество белка, определяется, входящими в его состав аминокислотами. [1].

Все аминокислоты принято делить на «заменимые» и «незаменимые». «Незаменимые» аминокислоты попадают в организм человека с пищей и прежде всего с хлебом и хлебо-булочными изделиями. Согласно данным института питания АМН РФ за счет суточного потребления 500 г пшеничного хлеба удовлетворяется 1/3 потребности человека в белках, в том числе на 80-90% в растительных белках. Для спортсменов количества белка необходимо в два раза больше, чем для обыкновенных людей.

Цель проекта – определить виды аминокислот, входящие в состав белков пшеничной муки [2].

В качестве объектов исследования выбрана мука высших сортов, популярная у жителей города: «Макфа» и «Царь».

Определение аминокислот проводили методом тонкослойной хроматографии (ТСХ), основанный на том, что разделяемые вещества по-разному распределяются между сорбирующим слоем и протекающим через него элюентом, вследствие чего расстояние, на которое эти вещества смещаются по слою различается [3].

Эксперимент состоял из двух этапов. Первый этап работ - получение исследуемого раствора. Вторая часть работы заключалась в разделении

аминокислот на тонкослойной пластине в йодной камере. Для идентификации пятен вычисляли величину $R_f = a/b$, где a – расстояние от линии старта до центра пятна, b – расстояние от линии старта до фронта подвижной фазы.

По величине R_f находили соответствующие аминокислоты. Для анализа использовали книгу Ю. Кирхнера Тонкослойная хроматография. Том 1 [4].

Таблица 1

Результаты разделения методом тонкослойной хроматографии
аминокислот в пшеничной муке

Мука «Царь»

Условия	Разделение	R_f пробы	Аминокислота
бутанол-1: уксусная кислота ледяная : вода в соотношении 4:1:1.	4 локализованных пятна	0,77	Глицин (Gly)
		0,37	Аргинин (Arg)
		0,23	Лизин (Lys)
		0,56	Гистидин (His)

Мука «Макфа»

Условия	Разделение	R_f пробы	Аминокислота
бутанол-1: уксусная кислота ледяная : вода в соотношении 4:1:1.	2 локализованных пятна	0,77	Глицин (Gly)
		0,47	Лейцин (Leu)

Литература

- 1.Иванова М.В. Товароведная оценка белков муки зародышей пшеницы и использование лейкозина в производстве мучных кондитерских изделий и соусов для общественного питания / автореферат кандидата технических наук. 2011. 29 с.
 - 2.ГОСТ Р 52189-2003 Мука пшеничная. Общие технические условия.
 - 3.Сумина Е.Г., Штыков С.Н., Углова В.З., Кулакова Н.В. Тонкослойная хроматография. Теоретические основы и практическое применение / Учебное пособие. – Саратов, 2012. – 128 с.
 - 4.Кирхнер Ю. Тонкослойная хроматография – Москва: Изд-во «Мир», 1981. – 308 с.
- © Шафигуллина А.Р., Михайлова Н.Н. 2025

СОДЕРЖАНИЕ

СЕКЦИЯ «НЕОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

ИССЛЕДОВАНИЕ ТЯЖЕЛЫХ НЕФТЯНЫХ ОСТАТКОВ МЕТОДОМ ЭЛЕКТРОННОЙ СПЕКТРОСКОПИИ

Амангельда А.А., Васильева А.В., Ширяева Р.Н..... 4

ГИДРОТЕРМАЛЬНЫЙ СИНТЕЗ СИЛИКАТОВ КАЛЬЦИЯ

Андрющенко Э.Н., Ярусова С.Б., Гордиенко П.С., Достовалов Д.В.,
Куравый В.Г..... 5

ДИАГРАММА СОСТОЯНИЙ СИСТЕМЫ Р – РЬ

Баранова Т.В., Семенова Г.В., Сушкова Т.П..... 6

ИССЛЕДОВАНИЕ НАНОРАЗМЕРНОГО КАРБОНАТА МЕДИ, СТАБИЛИЗИРОВАННОГО МЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗОЙ, МЕТОДОМ РЕНТГЕНОФАЗОВОГО АНАЛИЗА

Блинов А.В., Бочаров Н.М., Русев Н.А., Рехман З. А., Голик Д. Б..... 8

СИНТЕЗ ErFe_2O_4 КАК ПОТЕНЦИАЛЬНО АКТИВНОГО КАТАЛИТИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА С МАГНИТНЫМИ СВОЙСТВАМИ.

Волков А.С., Томина Е.В., Гудкова Н.А..... 10

СИНТЕЗ И СТРОЕНИЕ БИЯДЕРНОГО

ХЛОРИДОТИОКАРБАМИДНОГО КОМПЛЕКСА ОСМИЯ(III)

$[\text{Os}(\text{Thio})_6][\text{OsCl}_6] \cdot 2\text{H}_2\text{O}$

Грицунова Д.Д., Ефременко А.В., Терёшина Т.А., Доброхотова Е.В.,
Култышкина Е.К., Рудницкая О.В., Хрусталеv В.Н..... 12

ИССЛЕДОВАНИЕ ИК-СПЕКТРОВ КОМПОЗИТОВ ФЕРРИТА КОБАЛЬТА С БИОУГЛЕМ

Дорошенко А.В., Томина Е.В..... 14

СИНТЕЗ МИКРО-МЕЗОПОРИСТОГО ЦЕОЛИТА МСМ-22

С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРИРОДНОГО АЛЮМОСИЛИКАТА

Жирнова Е.Д., Травкина О.С., Косарева А.Е..... 16

ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ПАРАМЕТРОВ СИНТЕЗА НА СТРУКТУРНЫЕ ОСОБЕННОСТИ ГРАНУЛИРОВАННОГО ЦЕОЛИТА ВЕТА

Зарипов В.И., Исаков А.Р., Зиянуров Р.И., Воронин О.А., Травкина О.С. 17

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОГРУЖНОГО ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО

МОДУЛЯ ДЛЯ РЕГЕНЕРАЦИИ ЭЛЕКТРОЛИТА ТРАВЛЕНИЯ МЕДИ

Краснощечков Р.К., Долженко А., Печенкина Е.С., Артамонова А.Р..... 18

НОВЫЙ СПОСОБ СИНТЕЗА И ИК-СПЕКТРОСКОПИЧЕСКОЕ

ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИВОЛЬФРАМАТА $\text{Pr}_{10}\text{W}_{22}\text{O}_{81}$

Лесин Д.А., Пестерева Н.Н. 19

КИСЛОТНО-ОСНОВНЫЕ СВОЙСТВА ПОВЕРХНОСТИ НАНОРАЗМЕРНОГО ФЕРРИТА ЦИНКА, СИНТЕЗИРОВАННОГО ПО ТАРТРАТНОЙ ЗОЛЬ-ГЕЛЬ ТЕХНОЛОГИИ	22
Мокляк М.А., Волик К.К., Муханова Е.А., Баян Е.М.	
ПОЛУЧЕНИЕ ГИБРИДНЫХ МАТЕРИАЛОВ С VOIPu ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В МОЛЕКУЛЯРНОЙ СЕНСОРИКЕ	
Молева Н.В., Бобров А.В.	24
ИССЛЕДОВАНИЕ МОРФОЛОГИИ НАНОЧАСТИЦ СЕЛЕНА, СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ КОКАМИДОПРОПИЛАМИНОКСИДОМ	
Назаретова Е.Д., Рехман З.А., Голик А.Б., Голик Д.Б., Пирогов М.А.	25
ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ ТВЁРДОГО РАСТВОРА $\text{La}_{0.9}\text{Ba}_{0.1}\text{Sc}_{1-x}\text{Zn}_x\text{O}_{2.95-0.5x}$	
Пачина С.П., Белова К.Г., Корона Д.В., Анимица И.Е.	26
ВЛИЯНИЕ САЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ НА МАССУ И ВЫСОТУ ПШЕНИЦЫ ПРИ ДОБАВЛЕНИИ В СРЕДУ МЕДИ, КАДМИЯ И ЦИНКА	
Рахматуллина С.Р.	27
ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КЕРАМИКИ YAG:Ru ПРИ ИЗМЕНЕНИИ ТИПА СПЕКАЮЩИХ ДОБАВОК	
Супрунчук В.Е., Бедраков Д.П.	28
ИССЛЕДОВАНИЕ ФАЗОВОГО СОСТАВА НАНОКОМПОЗИТА ГЕКСАЦИАНОФЕРРАТА ЖЕЛЕЗА С СЕРЕБРОМ	
Татов А.В., Шевченко И.М., Пирогов М. А., Назаретова Е.Д., Серов А.М.	30
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА СТАБИЛИЗАЦИИ НАНОЧАСТИЦ Cr_2O_3 АЛКИЛДИМЕТИЛБЕНЗИЛАММОНИЯ ХЛОРИДОМ	
Филиппов Д.Д., Нагдалян А.А., Серов А.М., Татов А.В., Голик Д.Б.	31
ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ КЕРАМИКИ ZrO_2 , СТАБИЛИЗИРОВАННОЙ ДОБАВКАМИ P_2O_5	
Хорошавцева Н.В., Денисова Э.И., Карташов В.В., Меркулов О.В., Захарова Е.Н.	33
ИЗУЧЕНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ ТЕТРАГИДРОФУРАНОЛА-3 И ОКСИМАТЕТРАГИДРОФУРАНОНА-3 С ИОНАМИ Cu(II) И Zn(II)	
Худайгулова И.Г., Охиров Ш.М., Гарифуллин М.Ф., Берестова Т.В., Латыпова Э.Р.	35
ПОИСК ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ ИОНООБМЕННОГО СИНТЕЗА ПОРОШКОВ YAG	
Шидловская П.К., Шергин А.В., Белая Е.А.	37
КОРРОЗИЯ ХРОМИСТОЙ СТАЛИ В ЖИДКОЙ СРЕДЕ	
Якунина А.А.	38

СЕКЦИЯ «ОРГАНИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»	
ВОССТАНОВИТЕЛЬНОЕ АМИНИРОВАНИЕ АЗОМЕТИНОВ И	40

ПРОГНОЗ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ	
Акимов Е.С., Султанова Р.М.	
ПЕРСУЛЬФАТНОЕ ОКИСЛЕНИЕ БЕНЗОЛА	
Акназарова Н.В., Хазимуллина Ю.З., Гимадиева А.Р.	41
МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДИЗАЙН ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ИНГИБИТОРОВ	
ЯНУС-КИНАЗЫ JAK2	
Алмазова А.В., Кострюков С.Г.	42
ИССЛЕДОВАНИЕ РЕАКЦИИ ЭТЕРИФИКАЦИИ ГАЛЛОВОЙ	
КИСЛОТЫ С АЛИФАТИЧЕСКИМИ СПИРТАМИ	
Андреева Е.А., Сизенко М.А., Карасева И.Н., Попова Ю.В.	43
ИССЛЕДОВАНИЕ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА ДРЕВЕСИНЫ БЕРЕЗЫ	
ПОСЛЕ КУЛЬТИВИРОВАНИЯ <i>LENTINULA EDODES</i>	
Анисимов И.А., Таганбекова З.К.	44
ИССЛЕДОВАНИЕ ИНГИБИРУЮЩИХ СВОЙСТВ ОСНОВАНИЙ	
ШИФФА ОНО-ТИПА	
Асанова Д.Ж., Сериккалиева А.А., Акатьев Н.В.	46
МОДЕЛИРОВАНИЕ КИНЕТИКИ ЭПОКСИДИРОВАНИЯ ПРОПИЛЕНА	
ГИДРОПЕРОКСИДОМ ИЗОПРОПИЛБЕНЗОЛА	
Багавеев И.М., Улитин Н.В., Бочков М.А., Харлампида Х.Э.,	
Терещенко К.А.	48
ПОЛУЧЕНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ ГИДРОГЕЛЕЙ НА	
ОСНОВЕ КРАХМАЛА И РАЗЛИЧНЫХ СШИВАЮЩИХ АГЕНТОВ	
Балинт Д.А., Таганбекова З.К., Маркин В.И.	50
О РЕГИОСЕЛЕКТИВНОСТИ РЕАКЦИИ 1,3-ДИПОЛЯРНОГО	
ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ ДИФЕНИЛЦИАЗОМЕТАНА К	
НИТРОСТИРОЛУ	
Безрукова Е.В., Черноярва А.О., Калязин В.А.	52
ПРОИЗВОДНЫЕ СТИРОЛА КАК ДИПОЛЯРОФИЛЫ В РЕАКЦИЯХ	
1,3-ДИПОЛЯРНОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ	
Бережная Е.В., Степаков А.В.	54
СИНТЕЗ И СЕЛЕКТИВНОЕ ВОССТАНОВЛЕНИЕ α , β -	
НЕПРЕДЕЛЬНЫХ КЕТОНОВ, СОДЕРЖАЩИХ ЦИКЛОАЦЕТАЛЬНЫЙ	
ФРАГМЕНТ	
Березняк Я.С., Султанова Р.М.	55
СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФЛУОРЕСЦЕНЦИИ	
АРИЛ- И ГЕТАРИЛГИДРАЗОНОВ ОКСАЗОЛ-5(4H)-ОНА	
Биккулова Э.Р., Скляр А.Е., Евстигнеева С.С., Гринёв В.С.	56
ТЕРМИЧЕСКАЯ «АВТОМЕРИЗАЦИЯ» ПИРРОЛА, ФУРАНА И	
ТИОФЕНА	
Богатова С.И., Саттаров Р.И., Томилин О.Б., Фомина Л.В.	57
ПОСЛЕСВЕЧЕНИЕ β -ДИКЕТОНАТОВ ДИФТОРИДА БОРА	
В НИЗКОМОЛЕКУЛЯРНОЙ МАТРИЦЕ БЕНЗОФЕНОНА	59

Бодык Р.Е., Федоренко Е.В.....	
ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРЫ ФОСФОНИЛИРОВАННЫХ АЗОТИБАРБИТУРОВЫХ КРАСИТЕЛЕЙ	
Булгакова Е.В., Егоров Д.М.....	62
ОСОБЕННОСТИ СТАБИЛИЗАЦИИ ПЕРЕХОДНЫХ СОСТОЯНИЙ РЕАКЦИИ ПРИНСА В КЛАСТЕРАХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК	
Вакулин И.В., Рахманов Д.А.....	63
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ 4-ГИДРОКСИ-3-(3-ОКСО-1-(4-БРОМФЕНИЛ)-3- (4-АМИНОФЕНИЛ)ПРОПИЛ)-2 <i>H</i> -ХРОМЕН-2-ОНА С АЗАНУКЛЕОФИЛАМИ	
Вахрушина В.А., Седышев С.А., Ибрагимова Д.Н.....	65
КОМБИНИРОВАННЫЙ СПОСОБ ОЧИСТКИ ЛАКТИДА ДО СТЕПЕНИ ЧИСТОТЫ ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В МЕДИЦИНЕ	
Вишнева А.М., Ерохина Ю.С., Алиев Г.Ш., Томс Р.В., Гервальд А.Ю.....	66
ОКИСЛИТЕЛЬНАЯ ЦИКЛИЗАЦИЯ (1 <i>Z</i> ,5 <i>Z</i>)-ДИЕНОВЫХ СВЯЗЕЙ В СИНТЕЗЕ НОВЫХ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ МАКРОДИОЛИДОВ	
Гайсин И.В., Исламов И.И.	67
СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ СТРУКТУРЫ ХЕЛАТНЫХ БИС- <i>L</i> - ТРИПТОФАНАТОВ Cu(II)	
Галимов М.Н., Берестова Т.В.....	68
СИНТЕЗ ФУНКЦИОНАЛЬНОЗАМЕЩЕННОГО ЕНАМИНА	
Галянин М.В., Скрипченко Е.Г., Лядов В.А.....	70
СИНТЕЗ N-ЗАМЕЩЕННЫХ ТЕТРА(ГЕКСА)ОКСАЗАСПИРОАЛКАНОВ С УЧАСТИЕМ АМИНОХИНОЛИНОВ	
Ишмухаметова И.Р., Гарипова Л.А., Хайруллина А.А., Махмудиярова Н.Н.	71
ПОЛИЦИКЛИЧЕСКИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ДИГИДРО- ТИОФЕН-1,1-ДИОКСИДА	
Герасимов Д.Р., Ефремова И.Е.....	72
СИНТЕЗ БИС-1,3,4-ОКСАДИАЗОЛОВ НА БАЗЕ АЦЕТИЛЕНОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ	
Герасимова Е.А., Рак Р.Д., Егоров Д.М.	73
РЕАКЦИИ ЦИКЛИЧЕСКИХ АЦЕТАЛЕЙ С ЭЛЕМЕНТОРГАНИЧЕСКИМИ СОЕДИНЕНИЯМИ (ИЗ ИСТОРИИ НАУЧНЫХ ШКОЛ УГНТУ)	
Гимаев Р.А., Михайлова Н.Н., Шавшукова С.Ю.....	74
НЕКОТОРЫЕ РЕАКЦИИ N-(ХЛОРАЦЕТИЛ)ФЕНОТИАЗИНА С S- НУКЛЕОФИЛАМИ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКОГО РЯДА	
Глузмин Н.О., Цымбал Т.Л., Даус Е.С., Косенко Д.Д., Киндоп В.К.,	77

Бурый Д.С., Доценко В.В.....	
СИНТЕЗ НЕСИММЕТРИЧНЫХ АМИДИНОВ НА ОСНОВЕ РЕАКЦИИ ДИМЕТИЛ-2-(N-АДАМАНТ-1-ИЛ/ <i>трет</i> - БУТИЛ)ИМИНОЭТЕНИЛФОСФОНАТОВ С НИТРОАНИЛИНАМИ	
Головка А.И., Свиницкая Н.И.	79
ТРАНСФОРМАЦИИ ПРОПИНИЛЬНОГО ЭФИРА ФУЗИДОВОЙ КИСЛОТЫ	
Головнина Д.А., Латыпова А.Ф., Салимова Е.В., Парфенова Л.В.....	80
СОВРЕМЕННЫЕ ПОДХОДЫ К СТЕРЕОСЕЛЕКТИВНОМУ СИНТЕЗУ И РЕАКЦИЯМ ПЕРЕАМИНИРОВАНИЯ 3- ((ДИМЕТИЛАМИНО)МЕТИЛЕН)(ТИО)ОКСОХРОМЕНОНОВ	
Гребенникова В.А, Мажукина А.О.....	81
АННЕЛИРОВАНИЕ ОКСАЗОЛЬНОГО ЦИКЛА К N-ЗАМЕЩЕННЫМ 6- АМИНО-4-АРИЛ-7-ГИДРОКСИ-2,2,4-ТРИМЕТИЛ-1,2,3,4- ТЕТРАГИДРОХИНОЛИНАМ	
Грибанова Я.А., Потапов А.Ю., Карелина К.О.....	83
КОМПЬЮТЕРНОЕ ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ФАРМАКОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ N-ЗАМЕЩЕННЫХ АМИНОФЕНОЛОВ	
Григорьева Н.Ю., Клименко Д.И.....	84
СИНТЕЗ ФУРАНСОДЕРЖАЩИХ ФУРОНАФТОХИНОНОВ НА ОСНОВЕ ГЕМ-БРОМНИТРОЭТЕНОВ	
Демчук З.А., Минаева В.Ю., Озерова О.Ю., Макаренко С.В.....	87
ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ КРАХМАЛА И ЛИМОННОЙ КИСЛОТЫ И ИССЛЕДОВАНИЕ ИХ СВОЙСТВ	
Динер Е.Ю., Таганбекова З.К., Маркин В.И.....	88
ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ДИЦИАНОВИНИЛЬНОГО ФРАГМЕНТА НА ФОТОЭЛЕКТРИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ СПИРОПИРАНОВ ИНДОЛИНОВОГО РЯДА	
Дмитриев В.С., Пугачев А.Д., Бардасов И.Н. , Иевлев М.Ю., Прончатов И.С., Козленко А.С., Смагина М.И., Ожогин И.В.....	90
3-(БЕНЗОИМИДАЗОЛ-2-ИЛ)-1-АРИЛПРОПАН-1-ОНЫ В РЕАКЦИЯХ ДЕГИДРАТАЦИИ	
Егорова А.В., Цимбаленко В.Д., Скляр А.Е., Гринёв В.С.....	91
ИССЛЕДОВАНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ СОПОЛИМЕРОВ КУРКУМИНОИДА ДИФТОРИДА БОРА С МЕТИЛМЕТАКРИЛАТОМ	
Заводянский М.А., Щёлоков А.И.....	93
ИССЛЕДОВАНИЕ РЕЦИКЛИЗАЦИЙ N-АРИЛИТАКОНИМИДОВ ФЕНИЛГИДРАЗИНОМ В РАЗЛИЧНЫХ УСЛОВИЯХ	
Зотова И.С., Ковыгин Ю.А., Шихалиев Х.С.....	94
ФОСФОЛАКТОНОВАЯ АКТИВАЦИЯ КАРБОНОВОЙ ФУНКЦИИ	

В МОЛЕКУЛЕ ПСЕВДОДИПЕПТИДА Иванов Д.Е., Дмитриев М.Э., Рагулин В.В.....	96
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ГУМИНОВЫХ КИСЛОТ ТРОСТНИКОВОГО ТОРФА, ПОЛУЧЕННЫХ МЕТОДОМ ДРОБНОГО ОСАЖДЕНИЯ Каледин Ю.В., Герцен М.М., Александров Н.С., Михайлова С.В., Переломов Л.В.....	97
О РЕАКЦИЯХ 1,3-ДИПОЛЯРНОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ АРИЛАЛЬДИМИНОВ ЭТИЛОВОГО ЭФИРА ГЛИЦИНА К НИТРОСТИРОЛУ Алмазова А.В., Калязин В.А., Кострюков С.Г.....	99
ФОРМИЛИРОВАНИЕ 2-АЛКИЛ-4,5-ДИМЕТИЛ-[1,2,4]ТРИАЗОЛО[1,5- А]ПИРИМИДИН-7(4 <i>H</i>)-ОНОВ Карелина К.О., Потапов А.Ю.....	100
РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ АМИНОГРУПП ТИЕНО[2,3- b]ПИРИДИНОВ В РЕАКЦИЯХ С ХЛОРАЦЕТИЛХЛОРИДОМ Корсунов А.В., Лукина Д.Ю., Беспалов А.В., Киндоп В.К., Доценком В.В.....	102
ТРЕХКОМПОНЕНТНЫЙ СИНТЕЗ СПИРОПИРРОЛИЗИДИНОВ Сорокин В.В., Кочуков А.С., Давыдов Н.И., Борисова С.В., Семченко О.Н.....	103
СИНТЕЗ α -ПИРОНОВ НА ОСНОВЕ ДИГИДРОЛЕВОГЛЮКОЗЕНОНА Кравец В.И., Халилова Ю.А., Дехтярь Т.Ф., Файзуллина Л.Х.....	104
РЕАКТИВ ЛАВЕССОНА В МОДИФИКАЦИИ ГИБРИДНЫХ СИСТЕМ: ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ С ДИМЕДОНИЛАРИЛМЕТИЛ-2 <i>H</i> -ХРОМЕН-2-ОНАМИ Куренкова Д.Х., Рыжов А.С., Мажукина А.О.....	106
СИНТЕЗ НОВЫХ 2-(4- МЕТОКСИКАРБОНЛАМИНОФЕНИЛ)ИНДОЛОВ И ИХ ХИМИЧЕСКАЯ МОДИФИКАЦИЯ Кутгалиева Э.Н., Великородов А.В.....	107
СИНТЕЗ (3 <i>aS</i> ,4 <i>aS</i> ,6 <i>aR</i>)-2-ОКСО-3,3 <i>a</i> ,4,6 <i>a</i> -ТЕТРАГИДРО-2 <i>H</i> - ЦИКЛОПЕНТА[<i>b</i>]ФУРАН-4-ИЛ АЦЕТАТА - КЛЮЧЕВОГО СИНТОНА В ПОДХОДАХ К (-)-ГАЛИЕЛЛАЛАКТОНУ Гимазетдинов А.М., Загитов В.В., Макаев З.Р.....	108
НОВЫЕ ФУНКЦИОНАЛЬНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ПИРИДО[3',2':4,5]ТИЕНО[3,2- <i>d</i>]ПИРИМИДИНА: РЕАКЦИИ С НУКЛЕОФИЛАМИ Маркелевич Д.Ю., Доценко В.В.....	109

СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ АНТИМИКРОБНОЙ АКТИВНОСТИ 5-АМИНО-3-АРИЛ-1-(АРИЛ/АРОИЛ)-1Н-ПИРАЗОЛОВ

Мещерякова А.А., Плотников Н.А., Болквандзе К.Р., Айена К.-Д., Возягин Д.П., Сорокин В.В.....	110
ПРОИЗВОДНЫЕ ИНДОЛА С ТРИАЗОЛЬНЫМИ И ТЕТРАГИДРОПИРРОЛОПИРРОЛДИОНОВЫМИ ФРАГМЕНТАМИ	
Мокрушина Д.А., Сорокина В.А., Лобов А.Н., Цыпышева И.П.....	112
ПРИМЕНЕНИЕ ТЕПЛОВЫХ НАСОСОВ В РЕКТИФИКАЦИИ СМЕСИ БЕНЗОЛ – ТОЛУОЛ – КСИЛОЛ	
Морев Г.И., Рудаков Д.Г., Тимошенко А.В.....	113
ВЛИЯНИЕ ВРЕМЕНИ ИНКУБИРОВАНИЯ РАСТВОРА МЕДА НА ЕГО ПЕРОКСИДНУЮ АНТИБАКТЕРИАЛЬНУЮ АКТИВНОСТЬ	
Муртазина Р.Р., Лутфуллина Р.И., Гаянова А.А., Канчурина М.М., Талипов Р.Ф.....	114
НИКЕЛЕВЫЕ ПЛАСТИНЫ С НАНОВОРСИНКАМИ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ПОЛУЧЕНИЯ БИОДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА ВТОРОГО ПОКОЛЕНИЯ	
Найдина И.А., Тихонова А.А., Рябков Е.Д.....	115
МУЛЬТИКОМПОНЕНТНАЯ РЕАКЦИЯ ИНДОЛА С ФОРМАЛЬДЕГИДОМ, СЕРОУГЛЕРОДОМ И АНИЛИНОМ	
Нигматуллина В.Р., Леонтьев Д.В., Ахметова В.Р.....	116
АНАЛИЗ ЭМУЛЬСИОННЫХ ЭКСТРАКТОВ ДРЕВЕСНОЙ ЗЕЛЕНИ ПИХТЫ И СОСНЫ МЕТОДОМ ОПТИЧЕСКОЙ МИКРОСКОПИИ	
Никонова Н.Н., Хуршкайнен Т.В., Кучин А.В.....	117
ЗАМЕЩЕННЫЕ ТЕТРАГИДРОХРОМЕНКАРБОНИТРИЛЫ, СИНТЕЗ, РЕГИОИЗОМЕРЫ, БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ	
Никулин А.В., Астанкова А.С., Кривенько А.П., Бурыйгин Г.Л.....	118
СИНТЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНО ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЕДИНЕНИЙ В УСЛОВИЯХ РЕАКЦИИ МАННИХА.	
Охиров Ш.М., Валитова Р.С., Канчурина Н.М., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф.....	119
СИНТЕЗ ПОТЕНЦИАЛЬНО ФАРМАКОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ АЗОТСОДЕРЖАЩИХ ПРОИЗВОДНЫХ ДИГИДРОФУРАН-3(2Н)-ОНА	
Охиров Ш.М., Валитова Р.С., Валишина С.В., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф.....	121
НИТРОВАНИЕ N-БЕНЗОИЛ-2,2,4,7-ТЕТРАМЕТИЛ-6-НИТРО-1,2,3,4- ТЕТРАГИДРОХИНОЛИНА	
Потапов А.Ю., Карелина К.О.....	122
СИНТЕЗ А-СЕКО ПРОИЗВОДНЫХ 18β-ГЛИЦИРРЕТИНОВОЙ КИСЛОТЫ	
Расулев Н.М., Каримова Э.Р., Балтина Л.А.....	123

ПОЛУЧЕНИЕ ЛЕВОГЛЮКОЗЕНОНА ИЗ ЦЕЛЛЮЛОЗАСОДЕРЖАЩИХ ОТХОДОВ

Резванов С.В., Каримов Р.Р., Ялалов М.Г., Улмасбаева З.А., Муслюмова Д.М., Карамышева Л.Ш., Галимова Ю.С., Халилова Ю.А., Файзуллина Л.Х.....	124
ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ 2-ЦИАНО-3-(ХЛОРАЦЕТАМИДО)ТИЕНО[2,3- b]ПИРИДИНОВ С ТИОЦИАНАТОМ КАЛИЯ В АЦЕТОНЕ	
Руденко С.В., Лукина Д.Ю., Киндоп В.К., Киндоп Вл.К., Беспалов А.В., Доценко В.В.....	125
ОПТИМИЗАЦИЯ МЕТОДА СИНТЕЗА ТРОЙНОГО ХЕЛАТНОГО КОМПЛЕКСА ЖЕЛЕЗА – АСКОРБАТНИКОТИНАТА ЖЕЛЕЗА	
Самоволов А.В., Блинов А.В., Серов А.В., Серов А.М., Татов А.В.....	126
СИНТЕЗ 3-АЛКИЛИНДАЗОЛОВ	
Сафаргалин Р.Р., Гатауллин Р.Р.....	127
СИНТЕЗ 4,4-ДИМЕТИЛ-1,3-ДИОКСАНА ПО РЕАКЦИИ ПРИНСА В УСЛОВИЯХ ГЕТЕРОГЕННОГО КИСЛОТНОГО КАТАЛИЗА	
Саяров Д.Р., Исмагилов Р.Р., Альмухаметов М.Р., Фаттахов А.Х., Тухватшин В.С., Талипов Р.Ф.....	128
АЛЬДОКЕТЕНИМИНОФОСФОНАТЫ В РЕАКЦИЯХ С 5-АЛКИЛТИО- 6-ТРИФТОРМЕТИЛ-4(3 <i>H</i>)-ОКСОПИРИМИДИНАМИ	
Сидорова А.П., Свинцицкая Н.И.....	130
СИНТЕЗ НОВЫХ S,N-КЕТЕНАЦЕТАЛЕЙ ЧЕРЕЗ S-АЛКИЛИРОВАНИЕ (2,2-ДИМЕТИЛ-4,6-ДИОКСО-1,3-ДИОКСАН-5- ИЛИДЕН)(ФЕНИЛАМИНО)МЕТАНТИОЛАТА	
Скачкова А.Ю., Русских А.А., Доценко В.В.....	131
ТРЕХКОМПОНЕНТНЫЙ СИНТЕЗ НОВЫХ 1- ПИРРОЛИЛПИРРОЛО[3,2,1- <i>l</i>]ХИНОЛИН-2-ОНОВ	
Скопцова А.А., Чаплыгина М.Г., Зотова И.С., Шихалиев Х.С.....	133
ПОЛУЧЕНИЕ ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ АЛГИНАТА НАТРИЯ И СОЛЕЙ КАЛЬЦИЯ В КАЧЕСТВЕ СШИВАЮЩИХ АГЕНТОВ	
Ступко Ю.П., Таганбекова З.К., Маркин В.И.....	134
ВЛИЯНИЕ СОЛЯНОЙ КИСЛОТЫ НА СИНТЕЗ И СВОЙСТВА ГИДРОГЕЛЕЙ НА ОСНОВЕ КАРБОКСИМЕТИЛЦЕЛЛЮЛОЗЫ, СШИТЫХ ЯБЛОЧНОЙ КИСЛОТОЙ	
Таганбекова З.К., Маркин В.И.....	136
СИНТЕЗ α -АЛЛИЛПРОИЗВОДНЫХ АДДУКТОВ ДИЛЬСА-АЛЬДЕРА ЛЕВОГЛЮКОЗЕНОНА И 1,3-ДИЕНОВ	
Улмасбаева З.А., Халилова Ю.А., Файзуллина Л.Х.....	138
ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ КАРБОКСИМЕТИЛИРОВАНИЯ ДРЕВЕСИНЫ БЕРЕЗЫ ПОСЛЕ КУЛЬТИВИРОВАНИЯ <i>LENTINULA</i> <i>EDODES</i> С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ МИКРОВОЛНОВОГО ИЗЛУЧЕНИЯ	
Фельде А.В., Сапегина А.А., Таганбекова З.К.....	140

МУЛЬТИКОМПОНЕНТНАЯ РЕАКЦИЯ ИНДОЛА С ФОРМАЛЬДЕГИДОМ И СУЛЬФИДОМ НАТРИЯ	
Фролова О.В., Леонтьев Д.В., Ахметова В.Р.	142
СИНТЕЗ НОВЫХ КРЕМНИЙ-СОДЕРЖАЩИХ ПЕРОКСИДОВ	
Ишмухаметова И.Р., Хайруллина А.А., Гарипова Л.А., Махмудиярова Н.Н.	143
СИНТЕЗ ПОЛИИЗОБУТИЛЕНСУКЦИНИМИДА	
Хаметчина А.Р., Алексанян Д.Р., Савеленко В.Д., Ершов М.А.	144
СИНТЕЗ И АНТИПРОЛИФЕРАТИВНАЯ АКТИВНОСТЬ N ⁶ -[3-(ТРИФТОРМЕТИЛ)АНИЛИН]-5'-ДЕЗОКСИ-5'-[4-АРИЛ-(1,2,3)- ТРИАЗОЛ-1-ИЛ]-β-D-РИБОФУРАНОЗИЛПУРИНОВ	
Ханчевский М.А.	146
ПОЛУЧЕНИЕ И МОДИФИКАЦИЯ 2-МЕТИЛБЕНЗИМИДАЗОЛА	
Цикалова В.Н., Поддубов А.И., Чалова Е.С.	148
СИНТЕЗ И ФУНГИЦИНАЯ АКТИВНОСТЬ ТЕТРАЗОЛИЛСУЛЬФА- НИЛЬНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 2(5H)-ФУРАНОНА И 3-ПИРРОЛИН-2- ОНА	
Чарушин Н.С., Сайгитбаталова Е.Ш., Колышкина С.В., Латыпова Л.З., Каюмов А.Р., Курбангалиева А.Р.	150
КОНДЕНСАЦИИ ХЛОРИСТОГО ХЛОРАЦЕТИЛА С 4- АМИЛФЕНОЛОМ И 4-Трет-АМИЛФЕНОЛОМ	
Чориев А.У., Абдушукуров А.К.	151
1,3-ДИПОЛЯРНОЕ ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЕ АЗОМЕНИЛИДОВ В РЯДУ ПРОИЗВОДНЫХ МЕТИЛЦИТИЗИНА	
Шайдуллин Д.Ф., Ковальская А.В., Лобов А.Н., Цыпышева И.П.	152
СИНТЕЗ АМИДА НА ОСНОВЕ N',N'-ДИМЕТИПРОПИЛЕНДИАМИНА- 1,3 И 4-ХЛОРМЕТИЛ-1,3-ДИОКСОЛАНА	
Шарифов М.Х., Медведева Н.И.	153
ВЫБОР ОПТИМАЛЬНОГО МЕТОДА СИНТЕЗА ОСИМЕРТИНИБА И ЕГО АНАЛОГОВ	
Швецов А.Б., Семёнов А.В.	154
ИССЛЕДОВАНИЕ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ КОМПОЗИЦИЙ, ДОПИРОВАННЫХ β-ДИКЕТОНАТОМ ДИФТОРИДА БОРА	
Щёлоков А.И., Заводянский М.А.	156
СИНТЕЗ МЕТИЛОВЫХ ЭФИРОВ ЖИРНЫХ КИСЛОТ ИЗ РАСТИТЕЛЬНОГО МАСЛА	
Щербакова Д.С., Алексанян Д.Р., Савеленко В.Д., Ершов М.А.	158
ДЕСТРУКЦИЯ ЗАМЕЩЕННЫХ ЭТИЛ (1,2,3-ТРИАЗОЛ-4-ИЛ) ДИНИТРОАЦЕТАТА В УСЛОВИЯХ КИСЛОТНОГО ГИДРОЛИЗА	
Юртаева Е.А., Утяганова Е.В., Тырков А.Г.	160

ВЛИЯНИЕ ДОБАВОК ЦЕОЛИТА Н-ВЕТА НА СЕЛЕКТИВНОСТЬ
ОБРАЗОВАНИЯ 4,4-ДИМЕТИЛДИОКСАНА-1,3 ПО РЕАКЦИИ
ПРИНСА

Янсарина А.И., Сайфутдинов А.А., Исмагилов Р.Р., Тухватшин В.С.,
Фаттахов А.Х., Талипов Р.Ф. 161

СЕКЦИЯ «АНАЛИТИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЛИНКОМИЦИНА НА
ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОМ СЕНСОРЕ НА ОСНОВЕ
МОЛЕКУЛЯРНО-ИМПРИНТИРОВАННОГО ПОЛИ-3,4-
ЭТИЛЕНДИОКСИТИОФЕНА

Абдуллин И.И., Абдуллин Я.Р., Назыров М.И. 163
164

ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ФРАГМЕНТОВ
МОДИФИЦИРОВАННЫХ ЛАПРОЛОВ МЕТОДОМ ИК -
СПЕКТРОСКОПИИ

Амангельда А.А., Васильева А.В., Бикмеева А.Х., Ширяева Р.Н. 165

ИЗУЧЕНИЕ СПОСОБНОСТИ К ХИРАЛЬНОМУ РАСПОЗНАВАНИЮ
ЦЕОЛИТОПОДОБНОГО МАТЕРИАЛА $\text{Co}_{1.28}(\text{NH}_4)_{0.44}(\text{BP}_2\text{O}_8) \cdot (\text{H}_2\text{O})_{2.41}$

Ахмадеева Э.Э., Изгибаева Д.В., Утеева Ж.Д. 166

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ХАРАКТЕРИСТИК
МЕДИ(II) НА МОДИФИЦИРОВАННОМ УГЛЕРОДИСТОМ
ЭЛЕКТРОДЕ

Ахмадова Д.У., Кутлимуротова Н.Х., Эргашов С.А., Атакулона Н.А. 167

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ ЭЛЕКТРОННЫЙ ЯЗЫК НА ОСНОВЕ
ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНОГО КОМПЛЕКСА ХИТОЗАНА И
АЛЛОТРОПНЫХ ФОРМ УГЛЕРОДА ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ
ПРОИЗВОДИТЕЛЕЙ ПРЕПАРАТОВ НАПРОКСЕНА

Булышева Е.О., Тарханова Ю.Р., Терес Ю.Б., Зильберг Р.А. 169

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР НА ОСНОВЕ
ЭЛЕКТРОПОЛИМЕРИЗОВАННОГО ПИРРОЛА И НАНОЧАСТИЦ
ЗОЛОТА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ТРИПТОФАНА

Вальшина А.Р., Абдуллин Я.Р., Назыров М.И. 171

ХИРАЛЬНЫЙ СЕНСОР НА ОСНОВЕ ПАСТОВОГО ЭЛЕКТРОДА,
МОДИФИЦИРОВАННОГО КОМПЛЕКСНЫМ СОЕДИНЕНИЕМ
НИКЕЛЯ (II) ДЛЯ КОНТРОЛЯ ЭНАНТИОМЕРНОЙ ЧИСТОТЫ
НАПРОКСЕНА

Волкова А.А. 172

РАЗРАБОТКА МЕТОДИКИ ВЫДЕЛЕНИЯ КОМПЛЕКСОВ
НАНОЧАСТИЦА-БЕЛОК МЕТОДОМ ЭКСКЛЮЗИОННОЙ
ХРОМАТОГРАФИИ ДЛЯ ИЗУЧЕНИЯ БЕЛКОВОЙ КОРОНЫ

Гуляев И.А., Сокол М.Б., Камаева О.Е., Клименко М.А., Моллаева М.Р.,
Яббаров Н.Г., Чиркина М.В., Никольская Е.Д. 173

КОМПЛЕКС НИКЕЛЯ (II) КАК ХИРАЛЬНЫЙ СЕЛЕКТОР ДЛЯ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ НАПРОКСЕНА	
Ишмакаева Г.И.....	175
ОПРЕДЕЛЕНИЕ АНТИБИОТИКОВ ХЛОРАМФЕНИКОЛОВОЙ ГРУППЫ В МЯСЕ МЕТОДОМ ВЫСОКОЭФФЕКТИВНОЙ ЖИДКОСТНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ	
Ишпаева А.Н., Соколова Л.И.....	176
ВЛИЯНИЕ НИТРОЗОФЕНОЛА НА ЦИКЛИЧЕСКО- ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИОНОВ Ni(II)	
Карабаева Г.Б., Яхшиева З.З., Кутлимуротова Н.Х., Атакулова Н.....	178
ИЗГОТОВЛЕНИЕ ПОТЕНЦИОМЕРИЧЕСКОГО ДАТЧИКА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ СПАЗМОЛИТИКОВ	
Коринецкая Е.И., Кулешова Н.В.	180
ВЛИЯНИЕ pH ФОНОВОГО ЭЛЕКТРОЛИТА НА ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ТИМОЛОЛА НА КОМПОЗИТНОМ СЕНСОРЕ НА ОСНОВЕ СТЕКЛОУГЛЕРОДНОГО ЭЛЕКТРОДА	
Круглова А. А., Волкова А.А., Зильберг Р.А.....	181
ПРОГНОЗИРОВАНИЕ СОДЕРЖАНИЯ АСФАЛЬТЕНОВ С ПОМОЩЬЮ ИК-СПЕКТРОСКОПИИ И МЕТОДА PLS-РЕГРЕССИИ	
Кувшинов А.С., Бикмеева А.Х., Бикмеев Д.М.....	183
ИЗУЧЕНИЕ ИЗОТЕРМ АДСОРБЦИИ ЭНАНТИОМЕРОВ ПИНЕНА НА МЕТАЛЛООРГАНИЧЕСКОЙ КАРКАСНОЙ СТРУКТУРЕ Zn-Thr(HCl)	
Кузнецова П.В., Баландина К.С., Маминева Я.В., Zhihui Zhang	184
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПРОБОПОДГОТОВКИ ОБРАЗЦОВ КРОВИ МЕТОДОМ ЛИПОФИЛЬНОГО ИЗВЛЕЧЕНИЯ БУТАНОЛОВОЙ СМЕСЬЮ ПРИ АНАЛИЗЕ МЕТОДОМ АТОМНО-ЭМИССИОННОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ С ИНДУКТИВНО-СВЯЗАННОЙ ПЛАЗМОЙ	
Купцова А.П., Вариошкин П.Н.....	185
СЕНСОР НА ОСНОВЕ МОЛЕКУЛЯРНО-ИМПРИНТИРОВАННОГО ПОЛИАКРИЛАМИДА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЛИНКОМИЦИНА	
Кутепова П.Р., Попова А.А., Абдуллин Я.Р., Назыров М.И.....	187
О ВЛИЯНИИ ДОБАВОК НЕОРГАНИЧЕСКИХ СОЛЕЙ В ПОКРЫТИЕ ПЬЕЗОСЕНСОРОВ НА СОРБЦИЮ ЛЕТУЧИХ СОЕДИНЕНИЙ	
Левченко В.А., Шуба А.А., Падня П.Л., Стойков И.И.....	188
ИЗУЧЕНИЕ СПОСОБНОСТИ MOF AG-Zn(HCl)-0,4 К ХИРАЛЬНОМУ РАСПОЗНАВАНИЮ	
Маминева Я.В., Баландина К.С., Кузнецова П.В., Zhihui Zhang.....	189

ИЗУЧЕНИЕ АДсорбции ХИРАльных ФОРМ ТРИПТОФАНА НА ЦЕОЛИТОПОДОБНОМ МАТЕРИАЛЕ БОРФОСФАТ МЕДИ $\text{LiCu}_2[\text{BP}_2\text{O}_8(\text{OH})_2]$	
Мансурова Э.Р., Изибаева Д.В., Утеева Ж.Д.	190
КИНЕТИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ АДсорбции ЭНАНТИОМЕРОВ МЕНТОЛА НА ХИРАльных КРИСТАЛЛАХ CsCuCl_3 С СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОЙ ХИРАльНОСТЬЮ	
Минлибаева А.А., Альмухаметова Э.И., Колоскова А.М., Белоногов Э.В.	191
ОЦЕНКА СТАБИЛЬНОСТИ ЛВ МНН ФАВИПИРАВИР В ЛЕКАРСТВЕННОЙ ФОРМЕ В УСЛОВИЯХ ВОЗДЕЙСТВИЯ УФ- ИЗЛУЧЕНИЯ	
Минькин В.С., Климашина А.А., Ускова Е.Н.	193
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХИРАльной СПОСОБНОСТИ ЦЕОЛИТОПОДОБНОГО МАТЕРИАЛА $\text{Co}_{1,28}(\text{NH}_4)_{0,44}(\text{BP}_2\text{O}_8)(\text{H}_2\text{O})_{2,41}$	
Нуретдинова А.Ш., Яндавлетова А.Д., Утеева Ж.Д.	196
ИЗУЧЕНИЕ МОФ $\{\text{AG-ZN}(\text{HCL})\text{-}0,4\}$ В КАЧЕСТВЕ ХИРАльного СОРБЕНТА	
Осокина Н.А., Баландина К.С., Zhihui Zhang.	197
РАЗРАБОТКА НОВОГО АНАЛИТИЧЕСКОГО РЕАГЕНТА НА ОСНОВЕ ПИРРОЛОПИРИДИНА ДЛЯ КОЛИЧЕСТВЕННОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИОНОВ РТУТИ (II)	
Рамская Е.Н., Бардасов И.Н., Алексеева А.Ю.	199
ВЛИЯНИЕ КИСЛОТНОСТИ ФОНОВОГО ЭЛЕКТРОЛИТА НА ЧУВСТВИТЕЛЬНОСТЬ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОФЕИНА МЕТОДОМ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИИ	
Речкалов А.С., Агеенко Е.И.	201
ВЛИЯНИЕ ДОБАВОК rGO В ТЕТРАБОРАТНЫЙ ЭЛЕКТРОЛИТ НА ЭЛЕКТРОАНАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОКСИДНЫХ СЛОЕВ НА ТИТАНЕ, ФОРМИРУЕМЫЕ ПЛАЗМЕННО-ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКИМ ОКСИДИРОВАНИЕМ	
Салау И.О., Васильева М.С., Щитовская Е.В., Ткачев В.В.	203
ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ АДсорбции ЭНАНТИОМЕРОВ α -ПИНЕНА И ЛИМОНЕНА НА МЕТАЛЛООГРАНИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЕ НА ОСНОВЕ ОКСИДА ГЕРМАНИЯ	
Самарина А.С., Шарафутдинова Ю.Ф., Гуськов В.Ю.	205
ОПРЕДЕЛЕНИЕ Cs-137 В ПОВЕРХНОСТНЫХ И ПОДЗЕМНЫХ ВОДАХ	
Суетина А.К., Воронина А.В.	206

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКАЯ МУЛЬТИСЕНСОРНАЯ СИСТЕМА
ДЛЯ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПРЕПАРАТОВ ТИМОЛОЛА ПО
ПРОИЗВОДИТЕЛЮ

Сычева М.А.....	207
КОМПОЗИТНЫЙ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР НА ОСНОВЕ ХИРАЛЬНОГО БОРОФОСФАТА МЕДИ $\text{LiCu}_2[\text{BP}_2\text{O}_8(\text{OH})_2]$ И НАНОЧАСТИЦ ЗОЛОТА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ И РАСПОЗНАВАНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ МЕТИОНИНА	
Тарханова Ю.Р., Булышева Е.О., Зильберг Р.А.....	208
КОМПЛЕКСЫ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С ХИРАЛЬНЫМИ ЛИГАНДАМИ КАК СЕЛЕКТОРЫ ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНЫХ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИХ СЕНСОРОВ	
Терес Ю.Б., Булышева Е.О., Ишмакаева Г.И.....	209
К ВОПРОСУ ОБ ОЦЕНКЕ ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ БЕЗОПАСНОСТИ ПЫЛЕВОГО ФАКТОРА В ПРОИЗВОДСТВЕННЫХ ПОМЕЩЕНИЯХ ОАО «ФАРМСТАНДАРТ»	
Тимербулатова И.М., Вязьмина Т.В., Диздар А.Э., Дианов В.М.	211
ХИРАЛЬНЫЙ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР ДЛЯ РАСПОЗНАВАНИЯ ЭНАНТИОМЕРОВ АТЕНОЛОЛА	
Траоре М., Зильберг Р.А.	213
ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ АМИНОУКСУСНОЙ КИСЛОТЫ НА ФОРМИРОВАНИЕ ВТОРИЧНЫХ БУФЕРНЫХ СИСТЕМ	
Туйева О.Б., Кутлимуротова Н.Х.....	214
КИНЕТИЧЕСКИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ АДсорбЦИИ ЭНАНТИОМЕРОВ МЕНТОЛОВ НА СЕМИВОДНОМ СУЛЬФАТЕ МАГНИЯ $\text{MgSO}_4 \cdot 7\text{H}_2\text{O}$	
Туркменова А.А., Бикметова М.Р., Аллаярова Д.А.....	216
РАЗРАБОТКА СЕНСОРА НА ОСНОВЕ ГРАФИТИРОВАННОЙ САЖИ CARBORASCK X И МОЛЕКУЛЯРНО-ИМПРИНТИРОВАННОГО ПИРРОЛА ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ МОЛЕКУЛЫ КЛОПИДОГРЕЛА	
Ульмаскулова Л.Р., Абдуллин Я.Р., Назыров М.И.....	218
ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ НИКОТИНА В ЖИДКОСТЯХ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СИГАРЕТ МЕТОДОМ ГАЗОВОЙ ХРОМАТОГРАФИИ	
Фазлыева А.М., Гайнуллина Ю.Ю.....	219
ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОСТАВА В ЖИДКОСТЯХ ДЛЯ ЭЛЕКТРОННЫХ СИГАРЕТ МЕТОДОМ МАСС-СПРЕКТРОМЕТРИИ	
Фазлыева А.М., Гайнуллина Ю.Ю.....	221
ОПРЕДЕЛЕНИЕ СОДЕРЖАНИЯ МАЗУТНОГО ЗАГРЯЗНЕНИЯ МОРСКОЙ ВОДЫ С ПРИМЕНЕНИЕМ ХМС АНАЛИЗА МАРКЕРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ	
Фаррахова А.А., Аллаярова Д.А., Ерастов А.С.....	223

СОРБЦИЯ ТИРОЗИНА ВЫСОКООСНОВНЫМ МАКРОПОРИСТЫМ АНИОНООБМЕННИКОМ AMP28

Харина Т.В., Елисеева Т.В. 224

ИМПЕДАНСНАЯ СПЕКТРОСКОПИЯ РАСТВОРОВ АСФАЛЬТЕНОВ В ТОЛУОЛЕ

Ямова П.А., Бикмеева А.Х., Дубровский Д.И., Бикмеев Д.М. 225

СЕКЦИЯ «ФИЗИЧЕСКАЯ ХИМИЯ»

ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ НАФТЕНОВЫХ КИСЛОТ МЕЖДУ ВОДНЫМИ РАСТВОРАМИ ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА И УГЛЕВОДОРОДАМИ

Аврамович Д.Д., Андреев А.П., Зарифянова М.З. 228

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ПАРАМЕТРЫ РЕГИОИЗОМЕРНЫХ БИС-АДДУКТОВ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИИ C₆₀ ПРОИЗВОДНЫМИ N-МАЛЕОПИМАРОВОЙ КИСЛОТЫ

Алексеева О.Л., Сагтарова А.Ф. 230

ВЛИЯНИЕ АНОДНОЙ МОДИФИКАЦИИ СПЛАВОВ NiZn НА КИНЕТИКУ РЕАКЦИИ ВЫДЕЛЕНИЯ ВОДОРОДА

Амелина Н.С., Бирюков А.И. 231

ИССЛЕДОВАНИЕ ЭКСТРАКЦИИ ЦИНКА ИЗ РАСТВОРОВ СОЛЯНОЙ КИСЛОТЫ СМЕСЬЮ ДИАМИДОВ НЕОДЕКАНОВОЙ КИСЛОТЫ

Афзалетдинова Н.Г., Цыкалова М.М., Гайнуллина Ю.Ю. 233

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРНЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ И ОРИЕНТАЦИИ СИСТЕМЫ

«АЛКОГОЛЬДЕГИДРОГЕНАЗА + НАД» ПРИ СОРБЦИИ НА ПОВЕРХНОСТЯХ ЭЛЕКТРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ПРИМЕРЕ ГРАФИТА.

Байгунов И.А., Холмуродов Х.Т., Гладышев П.П. 234

РЕАКЦИЯ МЕРКАПТОУКСУСНОЙ КИСЛОТЫ С ЭПОКСИДОМ ФУЛЛЕРЕНА C₆₀ ПОД ДЕЙСТВИЕМ УЛЬТРАЗВУКА

Байкова Р.А., Кинзябаева З.С., Боровик Е.В., Алехина И.Е. 235

СВОЙСТВА СОРБЕНТОВ ИЗ КОРЫ СОСНЫ, АКТИВИРОВАННОЙ МЕХАНОХИМИЧЕСКИМИ СПОСОБАМИ

Белаш М.Ю., Веприкова Е.В. 236

КОНДУКТОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ МАГНИЕВЫХ МЕТАЛЛОКОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ 1,2,4-ТРИКАРБОНИЛЬНЫХ ЛИГАНДОВ

Кунавина Е.А., Макаров А.Г., Толкачев А.Е., Трофимова К.А., Брежнев А.М. 238

ФОРМИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИХ WO₃-CoWO₄ ПОКРЫТИЙ НА ТИТАНЕ

Будникова Ю.Б., Васильева М.С. 240

ОПТИЧЕСКИЕ И ФОТОЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЦИНКСОДЕРЖАЩИХ ОКСИДНЫХ ПОКРЫТИЙ НА ТИТАНЕ, СФОРМИРОВАННЫХ МЕТОДОМ ПЛАЗМЕННО- ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОГО ОКСИДИРОВАНИЯ	
Бухари М.А., Попов Д.П., Васильева М.С.....	242
ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ИНДАТА-АЛЮМИНАТА БАРИЯ, ДОПИРОВАННОГО ЦИНКОМ	
Бушуева А.В., Корона Д.В., Анимица И.Е.....	244
СИНТЕЗ И ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА НОВОГО КОМПЛЕКСА ДВУХВАЛЕНТНОГО САМАРИЯ $\text{SmCl}_2 \cdot 0.5\text{H}_2\text{O} \cdot 0.05(^1\text{Bu}_4\text{Al}_2\text{O})$	
Василюк К.С., Якупова С.М., Галимов Д.И.....	245
ЭМИССИОННЫЕ СВОЙСТВА УЛЬТРАКОРОТКИХ НАНОТРУБОК СОСТАВА AlN	
Вертугина Е.С., Курешева М.В., Томилин О.Б., Родионова Е.В., Родин Е.А.	246
ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ И РАСТВОРИТЕЛЯ НА КОНСТАНТУ СКОРОСТИ РЕАКЦИИ ДИЛЬСА-АЛЬДЕРА БЕНЗ(А)АНТРАЦЕНА С 4- ФЕНИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛИН-3,5-ДИОНОМ И ТЕТРАЦИАНОЭТИЛЕНОМ	
Габидуллина А.Р.....	247
ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ УГЛЕРОДНЫХ НАНОМАТЕРИАЛОВ МЕТОДОМ СПЕКТРОСКОПИИ КОМБИНАЦИОННОГО РАССЕЯНИЯ	
Гайфуллина Э.Р., Кузьмина Е. В., Юсупов А. Р.....	248
МОДЕЛИРОВАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ НАНОКОМПОЗИТА ПОЛИЭТИЛЕН-НИТРИД БОРА	
Галин А.М., Купова О.Ю.....	250
ОПРЕДЕЛЕНИЕ КОЭФФИЦИЕНТОВ ЭКСТИНКЦИИ КОФЕИНА, ТЕОФИЛЛИНА И ТЕОБРОМИНА В ВОДЕ	
Гималетдинова Э.Р.....	252
ЭЛЕКТРОАНАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА pH-СЕНСОРОВ НА ОСНОВЕ Mo -СОДЕРЖАЩИХ ОКСИДНЫХ СЛОЕВ НА ТИТАНЕ	
Гольц А.А., Васильева М.С.....	253
МОДЕЛИРОВАНИЕ ГИДРАТИРОВАННОЙ СТРУКТУРЫ МОЛЕКУЛЫ 5-ГИДРОКСИНАФТАЛИН-1-СУЛЬФОКИСЛОТЫ	
Гришина А.Д., Лапыкина Е.А.....	255
ОКИСЛЕННЫЕ ФРАКЦИИ АРАБИНОГАЛАКТАНА СИБИРСКОЙ ЛИСТВЕННИЦЫ КАК ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МАТРИЦЫ ЛЕКАРСТВЕННЫХ СРЕДСТВ	
Давлетшина Д.Т.....	256
СПИНОВЫЕ ЛОВУШКИ СИНГЛЕТНОГО КИСЛОРОДА ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЯ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРОВ ПРИ ФИЗИОЛОГИЧЕСКИХ УСЛОВИЯХ	
Дементьев С.А., Подаров Р.А., Крумкачева О.А.....	257

ВЛИЯНИЕ СТРУКТУРЫ ПЕРОКСИЛЬНЫХ РАДИКАЛОВ НА ИНГИБИРУЮЩУЮ АКТИВНОСТЬ АНИЛИНА	
Забалуева С.С.....	258
ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ РАСПРЕДЕЛЕНИЯ КАРДИОВАСКУЛЯРНОГО ПРЕПАРАТА ВАЛСАРТАН В МОДЕЛЬНЫХ БИОЛОГИЧЕСКИХ СИСТЕМАХ	
Заливалова М.А., Субботкина И.Н.....	259
СИНТЕЗ, СТРУКТУРНАЯ АТТЕСТАЦИЯ И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ BiVO_4 , ЗАМЕЩЕННОГО Eu И Gd	
Захаров Е.О., Емельянова Ю.В., Буянова Е.С.....	261
DFT-ИССЛЕДОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ ОЛИГОМЕРОВ АНИЛИНА И ИНДОЛА	
Захарова Т.Н., Алексеева О.Л., Саттарова А.Ф.....	262
ТЕРМОЧУВСТВИТЕЛЬНЫЙ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЙ МАТЕРИАЛ НА ОСНОВЕ ПОЛИСТИРОЛА, ДОПИРОВАННОГО АНИЗОМЕТРИЧНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ Eu^{3+} И Tb^{3+}	
Зиятдинова Р.М., Крупин А.С., Князев А.А., Галяметдинов Ю.Г.....	263
ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ АМОРФНОГО АЛЮМОСИЛИКАТА НА СВОЙСТВА ГРАНУЛИРОВАННОГО ИЕРАРХИЧЕСКОГО ЦЕОЛИТА ZSM-5	
Ишкильдина А.Х., Аглямова Д.Р., Травкина О.С.....	265
ИССЛЕДОВАНИЕ ПОВЕРХНОСТНОГО НАТЯЖЕНИЯ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ ТРИТЕРПЕНОВЫХ И СТЕРОИДНЫХ САПОНИНОВ	
Ищенко У.С., Мироненко Н.В.....	267
ВЛИЯНИЕ ТОПОЛОГИИ СОРБАТОВ НА УДЕРЖИВАНИЕ В ВЫСОКОЭФФЕКТИВНОЙ ЖИДКОСТНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ	
Капитонов А.В., Колосова Е.А., Курбатова С.В.....	269
ИССЛЕДОВАНИЕ ВОЗМОЖНОСТИ УДАЛЕНИЯ ХЛОРАМФЕНИКОЛА ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ГЕТЕРОГЕННОГО ФЕНТОН ПРОЦЕССА НА МОДИФИЦИРОВАННОМ УГЛЕРОДНОМ ВОЛОКНЕ	
Кармакова М.А., Артемьянов А.П.	271
ЛИПОФИЛЬНОСТЬ 6-МЕТИЛУРАЦИЛА И ЕГО МЕТИЛПРОИЗВОДНЫХ	
Кириллова Н.Д., Файзрахманов И.С., Петрова С.Ф., Иванов С.П., Нугуманов Т.Р.....	272
АНТИОКИСЛИТЕЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ СПИРТОВЫХ ЭКСТРАКТОВ ПОЧЕК СМОРОДИНЫ	
Кирилова А.Н., Забалуева С.С.....	273

РАЗРАБОТКА БИОСОВМЕСТИМЫХ СИСТЕМ ДОСТАВКИ 1-ОКТИЛ-4-КАРБОКСИЛ-1,2,3-ТРИАЗОЛА, ОБЛАДАЮЩЕГО АНТИРАКОВОЙ АКТИВНОСТЬЮ

Клименко Д.Д., Волошина А.Д., Семенов В.Э., Селиванова Н.М. 275

ВЛИЯНИЕ ВИДИМОГО ДИАПАЗОНА СВЕТА И КОНЦЕНТРАЦИИ ОСАДИТЕЛЯ НА ОСОБЕННОСТИ СТРУКТУРООБРАЗОВАНИЯ ОКСИГИДРОКСИДА ЦИРКОНИЯ.

Криволапова А.Д., Куваева А.О. 276

СИНТЕЗ ГРАНУЛИРОВАННОГО ЦЕОЛИТА ZSM-23 ВЫСОКОЙ СТЕПЕНИ КРИСТАЛЛИЧНОСТИ С МИКРО-МЕЗО-МАКРОПОРИСТОЙ СТРУКТУРОЙ

Куватова Р.З., Травкина О.С., Гимаев Т.А., Умуракова К.Е. 277

СОРБЦИЯ ИОНОВ КОБАЛЬТА НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫМИ АЛЮМОСИЛИКАТАМИ КАЛИЯ И НАТРИЯ

Леликович А.К., Нехлюдова Е.А., Ярусова С.Б., Гордиенко П.С., Паротькина Ю.А. 278

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ ТЕМПЕРАТУР СТЕКЛОВАНИЯ ПОЛИМЕРОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ФРАГМЕНТНЫХ ДЕСКРИПТОРОВ И МАШИННОГО ОБУЧЕНИЯ

Лифанов А.Д., Фатыхова А.А., Лифанова Е.Г. 279

ИССЛЕДОВАНИЕ МЕДЬ-КАТАЛИЗИРУЕМОЙ РЕАКЦИИ ПЕРВИЧНЫХ СПИРТОВ С *o*-ТОЛУОНИТРИЛОМ

Лутфуллина А. Р., Рамазанов И. Р., Байгузина А.Р. 281

МАШИННЫЙ ПОИСК ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ИНГИБИТОРОВ ФАКТОРА СВЕРТЫВАЕМОСТИ КРОВИ Ха СРЕДИ ПИРОЗОЛ-ПРОИЗВОДНЫХ (ГИДРОКСИЭТИЛСУЛЬФИМЕТИЛ)ИНДОЛ-3-ИЛ УКСУСНОЙ КИСЛОТЫ

Максимов Л.С., Хайруллина В.Р. 283

ПОИСК ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ФУНГИЦИДОВ СРЕДИ РЯДА ПРОИЗВОДНЫХ ТИАЗОЛА, НАФТАЛИНА И ИНДОЛА

Максимов Л.С., Хайруллина В.Р. 284

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТЕРМИЧЕСКОЙ ИЗОМЕРИЗАЦИИ БОРАЗОЛА

Медведева Д.Е., Томилин О.Б., Фомина Л.В., Родионова Е.В. 285

ОСОБЕННОСТИ УДЕРЖИВАНИЯ АРОМАТИЧЕСКИХ ГЕТЕРОЦИКЛОВ НА ПОВЕРХНОСТИ ОКТАДЕЦИЛСИЛИКАГЕЛЯ В ВЫСОКОЭФФЕКТИВНОЙ ЖИДКОСТНОЙ ХРОМАТОГРАФИИ

Мокраусова А.И., Курбатова С.В. 286

ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ АНТИКОАГУЛЯНТЫ НА ОСНОВЕ РЯДА ПРОИЗВОДНЫХ 4-ФЕНИЛ-3,4-ДИГИДРО-2Н-ПИРИМИДИН-2-ОНА

Неверова А.А., Хайруллина В.Р., Максимов Л.С. 288

ДЕМИНЕРАЛИЗАЦИЯ РАСТВОРА ТИРОЗИН-ХЛОРИД НАТРИЯ ПРИ ЭЛЕКТРОДИАЛИЗЕ С РАЗЛИЧНЫМ СОСТАВОМ СПЕЙСЕРА	
Нестерова Е.Д., Старкова Т.В., Харина А.Ю.....	289
ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОМЕМБРАННОГО РАЗДЕЛЕНИЯ ТИРОЗИНА И САХАРОЗЫ	
Ничеговская Е.М., Кваша А.Е., Харина А.Ю.....	290
МЕХАНИЗМ СОРБЦИИ КРАСИТЕЛЯ МЕТИЛЕНОВОГО СИНЕГО ПОЛИСУРЬМЯНОЙ КИСЛОТЫ	
Нуждина Ю.В., Коваленко Л.Ю.....	291
ФОРМИРОВАНИЕ КОМПЛЕКСНЫХ СОЕДИНЕНИЙ ТИПА «ХОЗЯИН-ГОСТЬ» МЕЖДУ ПАРАЦЕТАМОЛОМ И α -ЦИКЛОДЕКСТРИНОМ	
Огнева А.С., Чернобровкина В.И.....	292
ИМПУЛЬСНАЯ ЭПР СПЕКТРОСКОПИЯ КОРРЕЛИРОВАННЫХ ПАР ФОТОВОЗБУЖДЕННЫХ ТРИПЛЕТНЫХ СОСТОЯНИЙ ФУЛЛЕРЕНОВ	
Подаров Р.А., Дементьев С.А., Крумкачева О.А.....	293
ФОТОЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОЧНЫХ КОМПОЗИТОВ $\text{Ti/TiO}_2\text{-SiO}_2\text{-Bi}_2\text{O}_3$, ПОЛУЧЕННЫХ КОМБИНАЦИЕЙ МЕТОДОВ ПЛАЗМЕННОГО-ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОГО ОКСИДИРОВАНИЯ И ЗОЛЬ-ГЕЛЬ ТЕХНОЛОГИИ	
Попов Д.П., Чакилева Е.А., Арефьева О.Д., Васильева М.С.....	294
РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НОВЫХ ТРАНСПОРТНЫХ СИСТЕМ С ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫМИ МАРКЕРАМИ	
Рамм А.С., Галеева А.И., Сагдеев Д.О., Галяметдинов Ю.Г.....	295
СИНТЕЗ ХИРАЛЬНОГО ДИСУЛЬФИДА НА ОСНОВЕ КАПТОПРИЛА	
Рахимова К.Е., Гарифуллин М.Ф.....	297
СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ МАТЕРИЛОВ НА ОСНОВЕ ФОСФАТА КАЛЬЦИЯ	
Рашитова Л.Ш., Ильясова Р.Р.....	298
ОРИЕНТАЦИОННЫЕ И ОПТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИТОВ ЛИОТРОПНОГО ЖИДКОГО КРИСТАЛЛА С УГЛЕРОДНЫМИ НАНОТОЧКАМИ В МИКРОКАНАЛАХ РАЗЛИЧНОЙ ГЕОМЕТРИИ	
Безруков А.Н., Ренкова Д.Р., Габдрахманова Д.Р., Галеева А.И., Галяметдинов Ю.Г.....	299
МОДЕЛИРОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ЛИГАНДНОГО ОКРУЖЕНИЯ НА КВАНТОВЫЙ ВЫХОД ЖИДКОКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ КОМПЛЕКСОВ ЕВРОПИЯ(III)	
Романова К.А., Галяметдинов Ю.Г.....	300
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ХИНОЛИНА В ВОДНО-АЦЕТОНИТРИЛЬНОЙ СРЕДЕ	
Рыжкин С.А., Курбатова С.В.....	302

КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ ЭЛЕКТРОННЫХ СПЕКТРОВ ПОГЛОЩЕНИЯ ПРОИЗВОДНЫХ ОКСАДИАЗОЛА	
Салькова А.М., Коновалова А.А.	303
ОПТИМИЗАЦИЯ СИСТЕМ В ХИМИЧЕСКОЙ КИНЕТИКЕ МЕТОДОМ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ	
Сафаров Э.Ф.	304
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ Н-КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ МЕЗОГЕННОГО АЗОСОЕДИНЕНИЯ И ПРОИЗВОДНЫХ БИПИРИДИНА	
Семенова П. С., Федоров М.С.	305
СКАНДАТ-АЛЮМИНАТ БАРИЯ, ДОПИРОВАННЫЙ Zr(IV): СИНТЕЗ, ГИДРАТАЦИЯ, ЭЛЕКТРОПРОВОДНОСТЬ	
Сливницын И.А., Бушуева А.В., Анимича И.Е.	306
ОСОБЕННОСТИ ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКОГО ОСАЖДЕНИЯ ЦИНКА В НЕЙТРАЛЬНОЙ СРЕДЕ В ПРИСУТСТВИИ ФЛОКУЛЯНТОВ	
Смородина Л.А., Шайкина Д.А., Агеенко Е.И., Колесников А.В.	307
МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ОСУШКИ ПРИРОДНОГО ГАЗА	
Собина Ю.А., Файзуллина З.Р.	308
ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭНЕРГИИ ОБРАЗОВАНИЯ ДЕФЕКТОВ АТОМНОГО ОСТОВА УЛЬТРАКОРОТКИХ УГЛЕРОДНЫХ НАНОТРУБОК	
Соваренко Д.О., Томилин О.Б., Родионова Е.В., Родин Е.А.	310
ВЛИЯНИЕ ТИРОЗИНА НА ТРАНСПОРТНЫЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ АНИОНООБМЕННЫХ МЕМБРАН ПРИ ЭЛЕКТРОДИАЛИЗЕ С БИПОЛЯРНЫМИ МЕМБРАНАМИ	
Стрельников М.М., Голотвина А.М., Елисеева Т.В.	311
МГК-АНАЛИЗ ВЛИЯНИЯ pH НА ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ АНИЛИНА НА УГОЛЬНО-ПАСТОВОМ ЭЛЕКТРОДЕ	
Сякаев Р.С., Арсланова Р.Ф., Сидельников А.В., Мустафин А.Г.	312
СИНТЕЗ КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С L-ГИСТИДИНОМ	
Такиева Г.А.	314
ВЛИЯНИЕ ТЕМПЕРАТУРЫ И РАСТВОРИТЕЛЯ НА КОНСТАНТУ СКОРОСТИ АЛЬДЕР-ЕНОВОЙ РЕАКЦИИ 4-ФЕНИЛ-1,2,4-ТРИАЗОЛИН-3,5-ДИОНА С 2-КАРЕНОМ	
Телманова Д.З.	315
КОМПЛЕКС ВКЛЮЧЕНИЯ β -ЦИКЛОДЕКСТРИН – ХЕЛИДОНОВАЯ КИСЛОТА В ВОДНОМ РАСТВОРЕ. ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ	
Терехина Е.Н., Одинцова Е.Г., Антипова М.Л., Петренко В.Е.	316

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ИЗОТЕРМИЧЕСКИХ И КИНЕТИЧЕСКИХ ПАРАМЕТРОВ АДсорбции ПРОИЗВОДНЫМИ ПОЛИ[2-МЕТИЛ-1 <i>H</i> - ИНДОЛА]	
Азнабаева М.Р., Перминова А.А., Усманова Г.С., Латыпова Л.Р.....	318
КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ЯНТАРНОЙ КИСЛОТЫ С 5-ГИДРОКСИ-1,3,6-ТРИМЕТИЛУРАЦИЛОМ В ВОДЕ	
Фазлыева Л.А.	319
СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ ОРОТОВОЙ КИСЛОТЫ С ЦИКЛОДЕКСТРИНАМИ	
Фатхулова А.М.	320
РОЛЬ ТОПОЛОГИИ ПОР ЦЕОЛИТОВ НА ИХ КАТАЛИТИЧЕСКУЮ АКТИВНОСТЬ В РЕАКЦИИ АМИНО-КЛЯЙЗЕНА	
Фахретдинов Д.Ш., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф.	321
ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ ДИАМЕТРА ПОР ЦЕОЛИТОВ НА ЭНЕРГИЮ СТАБИЛИЗАЦИИ РЕАКЦИИ АМИНО-КЛЯЙЗЕНА	
Фахретдинов Д.Ш., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф.....	322
ПЛАЗМЕННО-ЭЛЕКТРОЛИТИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОЧНЫХ $\text{TiO}_2\text{-CoMoO}_4$ ГЕТЕРОСТРУКТУР	
Федорова С.А., Васильева М.С.	323
СИНТЕЗ И АНТИКОРРОЗИОННЫЕ СВОЙСТВА ТЕТРАГИДРОХИНОЛИНОВ	
Хуснитдинов К.Р., Азнабаева М.Р.....	324
БАКТЕРИЦИДЫ НА ОСНОВЕ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ СОЛЕЙ N-АЛКЕНИЛАРИЛАМИНОВ	
Хуснитдинов К.Р., Азнабаева М.Р.....	325
СИНТЕЗ И АНТИКОРРОЗИОННЫЕ СВОЙСТВА ОРТО-АЛКЕНИЛАРИЛАМИНОВ	
Хуснитдинов К.Р., Азнабаева М.Р.....	326
ОБРАЗОВАНИЕ КОМПЛЕКСОВ ВКЛЮЧЕНИЯ ЦИКЛОДЕКСТРИНОВ С ИЗОНИАЗИДОМ	
Чернобровкина В.И., Огнева А.С.	327
РЕАКЦИОННАЯ СПОСОБНОСТЬ {3-[(10 <i>H</i> -ФЕНОТИАЗИН-2-ИЛ- КАРБОНИЛ) АМИНО]ПРОПИЛ}(ТРИФЕНИЛ)ФОСФОНИУМ БРОМИДА В КАЧЕСТВЕ ИНГИБИТОРА РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОГО ОКИСЛЕНИЯ 1,4-ДИОКСАНА	
Шараева К.С., Сафарова И.В.	328
АНТИРАДИКАЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ N-(10 <i>H</i> -ФЕНОТИАЗИН-2-ИЛ- МЕТИЛ)ОКТАНАМИДА НА ПРИМЕРЕ МОДЕЛЬНОЙ РЕАКЦИИ ИНИЦИИРОВАННОГО ОКИСЛЕНИЯ 1,4-ДИОКСАНА	
Шараева К.С., Сафарова И.В.	329

N-(9-{[АМИНО(ИМИНО)МЕТИЛ]АМИНО}ОКТИЛ)-10Н-ФЕНОТИАЗИН-2-КАРБОКСАМИД ГИДРОХЛОРИД В КАЧЕСТВЕ ИНГИБИТОРА РАДИКАЛЬНО-ЦЕПНОГО ОКИСЛЕНИЯ ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА	
Шараева К.С., Селуянова А.А.	330
АНТИОКИСЛИТЕЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ ПРОИЗВОДНЫХ ЦИКЛОГЕКСАНОНА В РЕАКЦИИ ИНИЦИИРОВАННОГО ОКИСЛЕНИЯ 1,4-ДИОКСАНА	
Шараева К.С., Сафарова И.В., Охиров Ш.М., Латыпова Э.Р.	332
АНТИОКСИДАНТНАЯ СПОСОБНОСТЬ ОКСИМА 2,4-ДИОКСАСПИРО[5.5]УНДЕКАН-7-ОН НА ПРИМЕРЕ МОДЕЛЬНОЙ РЕАКЦИИ ИНИЦИИРОВАННОГО ОКИСЛЕНИЯ ИЗОПРОПИЛОВОГО СПИРТА	
Шараева К.С., Гайсина Л.Д., Охиров Ш.М., Латыпова Э.Р.	333
ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ АНТИКОАГУЛЯНТЫ НА ОСНОВЕ РЯДА ПРОИЗВОДНЫХ 4-ФЕНИЛ-3,4-ДИГИДРО-2Н-ПИРИМИДИН-2-ТИОНА	
Шарипова Е.Е., Хайруллина В.Р., Максимов Л.С.	335
СЕКЦИЯ «ХИМИЯ ВЫСОКОМОЛЕКУЛЯРНЫХ СОЕДИНЕНИЙ»	
ИЗУЧЕНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РАСТВОРОВ СМЕСЕЙ ПЕКТИНА И ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА	
Аббасова Р.Р.	337
СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПОЛИМЕРНЫХ МАТРИКСОВ НА ОСНОВЕ НАТРИЕВОЙ СОЛИ N-СУКЦИНИЛХИТОЗАНА	
Алмаев Б.Ф.	338
СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ГИДРОГЕЛЯ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА ДЛЯ ГИБКИХ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ СЕНСОРОВ	
Анисимова М.М., Фомина Е.Д., Рябков Е.Д., Гервальд А.Ю.	340
АМИНОПРОПИЛЕНАМИННАЯ ФУНКЦИОНАЛИЗАЦИЯ ГИПЕРРАЗВЕТВЛЕННЫХ ПОЛИЭФИРОПОЛИОЛОВ	
Вагапова А.И., Кутырев Г.А.	341
ВЛИЯНИЕ РАЗЛИЧНЫХ ДОБАВОК ПРИРОДНОГО НАПОЛНИТЕЛЯ НА БИОРАЗЛАГАЕМОСТЬ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭТИЛЕНА НИЗКОЙ ПЛОТНОСТИ	
Варьян И.А., Тюбаева П.М., Попов А.А.	343
СИНТЕЗ ПОЛИМЕРНЫХ ДИСПЕРСИЙ В МИЦЕЛЛЯРНЫХ РАСТВОРАХ ТРИБЛОКСОПОЛИМЕРА PLURONIC P123	
Водолазская Т.К., Бессонова А.М., Слепцова О.В.	344
ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ИНСТРУМЕНТА FORCITE В ПРОГРАММЕ MATERIALS STUDIO ДЛЯ РАСЧЕТА НЕКОТОРЫХ ПАРАМЕТРОВ РАСТВОРА ПЕКТИН-ВОДА.	
Галимов Д.А., Кулиш Е.И.	345

ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СМЕСЕЙ ПОЛИЛАКТИД-ПОЛИКАПРОЛАКТОН- ХИТОЗАН-ЦЕФТРИАКСОН	
Гарипова Л.Г.....	346
РАЗРАБОТКА ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА ДЛЯ ПОЛИУРЕТАНОВЫХ ТРУБОК (СТЕНТОВ)	
Графченко С.Ю., Гегель Н.О., Шиповская А.Б.....	347
ВЛИЯНИЕ МЕТИЛОВОГО ЭФИРА ЭПОКСИДИРОВАННОГО СОЕВОГО МАСЛА НА ТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА	
Закиева А.И., Нафикова Р.Ф., Мазина Л.А., Ахметханов Р.М.....	348
НАНОЧАСТИЦЫ Ni НА ПЛАТФОРМЕ ГИПЕРРАЗВЕТВЛЕННОГО ПОЛИАМИНОЭТИЛЕНКАРБОНАТА ЧЕТВЕРТОЙ ГЕНЕРАЦИИ	
Иванова А.И., Максимов А.Ф., Кутырев Г.А.....	350
СИНТЕЗ СТОМАТОЛОГИЧЕСКИХ БАЗИСНЫХ САМООТВЕРЖДАЕМЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИМЕТИЛМЕТАКРИЛАТА	
Игошина В.И., Ширшин К.К.....	352
ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СМЕСЕЙ ПОЛИЛАКТИД-ПОЛИКАПРОЛАКТОН- ХИТОЗАН-АМИКАЦИН	
Казыргалин А.И.	353
СОРБЦИОННЫЕ СВОЙСТВА ПЛЕНОК НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА И НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ГИДРОФУРАНА	
Калеева В.В., Охиров Ш.М.	354
ВЛИЯНИЕ ПРИРОДЫ РЕЦЕПТОРНОЙ СРЕДЫ НА ПРОЦЕСС ВЫСВОБОЖДЕНИЯ ЦЕФАЗОЛИНА ИЗ ЖИДКИХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ФОРМ	
Караськина К.Д.....	355
ВЛИЯНИЕ ЦИНКА КАК ПРОТИВОИОНА НА СВОЙСТВА ХОНДРОИТИН-4,6-СУЛЬФАТОВ ХРЯЩЕВОЙ ТКАНИ	
Козырев С.В., Понеделькина И.Ю.....	356
РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ДАННЫЕ И ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ НАБУХАНИЯ КОВАЛЕНТНО-ИОННОГО ГИДРОГЕЛЯ НА ОСНОВЕ ХИТОЗАНА И 5- НОРБАРНЕН-2,3-ДИКАРБОНОВОГО АНГИДРИДА	
Абдурахимов Т.Д., Мулюкова С.М., Королев И.Н., Мингалеева Г.Р., Мингалеев В.З.....	357
РАЗРАБОТКА РЕАГЕНТА КОМПЛЕКСНОГО ДЕЙСТВИЯ ДЛЯ ПОДГОТОВКИ ТЯЖЁЛОЙ ВЫСОКОВЯЗКОЙ НЕФТИ	
Красильников А. В., Амангельда А. А., Ширяева Р. Н.....	359

КОМПОЗИТНЫЕ ГЕЛЬ-ПЛЕНКИ ПОЛИСАХАРИД-ЖЕЛАТИНА БИОМЕДИЦИНСКОГО НАЗНАЧЕНИЯ	
Лепехин Е.С., Чиняев А.В., Малинкина О.Н., Шиповская А.Б.....	360
СОЗДАНИЕ И ИССЛЕДОВАНИЕ ТОКОПРОВОДЯЩИХ И МАГНИТОВОСПРИИМЧИВЫХ ГИДРОГЕЛЕВЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИВИНИЛОВОГО СПИРТА И ЖЕЛАТИНА	
Лимаренко В.И., Фомина Е.Д., Крапивко А.Л.....	363
ВЛИЯНИЕ ОТЖИГА НА ТЕПЛОФИЗИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА И ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА	
Макогон А.А., Базунова М.В.....	365
СИНТЕЗ ГИДРОГЕЛЕЙ ИЗ АКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ И НОВОГО КРОСС-ЛИНКЕРА 3,4-ДИМЕТАКРИЛКАРБОКСИСУЛЬФОЛАН	
Мулюкова С.М., Сагитова А.Ф., Королев И.Н., Мингалеева Г.Р., Мингалеев В.З.....	367
ПОЛУЧЕНИЕ ПОЛИМЕР-КОЛЛОИДНЫХ ДИСПЕРСИЙ НА ОСНОВЕ КОЛЛОИДНЫХ ЧАСТИЦ ГИДРОКСИДА МАГНИЯ, СТАБИЛИЗИРОВАННЫХ ПОЛИ-N-ВИНИЛПИРРОЛИДОНОМ	
Мустафина С.А.....	369
ВЛИЯНИЕ МОДИФИКАТОРОВ НА ПРОЦЕСС ВЫСВОБОЖДЕНИЯ ЦЕФАЗОЛИНА ИЗ ЖИДКОЙ ЛЕКАРСТВЕННОЙ ФОРМЫ НА ОСНОВЕ ПЕКТИНА	
Мухамедзянова Д.А.....	370
ИССЛЕДОВАНИЕ ОБРАЗЦОВ ВТОРИЧНОГО ПОЛИЭТИЛЕНТЕРЕФТАЛАТА, ПРЕДОСТАВЛЕННОГО АО «ПОЛИЭФ»	
Мухаметдинов А.Д.....	371
ПОЛУЧЕНИЕ ОГНЕСТОЙКОГО ЖЁСТКОГО ПЕНОПОЛИУРЕТАНА И ИЗУЧЕНИЕ ЕГО СВОЙСТВ	
Никифоров Г.А., Фомина Е.Д., Рябков Е.Д., Гервальд А.Ю.....	372
ПЛЕНОЧНЫЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ СМЕСИ ПОЛИМЕРОВ	
Николайчук А.А.....	373
АНАЛИЗ УПРУГО-ГИСТЕРЕЗИСНЫХ СВОЙСТВ НАПОЛНЕННЫХ ЭЛАСТОМЕРОВ ПРИ ВВЕДЕНИИ ТЕХНОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ДОБАВОК	
Острохишко Е.А., Меренкова Е.А., Карманова О.В.....	374
ПОЛУЧЕНИЕ ИОНООБМЕННОЙ СМОЛЫ НА ОСНОВЕ МАЛЕИНОВОГО АНГИДРИДА	
Пантелеев Н.А., Мухамедзянова А.А.....	376
ИЗУЧЕНИЕ РЕОЛОГИЧЕСКИХ СВОЙСТВ РАСТВОРОВ ПОЛИЛАКТИДА	
Пляшечникова Д.В.....	377

ВЛИЯНИЕ АЛЮМОСИЛИКАТНЫХ МИКРОСФЕР НА РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА	
Пыжьянова А.А.....	378
ПОЛУЧЕНИЕ ГИАЛУРОНАТА МЕДИ КАТИОНООБМЕННОЙ РЕАКЦИЕЙ $\text{Na}^+/\text{Cu}^{2+}$ В СУСПЕНЗИОННОЙ СРЕДЕ	
Рахимова Л.Ю., Башловкин С.К., Понеделькина И.Ю.....	379
ПОЛИМЕРНАЯ КОМПОЗИЦИОННАЯ СМЕСЬ С РАЗЛИЧНЫМИ СФЕРАМИ ПРИМЕНЕНИЯ	
Рябова В.О., Рогов В.Е.....	380
СПОСОБЫ МОДИФИКАЦИИ ПОЛИМЕРНОЙ МАТРИЦЫ НА ОСНОВЕ ПЕКТИНА	
Седунова Е.Б.....	382
О ВОЗМОЖНОСТИ ПОЛУЧЕНИЯ ПОРИСТЫХ РАНЕЗАЖИВЛЯЮЩИХ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ КОМПОЗИЦИЙ ПОЛИСАХАРИДОВ И НАНОЧАСТИЦ ЙОДИДА СЕРЕБРА	
Алмаев Б.С., Соснина Д.А.....	383
ОЦЕНКА СОРБЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИКАПРОЛАКТОНА И ХИТОЗАНА	
Сунаргулов А.Б., Бакирова Э.Р.....	385
ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИОННЫХ СВОЙСТВ ПЛЁНОЧНЫХ КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИЛАКТИДА И ХИТОЗАНА	
Сунаргулов А.Б.....	386
ПРИМЕНЕНИЕ ЙОДИДА СЕРЕБРА В МАТРИЦЕ ХИТОЗАНА КАК ФОТОРЕЗИСТИВНЫЙ ДАТЧИК	
Терегулов Т.Б.....	387
ВЛИЯНИЕ ОБРАБОТКИ ОЗОНОМ НА СТРУКТУРУ И СВОЙСТВА ПОЛИ-3-ГИДРОКСИБУТИРАТА	
Тюбаева П.М., Варьян И.А., Попов А.А.....	389
ВЛИЯНИЕ АЛЮМОСИЛИКАТНЫХ МИКРОСФЕР И СТЕКЛОВОЛОКНА НА ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПОЛИПРОПИЛЕНА	
Хазиева Р.Р.	390
РЕОЛОГИЧЕСКИЕ ИССЛЕДОВАНИЯ ОБРАЗЦОВ ЦЕЛЛЮЛОЗЫ, СИНТЕЗИРУЕМЫХ УКСУСНО-КИСЛЫМИ БАКТЕРИЯМИ	
Хлескин В.С.....	391
ОКИСЛИТЕЛЬНАЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИЯ ОРТО- И ПАРА- АМИНОФЕНОЛОВ	
Шайдуллина Г.А., Гимадиева А.Р.....	392

ВЛИЯНИЕ МОДИФИЦИРУЮЩИХ ДОБАВОК НА ПРОЦЕСС ВЫСВОБОЖДЕНИЯ ЛЕКАРСТВЕННОГО ВЕЩЕСТВА ИЗ ЖИДКОЙ ЛЕКАРСТВЕННОЙ ФОРМЫ НА ПОЛИМЕРНОЙ ОСНОВЕ	
Шарафутдинова И.Р.....	393
ПОЛУЧЕНИЕ НАНОЧАСТИЦ НА ОСНОВЕ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТНОГО КОМПЛЕКСА ХИТОЗАН/КАРРАГИНАН И ИЗУЧЕНИЕ ИХ АДСОРБЦИОННЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ДЛЯ ПРИМЕНЕНИЯ В ТЕРАНОСТИКЕ	
Шелепова А.С., Миргалеев Г.М., Шилова С.В, Галяметдинов Ю.Г.....	394
ВЛИЯНИЕ СТЕКЛОВОЛОКНА НА РЕОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПОЗИЦИЙ НА ОСНОВЕ ПОЛИПРОПИЛЕНА	
Юмагулова А.Ф.....	396
ИЗУЧЕНИЕ СВОЙСТВ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОЧНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ СМЕСЕЙ ПОЛИЛАКТИД-ПОЛИКАПРОЛАКТОН- ХИТОЗАН-ОКСИД ЦИНКА	
Якупов М.Р.....	397
ИЗУЧЕНИЕ ВЛИЯНИЯ НАПОЛНИТЕЛЯ НА ТЕМПЕРАТУРУ ПЛАВЛЕНИЯ ОБРАЗЦОВ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПВДФ	
Яхина Г.С, Набутова К.В., Бикбулатов В.Р.....	398
ИЗУЧЕНИЕ ФИЗИКО-МЕХАНИЧЕСКИХ СВОЙСТВ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ ПОЛИВИНИЛИДЕНФТОРИДА	
Яхина Г.С., Набутова К.В.	400
СЕКЦИЯ «ДОСТИЖЕНИЯ ШКОЛЬНИКОВ В ХИМИИ»	
ХИМИЯ БЕЗ СТРАХА: КАК РАБОЧИЕ ЛИСТЫ ДЕЛАЮТ ПРОЦЕСС ОБУЧЕНИЯ БОЛЕЕ КОМФОРТНЫМ	
Герасименко Б.В. Громова Ю.А., Медведева Е.С.....	403
ЭКОЛОГИЧЕСКИЙ МОНИТОРИНГ РЕК ГОРОДА БАРНАУЛА ПО ХИМИЧЕСКИМ ПОКАЗАТЕЛЯМ	
Гичев С.А., Калюта Е.В.	405
ИЗУЧЕНИЕ ПОВЕРХНОСТНО-АКТИВНЫХ СВОЙСТВ РАСТВОРОВ ПИЩЕВЫХ ДОБАВОК Е401, Е1521, Е1442 И КМК В СМЕСИ С АЗОТНЫМИ УДОБРЕНИЯМИ	
Рыжиков Р.Д., Новиков П.А., Калюта Е.В.	407
ХЛЕБ, КОТОРЫЙ МЫ ЕДИМ	
Сираев М.Д., Фаттахов А.Х.	409
ИССЛЕДОВАНИЕ ПШЕНИЧНОЙ МУКИ НА СОДЕРЖАНИЕ АМИНОКИСЛОТ	
Шафигуллина А.Р., Михайлова Н.Н.	411

При подготовке электронного издания использовались следующие программные средства:

- Adobe Acrobat – текстовый редактор;
- Microsoft Word – текстовый редактор.

Все права защищены. Книга или любая ее часть не может быть скопирована, воспроизведена в электронной или механической форме, в виде фотокопии, записи в память ЭВМ, репродукции или каким-либо иным способом, а также использована в любой информационной системе без получения разрешения от издателя. Копирование, воспроизведение и иное использование книги или ее части без согласия издателя является незаконным и влечет уголовную, административную и гражданскую ответственность.

Научное издание

ДОСТИЖЕНИЯ МОЛОДЫХ УЧЕНЫХ: ХИМИЧЕСКИЕ НАУКИ

**Сборник тезисов
X Всероссийской молодежной конференции
(г. Уфа, 22–23 мая 2025 г.)**

Электронное издание сетевого доступа

*За достоверность информации, изложенной в статьях,
ответственность несут авторы.
Статьи публикуются в авторской редакции*

Подписано к использованию 03.06.2025 г.
Гарнитура «Times New Roman». Объем 10,80 Мб.
Заказ 68.

*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