

СЕКЦИЯ 1

Синтез и свойства неорганических и координационных соединений

УДК 546.763; 544.653.22

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ КАРБОКСИЛАТОВ ХРОМА (III)

Адыгамов М.Ш.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: musa20930@gmail.com

Ключевые слова: электрохимия, электрохимический синтез, карбоксилаты переходных металлов, катализаторы, олигомеризация этилена.

Синтез карбоксилатов переходных металлов, используемых в качестве катализаторов олигомеризации этилена [1], производится посредством обменных реакций карбоксилатов щелочных металлов и безводных галогенидов переходных металлов. Невозможность подбора растворителя одновременно для обоих компонентов приводит к использованию гетерогенных процессов, включая механохимические [2], что вызывает удорожание технологии. В нашей лаборатории был разработан альтернативный способ [3] – электросинтез карбоксилатов циркония с использованием растворимого анода.

В данной работе исследована возможность электросинтеза карбоксилатов хрома с использованием растворимого хромового анода на примере гексаноата и 2-этилгексаноата хрома. Методом циклической вольтамперометрии изучен процесс анодного растворения хрома в органических растворителях. Выполнена серия электрохимических экспериментов с использованием растворимого хромового анода в присутствии карбоновых кислот. Методами масс-спектрометрии (ESI-MS), УФ-видимой и ИК-спектроскопии показано образование полиядерных карбоксилатов хрома и установлено участие растворителя и компонентов фонового электролита в процессе комплексообразования.

Список литературы

1. McGuinness D. S. Olefin oligomerization via metallacycles: dimerization, trimerization, tetramerization, and beyond //Chemical reviews. – 2011. – Т. 111. – №. 3. – С. 2321-2341.
2. Махаев В. Д. и др. Способ получения компонента каталитической системы для олигомеризации этилена, компонент каталитической системы, каталитическая система для олигомеризации этилена на основе этого компонента и способ олигомеризации этилена. – 2015.
3. E. et al. Electrochemical synthesis of zirconium pre-catalysts for homogeneous ethylene oligomerization //Catalysts. – 2019. – Т. 9. – №. 12. – С. 1059.

УДК 547.1

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ ТЕТРАЯДЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ МЕДИ(I) С 1,3-ДИАЗА-5-ФОСФАЦИКЛОГЕКСАНАМИ

Ахмадгалеев К.Д.^{1,2}, Стрельник И.Д.^{1,2}, Герасимова Т.П.¹, Карасик А.А.¹, Синяшин О.Г.¹

¹ Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН

Russia, Kazan, A.E. Arbutov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences

² Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: kamilahmadgaleev@gmail.com

Ключевые слова: P,N-лиганды, комплексы меди(I), люминесценция.

Тетраядерные комплексы Cu(I) с P,N-лигандами представляют интерес как потенциальные молекулярные люминесцентные термометры, способные проявлять двухполосную эмиссию, чувствительную к изменению температуры окружающей среды. В рамках данной работы были синтезированы пирдилсодержащие 1,3-диаза-5-фосфациклогексаны и их полиядерные комплексы меди(I), в которых полиядерная структура комплекса стабилизируется координацией атома азота пиридинового фрагмента и атома фосфора фосфиновой группы (Рис. 1) [1].

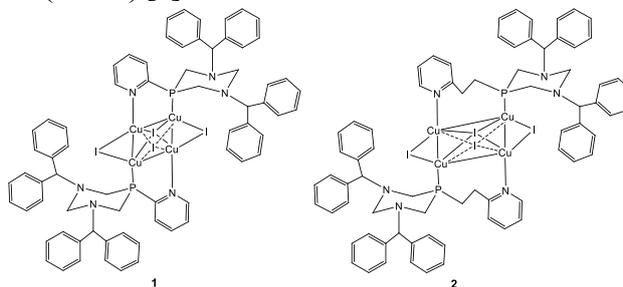


Рис. 1. Структуры комплексов меди(I)

Полученные комплексы проявляют двухполосную люминесценцию с максимумами в зеленой и красной области видимого света, вызванную наличием двух возбужденных триплетных состояний, отличающихся геометрией Cu₄I₄ ядра.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 19-13-00163-П

Список литературы

1. Strel'nik, I. Emission and Luminescent Vapochromism Control of Octahedral Cu₄I₄ Complexes by Conformationally Restricted P,N Ligands / I. Strel'nik, A. Shamsieva, K. Akhmadgaleev, et al. // Chem. - A Eur. J. - 2022. - V.29, № 10.

УДК 546.75

ОСОБЕННОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ СЕРЫ В УЛЬТРАМИКРОГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕДАХ

Гайфуллина Э.Т., Галимова Э.Р., Зиятдинова А.Б., Амиров Р.Р., Заиров Р.Р., Корнев
Т.А., Ханнанов А.А.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

Email: annette_zb@mail.ru

Ключевые слова: наночастицы серы, водорастворимые полимеры, растворы поверхностно-активных веществ.

Ультрамикрогетерогенные среды содержат области разной полярности, которые могут служить «нанореакторами» для получения частиц заданного размера и формы. Таким образом, при получении наночастиц методом «снизу вверх» можно контролировать размер и форму частиц, меняя условия проведения синтеза. В данной работе были оценены возможности мицеллообразующих ПАВ и некоторых водорастворимых полимеров выступать в роли нанореакторов при получении серы в водных растворах. За счет образования *in situ* более мелких частиц серы по сравнению с водной средой, происходит стабилизация коллоидного раствора. В связи с этим полимеры и ПАВ можно использовать для контроля размеров образующихся частиц серы в растворе.

В данной работе серу получали из тиосульфата натрия в кислой среде в присутствии ионных, цвиттер-ионных, неионных ПАВ и полимеров с различными функциональными группами (ПСС, ПЭИ, ПДДХ, ПВП, ПЭГ и др.). Размер частиц в растворе оценивали по динамическому светорассеянию методами DLS (Malvern Mastersize 2000, 633 нм) и NTA (NanoSight LM Malvern Panalytical, камера C11440-50B, 405 нм).

Изучено влияние природы и концентрации используемой кислоты, типа дифильной добавки на размер образующихся частиц серы в растворе. Установлено, что образующиеся частицы серы заряжены отрицательно, проверена возможность их связывания с ионами марганца(II) методом ЯМР-релаксации. Полученные результаты можно использовать для оптимизации условий синтеза квантовых точек серы, которые имеют перспективы применения в OLED-устройствах, биолюминесцентном имиджинге и фотодинамической терапии.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

УДК 546

ИЗУЧЕНИЕ И РАЗРАБОТКА СПОСОБОВ ПОЛУЧЕНИЯ СТРОИТЕЛЬНЫХ НЕОРГАНИЧЕСКИХ ПИГМЕНТОВ

Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М., Аvezов К.Г., Бахриддинов А.Х.

Узбекистан, Бухара, Бухарский государственный университет

Uzbekistan, Bukhara, Bukhara State University

Email: b.sh.ganiyev@buxdu.uz

Ключевые слова: бентонитовое сырье «Азкамар», ИК-спектроскопия, ЭПР-спектроскопия, порошковая дифрактометрия.

В целях более рационального использования местного минерального сырья и получения на его основе продуктов многоцелевого назначения нами проводятся исследования по разработке способов переработки бентонита Азкамарского месторождения Бухарской области.

Бентонит изначально был обработан азотной кислотой, а затем гидроксидом натрия, в результате чего был получен пигмент желтого цвета. На основе метода кислотно-щелочной обработки бентонита «Азкамар» разработаны способы получения 5 видов неорганических пигментов (отделочных порошков) (рис.1.). Исходное сырье и полученные пигменты исследовали методами ЭПР-, ИК-спектроскопии, TGA/DSC анализа и порошковые дифрактометрии.

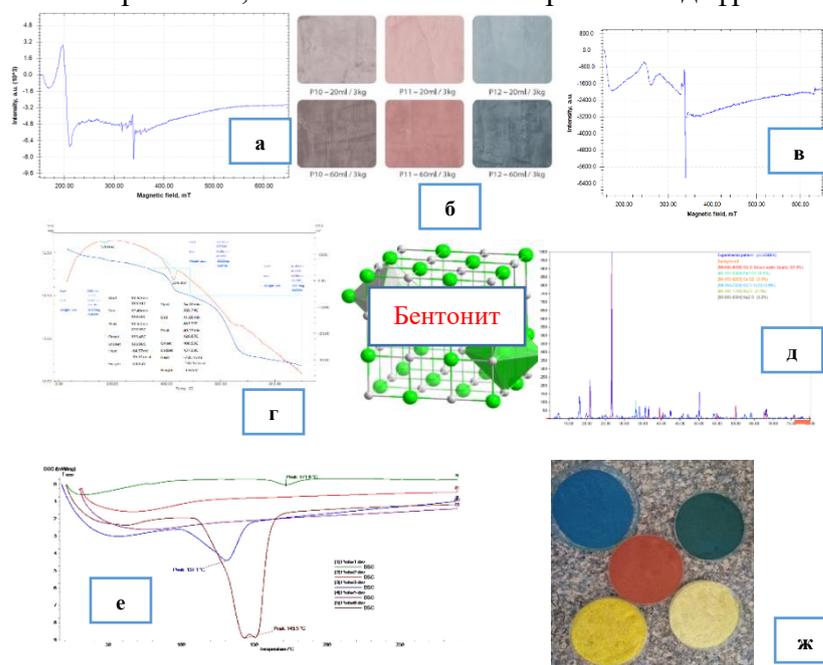


Рис. 1. ЭПР спектры исходного (а) и переработанного (в) бентонита, порошковые пигменты, используемые в строительстве (б), термограммы исходного бентонита (г, е), рентгенограмма пигмента синего цвета (д), пигменты, полученные из бентонита Азкамарского месторождения (ж)

УДК 66.094.258.097

ВЛИЯНИЕ МОДИФИЦИРОВАНИЯ ФТОРОМ НА СОСТОЯНИЕ АКТИВНОГО КОМПОНЕНТА И СВОЙСТВА АЛЮМОХРОМОВОГО КАТАЛИЗАТОРА В РЕАКЦИИ ДЕГИДРИРОВАНИЯ ИЗОБУТАНА В ИЗОБУТИЛЕН

Гизятуллов Р.Н., Егорова С.Р., Ламберов А.А., Ермолаев Р.В., Курбангалеева А.З.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: gramil.03@mail.ru

Ключевые слова: дегидрирование, алюмохромовые катализаторы, фторирование, изобутан, изобутилен

Процесс «FBD-4» предназначен для получения олефинов дегидрированием низших парафинов в кипящем слое микросферических алюмохромовых катализаторов. Алюмохромовые катализаторы - бифункциональные каталитические системы, участвующие в реакциях окислительно-восстановительного и кислотного катализа, активными центрами в которых являются ионы Cr(III). На характер распределения кислородных соединений Cr(III) и Cr(VI) в катализаторе оказывает значительное влияние модифицирование поверхности носителя. Фторирование поверхности увеличивает активность катализаторов изомеризации, крекинга, полимеризации, алкилирования и диспропорционирования.

В работе изучено влияние модифицирования алюмохромовых катализаторов фторидом аммония на состояние активных центров и каталитические показатели в процессе дегидрирования изобутана в изобутилен в кипящем слое. Объектами исследования являлись микросферические алюмохромовые катализаторы с размером гранул 40-150 мкм. Катализаторы готовили последовательной пропиткой носителя бемитной структуры водным раствором модификатора, хромовой кислоты и карбоната калия с последующей сушкой в вакууме и термоактивацией в муфельной печи. Содержание хрома и калия в образцах составляло 8,5 и 0,9 % масс соответственно. Удельная площадь поверхности катализаторов - 41 м²/г. С увеличением NH₄F в составе катализаторов до 0,9 % масс. активность катализатора уменьшается с 50,9 до 49,8 %. Селективность по изобутилену при добавлении NH₄F до 0,6 % масс возрастает с 88,4 до 89,4 % вследствие увеличения доли растворимых форм хрома Cr(VI) и полимеризации части монохроматов в ди-три- и полихроматы.

УДК 546.03

**СИНТЕЗ, СТРУКТУРА, ОПТИЧЕСКИЕ И ТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА
КОМПЛЕКСОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ С
2-МЕТИЛДИПИРИДО-[3,2-f:2',3'-h]-ХИНОКСАЛИНОМ**

Жернаков М.А., Мирзаянов И.И., Бухаров М.С., Гарифзянов А.Р., Штырлин В.Г.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: mrlambo52@gmail.com

Ключевые слова: лантаниды(III), люминесценция, синтез, структура, термическая стабильность.

Создание устойчивых лантанидных (Ln^{3+}) комплексов актуально во многих областях исследования – люминесценции, магнетизме, термометрии, фотовольтаике, медицине и др. Помимо люминесцентных термометров стабильные твёрдые комплексы с высоким квантовым выходом необходимы для использования в качестве стандарта для определения квантового выхода фотолюминесценции, твердотельного освещения, мономолекулярных магнетиков и лазерных систем [1]. Нами в работе [2] было показано, что при введении подходящего органического лиганда с сопряженной ароматической системой ("антенны") можно успешно получить комплексы, устойчивые при атмосферных условиях и начинающие разрушаться только при значительных температурах. В этом отношении 2-метилдипиридо[3,2-f:2',3'-h]-хиноксалин (MeDPQ, Рис. 1), получающийся в простом синтезе, показал себя хорошим фотосенсибилизатором эмиссии для ионов Ln^{3+} , излучающих как в видимой, так и в ИК областях спектра.

В настоящей работе были синтезированы и выделены в фазово-чистом состоянии с высокими выходами ($\geq 89\%$) комплексы общего состава $[\text{LnL}_2\text{Cl}_3]$, где $\text{Ln}^{3+} = \text{Sm}, \text{Eu}, \text{Gd}, \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Y}$ и Yb , $\text{L} = \text{MeDPQ}$. Полученные соединения охарактеризованы с помощью совокупности физико-химических методов, позволивших детально описать их свойства. Серия соединений Ln-MeDPQ отличается исключительной термической стабильностью и устойчивостью к влаге воздуха, что нетипично для хлоридсодержащих координационных соединений лантанидов с органическими N-донорными лигандами.

Список литературы

1. Sedykh A.E., Becker M., Seuffert M.T., Heuler D., Maxeiner M., Kurth D.G., Housecroft C.E., Constable E.C., Müller-Buschbaum K. // ChemPhotoChem. 2022. e202200244 (9 p.).
2. Zhernakov M.A., Sedykh A.E., Becker J., Maxeiner M., Müller-Buschbaum K., Shtyrlin V.G. // Z. Anorg. Allg. Chem. 2022. V. 648. e202200230 (8 p.).

УДК 546.05+546.72+691.175.5/.8

СИНТЕЗ ГИБРИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ МАГНЕТИТА, МОДИФИЦИРОВАННЫХ СВЕРХРАЗВЕТВЛЕННЫМ ПОЛИЭФИРОПОЛИОЛОМ

Ибатуллина М.Р., Амакуе Д., Пушкарева И.С., Кутырева М.П.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: marina_ibatullina@mail.ru

Ключевые слова: наночастицы магнетита, сверхразветвленный полимер, гибридные материалы.

Наночастицы магнетита находят широкое практическое применение в катализе и в биомедицинских приложениях, таких как контрастные агенты для МРТ, системы адресной доставки лекарств, препараты для гипертермии. Однако, наночастицы магнетита обладают гепатотоксичностью. Решением этой проблемы может являться получение наночастиц магнетита, синтезированных по литературной методике [1], с последующей модификацией их поверхности сверхразветвленным полиолом второй генерации G₂-ОН согласно схеме (рис. 1).

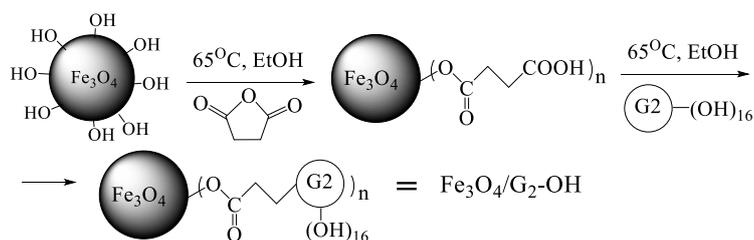


Рис. 1. Схема синтеза гибридных наночастиц Fe₃O₄/G₂-ОН

Получен гибридный материал Fe₃O₄/G₂-ОН, обладающий магнитной активностью, который охарактеризован методами ИК-спектроскопии и термогравиметрии. По данным термогравиметрии установлено, что массовое соотношение Fe₃O₄/G₂-ОН в гибридных наночастицах составляет 4:1. Декорирование поверхности магнетита функционально активными сверхразветвленными полимерами позволит использовать гибридные частицы Fe₃O₄/G₂-ОН для создания материалов с адаптивными свойствами.

Список литературы

1. Gupta A. Nanocarrier Composed of Magnetite Core Coated with Three Polymeric Shells Mediates LCS-1 Delivery for Synthetic Lethal Therapy of BLM-Defective Colorectal Cancer Cells / A. Gupta, A. Ahmad, H. Singh, S. Kaur, M.N. K, M.M. Ansari, G. Jayamurugan, R. Khan // *Biomacromolecules*. – 2018. – №19(3). – P. 803-815. doi: 10.1021/acs.biomac.7b01607.

УДК 541.29

СИНТЕЗ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МОНОДЕНТАНТНЫХ ФЕНИЛСОДЕРЖАЩИХ КАРБОКСИЛАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ Cu(II)

Мосалёв П.О., Абдуллина Д.Р., Гизатов Р.Р.

Россия, Уфа, Уфимский университет науки и технологий

Russia, Ufa, Ufa University of Science and Technology

E-mail: pavelmosalev@gmail.com

Ключевые слова: карбоксилатные комплексы, синтез комплексов Cu(II), основной карбонат Cu(II), монодентантная координация лиганда.

Основным методом синтеза карбоксилатных комплексов Cu(II) чаще всего является обменная реакция с натриевой солью карбоксилатного лиганда [1].

В данной работе для синтеза моноядерных карбоксилатных комплексов на основе N-бензоил-DL-фенилаланина (**L**₁) и N-ацетил-DL-фенилаланина (**L**₂) в качестве реагента применяли (CuOH)₂CO₃. Представленный метод позволяет исключить стадию депротонирования исходного лиганда.

Установлено, что взаимодействие основного карбоната Cu(II) с **L**₁ и **L**₂ в стандартных условиях в водно-ацетонитрильном растворе (1:1) в течение 1 часа приводит преимущественно к образованию комплексов **1-2** с монодентантной координацией (рис. 1.)

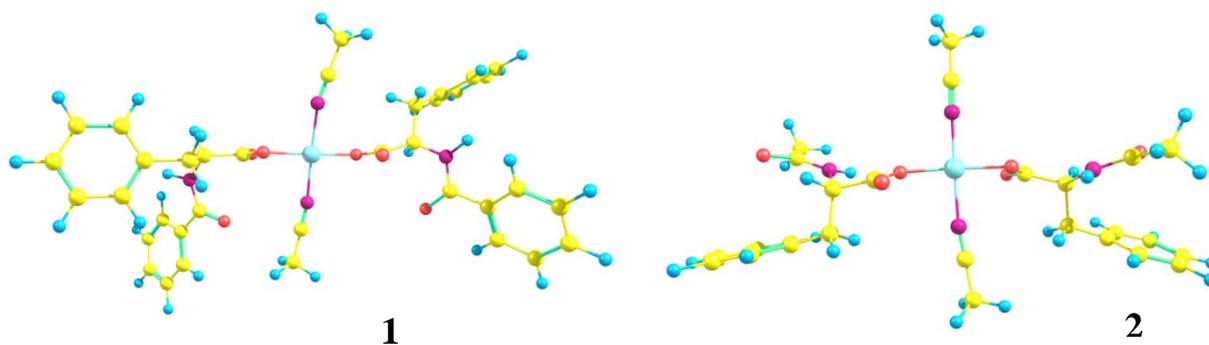


Рис. 1. Квантово-химическое моделирование **1-2** (метод B3LYP, 6- 31+G(d))

Список литературы

1. Джардималиева Г.И., Помогайло А.Д. Макромолекулярные карбоксилаты металлов // Успехи химии. 2008. Т. 77. № 3. с. 270-315.

УДК 546.562+546.712

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ Cu(II) И Mn(II) С 2-АМИНОПРОПАН-1,2,3-ТРИКАРБОНОВОЙ КИСЛОТОЙ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ

Мустафина А.О., Амиров Р.Р., Зиятдинова А.Б., Заиров Р.Р., Низовцев А.В., Бухаров М.С., Губайдуллин А.Т.

Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН

Russia, Kazan, A.E. Arbuzov IOFC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences

Email: annette_zb@mail.ru

Ключевые слова: 2-аминопропан-1,2,3-трикарбонвая кислота, аминокислоты, металлокомплексы.

Появление новых вирусов и их постоянные мутации вызывают необходимость разработки новых средств защиты. Перспективными противовирусными препаратами являются назальные спреи на основе ионов металлов, которые прочно связывают аминокислотные остатки в вирусной оболочке, препятствуя дальнейшему распространению. Оценка прочности связывания ионов металлов с различными функциональными группами аминокислот позволяет моделировать действие подобных назальных спреев и прогнозировать эффективность их действия для конкретных аминокислотных остатков. Так, в [1] предложен препарат на основе меди(II) в качестве дополнительной защиты против коронавирусной инфекции SARS-Cov-2.

В данной работе впервые исследовано комплексообразование ионов Cu(II) и Mn(II) с 2-аминопропан-1,2,3-трикарбонвой кислотой на фоне 150 мМ NaCl, имитирующем физиологическую среду организмов. Для оценки роли положения заместителей при связывании с ионами металлов в аналогичных условиях проведены эксперименты с аспарагиновой, лимонной и имино- и нитрилотриуксусной кислотами. По данным методов рН-метрического титрования, спектрофотометрии, ЯМР-релаксации определены равновесные константы комплексообразования, спектральные и магнитно-релаксационные параметры металлокомплексов в водных растворах. Бис-комплекс меди(II) были выделен в виде кристаллов и охарактеризован методом РСА.

Работа выполнена за счет средств гранта РФФ 22-13-00010.

Список литературы

1. Deloncle R. Copper acetate aerosols: A possible tool complementary to vaccination in fight against SARS – CoV – 2 and variants replication / R. Deloncle, O. Gulliard, A. Pineau, G. Lesage // Medical Hypotheses. – 2022. - V.160. – (110775, DOI:10.1016/j.mehy.2022.110775).

УДК 544.03+66.096.4

КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ЖЕЛЕЗА(III) С РЯДОМ ОКСИ-БЕНЗОЙНЫХ КИСЛОТ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ПОЛИЭТИЛЕНИМИНА

Солодов А.Н., Нежелская Д.А., Модина В.А.

Россия Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: sanya.solodiv@live.com

Ключевые слова: комплексообразование, полиэтиленимин, оксибензойная.

Особый интерес среди пленочных слоистых структур с уникальными магнитными и оптическими свойствами, которые могут быть использованы и в качестве селективных электродов на органические объекты, и в качестве катализаторов и оптических устройств, представляют металлоорганические пленки на основе комплексов Fe(III) с производными пирокатехина и салициловой кислоты, стабильные при pH 4-8. Существование подобных структур отмечено и в живом мире: мидии способны «прирастать» к различным объектам благодаря полидофаминовому слою, адгезия которого определяется образованием комплексов железа(III).

В качестве полимерных матриц для пленкообразования можно выбрать водорастворимые полимеры, способные связывать ионы металлов или их комплексы, например, полиэтиленимин (PEI) с катионной функцией выступающий в роли хелатного агента для связывания анионных комплексов.

Методом электронной спектроскопии определены состав, константы равновесия образования и спектральные параметры комплексов железа(III) с рядом ароматических кислот (салициловой кислотой (SA); 2,4-, 3,4- и 2,6-диоксибензойными кислотами (ДНВ) в воде и водном растворе PEI. Добавки PEI стимулируют образование анионных *трис*-комплексов, образуемых железом(III) с SA, 2,4-ДНВ, 3,4-ДНВ и 2,6-ДНВ в более кислой среде по сравнению с водой. При этом комплексы $[FeHL]^+$ для всех трех лигандов непосредственно превращаются в *трис*-комплексы. В щелочной среде наблюдаемые в растворах полимера изменения спектров (падение интенсивности и батохромный сдвиг) объяснены замещением в составе *трис*-комплексов одного аниона лиганда хелатным фрагментом PEI (NN) с образованием разнолигандного комплекса $[Fe(HL)_2(NN)]$ вследствие потери катионного характера полиэтиленимина. Максимальный эффект стабилизации *трис*-комплексов наблюдался для PEI с наибольшей молекулярной массой.

УДК 54.057+620.3

СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА МЕТОДОМ ТЕРМОЛИЗА: ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ОЛЕИНОВОЙ КИСЛОТЫ

Платонова А.А., Головизнин А.А., Хаметшина Э.Ф., Солодов А.Н.

Россия Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: sanya.solodiv@live.com

Ключевые слова: наночастицы, синтез, метод термолиза, олеат Fe(III).

В течение последних десятилетий синтез нанокристаллов с контролируемыми размерами интенсивно развивался не только из-за их фундаментального научного интереса, но и из-за широких перспектив применения однородных по размеру нанокристаллов поскольку их свойства напрямую зависят от их размеров.

Значительные успехи в крупномасштабном синтезе коллоидных нанокристаллов одинакового размера связано с развитием метода термического разложения олеатных комплексов, однако понимание механизма образования нанокристаллов методом термического разложения все еще очень мало изучено.

Образование наночастиц оксида железа, полученных при термическом разложении олеатных комплексов железа(III), было изучено методом ЯМР-релаксации, позволяющим отслеживать средний диаметр наночастиц. Анализ зависимостей отношения времен релаксации от времени нагревания реакционной смеси показал, что в зависимости от присутствия в растворе олеиновой кислоты процессы зародышеобразования и роста наночастиц могут протекать по двум направлениям: непрерывно без разделения стадии зародышеобразования или дискретно с разделением зародышеобразования и рост наночастиц.

В случае избытка олеиновой кислоты процесс зародышеобразования следует известной модели LaMer, характеризующейся взрывным зародышеобразованием и разделением зародышеобразования и роста нанокристалла при непрерывной подаче мономера, а в ее отсутствие - зарождение и рост наночастиц не разделены и протекают непрерывно, то есть олеиновая кислота действует как «запал» для «взрывного зародышеобразования». Этот новый подход показывает, что метод «горячего впрыска» можно осуществлять не только механически (путем введения прекурсора в реакционную систему), но и химически, с помощью реагента, который изначально находится в системе.

УДК 66.096.4

КОМПЛЕКСОБРАЗОВАНИЕ КОБАЛЬТА(II) С РОДАНИД-ИОНАМИ В УЛЬТРАМИКРОГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕДАХ

Рецепова А.Ф., Рахматуллина К.Ф., Журавлева Ю.И.

Россия Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: yulialab6@mail.ru

Ключевые слова: неионные ПАВ, Triton X-100, кобальт(II), роданид-ионы.

Известно, что ионы кобальта (II), выполняют в живых организмов очень важную физиологическую роль, находясь во многих биологических важных макромолекул, которые функционируют в составе высокоорганизованных ультрамикроретерогенных средах.

На основании данных спектрофотометрии в модельных ультрамикроретерогенных средах на основе неионных ПАВ (Triton X-100, Triton X-114, Triton X-405, Tween 20, Tween 40, Tween 60 и др.) подтверждено образование комплексных соединений кобальта(II) с роданид-ионами разного состава: с октаэдрической геометрией $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_5\text{NCS}]^+$, $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})_4(\text{NCS})_2]$ и тетраэдрической геометрией $[\text{Co}(\text{H}_2\text{O})(\text{NCS})_3]^-$ и $[\text{Co}(\text{NCS})_4]^{2-}$. По наличию в спектрах поглощения максимума при длине волны 530 нм подтверждено, что в водных растворах даже при избытке лиганда присутствуют комплексы с октаэдрической координацией.

Установлено, что образование комплекса $[\text{Co}(\text{NCS})_4]^{2-}$ (длина волны максимума поглощения 620 нм) стимулируется в растворах неионных ПАВ, что объясняется ассоциацией его с катионами при переносе из воды в состав неионных мицелл. Нахождение противоионов (ионов калия, аммония и др.) в полярной области мицелл обеспечивается их краун-эфироподобной координацией с оксиэтильными цепями неионных ПАВ.

Эффективность неионных ПАВ в образовании тетраэдрического тиоцианатного комплекса кобальта возрастает с удлинением оксиэтильной цепи: протяженность оксиэтильной цепи для ряда оксиэтилированных изооктифенолов является фактором стабилизации комплекса $[\text{Co}(\text{NCS})_4]^{2-}$ в составе неионных мицелл.

УДК 546.286+ 546.96

СИНТЕЗ И ЦИТОТОКСИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ С НИТРОЗИЛЬНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ РУТЕНИЯ

Роженцова Д.К., Бочкова О.Д.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: darina.rozhentsova@yandex.ru

Ключевые слова: наночастицы диоксида кремния, нитрозильные комплексы рутения, цитотоксичность, оксид азота, фотохимия.

В настоящее время активно ведется поиск препаратов с противоопухолевой активностью. Наночастицы диоксида кремния выступают в роли стабильной и нетоксичной платформы для различных органических и неорганических соединений. Все большее внимание исследователей привлекают нитрозильные комплексы рутения (II), которые способны к фотоиндуцированному высвобождению оксида азота. Включение фотохимически активных нитрозильных комплексов Ru(II) в наночастицы диоксида кремния в литературе никак не задокументировано.

В данной работе предложен способ получения аминомодифицированных наночастиц диоксида кремния с включенными внутрь нитрозильными комплексами рутения(II): $[\text{Ru}(\text{NO})(\text{NH}_3)_2\text{Py}_2(\text{NO}_3)](\text{NO}_3)_2$, $[\text{Ru}(\text{NO})(\text{NH}_3)_4\text{OH}]\text{Cl}_2$ и $[\text{Ru}(\text{NO})\text{Py}_4\text{OH}](\text{PF}_6)_2$. Показано, что фотоиндуцированное высвобождение оксида азота (NO) из комплексов подавляется при их включении в наночастицы диоксида кремния. Темновая цитотоксичность полученных наночастиц выше по сравнению с водными растворами комплексов. Наночастицы диоксида кремния выступают носителями нитрозильных комплексов Ru(II), доставляя комплексы внутрь клеток. Далее происходит высвобождение комплексов во внутриклеточное пространство, где они проявляют свои цитотоксические свойства.

Наночастицы диоксида кремния с включенными внутрь нитрозильными комплексами были исследованы рядом физико-химических методов: УФ-видимая электронная и ИК спектроскопия, просвечивающая электронная микроскопия, динамическое рассеяние света, атомно-эмиссионная спектроскопия.

УДК 546.4.7+546.56+547.49+547.447

КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА Ni(II) С АРОИЛГИДРАЗОНОМ ЭТИЛОВОГО ЭФИРА 2,4-ДИОКСОПЕНТАНОВОЙ КИСЛОТЫ

Севинчова Д.Н., Турсунов М.А., Умаров Б.Б.

Узбекистан, Бухара, Бухарский государственный медицинский институт

Uzbekistan, Bukhara, Bukhara State Medical Institute

Email: dsevinchova@mail.ru

В ряде работ было изучено строение продуктов конденсации этилового эфира 2,4-диоксопентановой кислоты с гидразидами *para*-замещенных ароматических кислот [1-3].

При изучении процесса комплексообразования ацетата Ni(II) с тридентатным лигандом H₂L, полученного на основе бензоилгидразона этилового эфира 2,4-диоксопентановой кислоты, нами было получено вещество с кристаллической структурой.

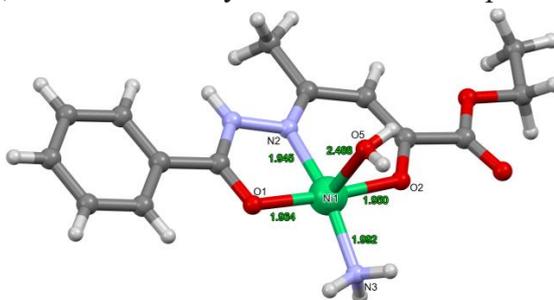


Рис. 1. Молекулярная структура NiL·NH₃·H₂O на основе бензоилгидразона этилового эфира 2,4-диоксопентановой кислоты

Кристаллы состава C₁₄H₁₈N₃NiO₄·H₂O моноклинные с параметрами элементарной ячейки: a=11.4350(9), b=5.2220(4), c =13.6658(12) Å, β=94.289(7)°, V=813,75(11) Å³, D_x=1.506 Mg/m³, Z=2, пр.гр. P2₁. Структура NiL·NH₃·H₂O зарегистрирована в Кембриджском банке структурных данных (CCDC № 2182732; ccdc.cam.ac.uk/structures).

Длина связей Ni–O(1) и Ni–O(2) кристалла почти одинаково 1,964(14), 1,950(14) Å а длина связей Ni–N(2) и Ni–N(3) тоже близко к друг друга 1,9545(14), 1,9922(16) Å. По данным PCA полученное комплексное соединение NiL·NH₃·N₂O имеет квадратно-пирамидальную структуру (рис.1).

Список литературы

1. Tursunov M. A., Avezov K. G., Umarov B. B. and Parpiev N. A. ¹H NMR Spectra and Crystal Structure of the Nickel(II) Complex with Ethyl 5,5-Dimethyl-2,4-Dioxohexanoate Aroylhydrazones // Russian J. of Coord. Chem.-2017.- Vol. 43.- No 4. P. 93-96.
2. Турсунов М.А. Комплексы некоторых 3d-металлов на основе производных кетоальдегидов и кетоэфиров, их строение и свойства. Дис... PhD по специальности 02.00. 01.– Неорганическая химия. Бухара.-БухГУ.-2019.-120 с.
3. Умаров Б.Б. Комплексные соединения некоторых переходных металлов с бис-5-оксипиразолинами. Дис. ... докт. хим. наук.- Ташкент.- ИУ АН РУз.- 1996.- 351 с.

УДК 547.788

СТРОЕНИЕ АЦИЛГИДРАЗОНОВ МОНОАЦЕТИЛФЕРРОЦЕНА

Сулаймонова З.А., Умаров Б.Б., Атоева М.О., Мирзаева Г.А., Наврузова М.Б.

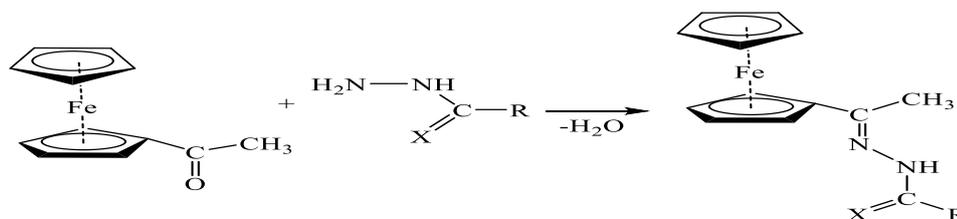
Узбекистан, Бухара, Бухарский государственный университет

Uzbekistan, Bukhara, Bukhara State University

E-mail: sulaymonovaza@mail.ru

Ключевые слова: моноацетилферроцен, конденсация, лиганд, гидразон, комплексобразование

Для расширения линии бидентатных хелатирующих лигандных систем, содержащих ферроценовые фрагменты, нами конденсацией ацетилферроцена синтезированы гидразоны уксусной, бензойной, фенилуксусной кислот и тиосемикарбазидом новые лиганды HL^1 - HL^4 . Для гидразонов монокарбонильных производных ферроцена на теоретическом уровне вполне вероятно существование в виде 8 изомерных форм с различным местоположением двух заместителей кетонной части сравнительно $C=N$ связи и ацилгидразонной части относительно связи $N-N$, например, связи $N-N$ и амидные считаются отчасти двойными. Такое поведение молекулы лигандов обуславливается системой π - π сопряжения, включающей $C=N$ и $C=O$ связи, неподеленную пару электронов атома N и планарным местоположением заместителей ацилгидразонной части. Нами изучены реакции конденсации и таутомерные поведения продуктов реакции гидразидов монокарбоновых кислот с моноацетилферроценом (МАФ) [1]:



$X=O$: $R=CH_3$ (HL^1), C_6H_5 (HL^2), $C_6H_5-CH_2$ (HL^3). $X=S$, $R=NH_2$ (HL^4).

Нами определено, что гидразоны монокарбонильных соединений преимущественно существуют в виде гидразонной формы и в процессе комплексобразования вступают в реакцию в енгидразин- α -оксазинной форме. В ИК спектре всех лигандов зарегистрированы полосы поглощения, отнесенные к ν_s и ν_{as} колебаниям $N-N$, $N-H$, $C=N$ и $C-N$, связей около 1025-1035, 3215-3225, 1630-1645 и 1285-1290 cm^{-1} .

Список литературы

1. Умаров Б.Б., Сулаймонова З.А., Тиллаева Д.М. Синтез лигандов на основе производных ферроцена с гидразидами моно- и дикарбоновых кислот // Universum: Химия и биология. Россия, –2020. № 3(69). –С. 19-22.

УДК 541.49+546.04+546.06

ТЕРМОДИНАМИКА ОБРАЗОВАНИЯ, КИНЕТИКА РЕАКЦИЙ ЛИГАНДНОГО ОБМЕНА И СТРУКТУРА КОМПЛЕКСОВ В РАСТВОРАХ ОКСОВАНАДИЯ(IV) С БИОЛИГАНДАМИ

Уразаева К.В., Серов Н.Ю., Гилязетдинов Э.М., Бухаров М.С., Штырлин В.Г.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: urazaevakira19@gmail.com

Ключевые слова: координационная химия, оксованадий(IV), аминокислоты, ароматические диимины.

Ванадий играет значительную роль в живых организмах. Комплексные соединения оксованадия(IV) находят широкое применение в фармакологии, например, в виде антидиабетических препаратов [1], а также в виде потенциальных агентов для лечения вирусных заболеваний, в том числе коронавирусной инфекции COVID-19 [2].

В настоящей работе методами рН-потенциометрического и спектрофотометрического титрования изучены равновесия в растворах комплексов оксованадия(IV) с биолигандами (аминокислоты, ароматические диимины) при 25°C на фоне 1 М KNO₃, а также кинетика реакций лигандного обмена биолигандов. Результаты титрований обработаны по программе STALABS [3].

В дополнение к проведенным экспериментам выполнены квантово-химические расчеты, подтверждающие структуры комплексов, участвующих в равновесиях в растворах исследуемых систем. Структуры реагентов, интермедиатов и конечных продуктов реакций были оптимизированы по программе ORCA [4] методом DFT на уровне B3LYP/def2-TZVPP с учетом эффектов среды в модели растворителя C-PCM.

Список литературы

1. Carpio E.D., Hernandez L., Ciagherotti C., Coa V.V., Jimenez L., Lubes V., Lubes G. // *Coord. Chem. Rev.* 2018. V. 372. P. 117-140.
2. Semiz S. // *J. Trace Elem. Med. Biol.* 2022. V. 69. 126887 (P. 1-8).
3. Krutikov A.A., Shtyrlin V.G., Spiridonov A.O., Serov N.Yu., Il'yin A.N., Gilyazetdinov E.M., Bukharov M.S. // *Journal of Physics: Conference Series.* 2012. V. 394. 012031 (P. 1-6).
4. Neese F. // *Wiley Interdiscip. Rev.: Comput. Mol. Sci.* 2012.V. 2. P. 73-78.

УДК 54.057

ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ДИМЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЗОЛОТА(I) С 1,5-ДИАЗА-3,7-ДИФОСФАЦИКЛООКТАНАМИ

Фаезова А.И.², Даянова И.Р.¹, Стрельник И.Д.^{1,2}, Мусина Э.И.¹, Карасик А.А.¹

¹ Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН

Russia, Kazan, A.E. Arbuzov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences

²Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: adelina_faezova@mail.ru

Ключевые слова: комплексы золота (I), люминесценция, бисфосфины

Комплексы Au (I) с органическими лигандами привлекают значительное внимание в качестве основы для создания люминесцентных материалов, поскольку они демонстрируют эффективное излучение в кристаллическом состоянии. В данной работе были получены заряженные и нейтральные биядерные Р,Р –мостиковые комплексы **4-6** с Р-этилпиридилзамещенными 1,5-диаза-3,7-дифосфациклооктанами **1,2**.

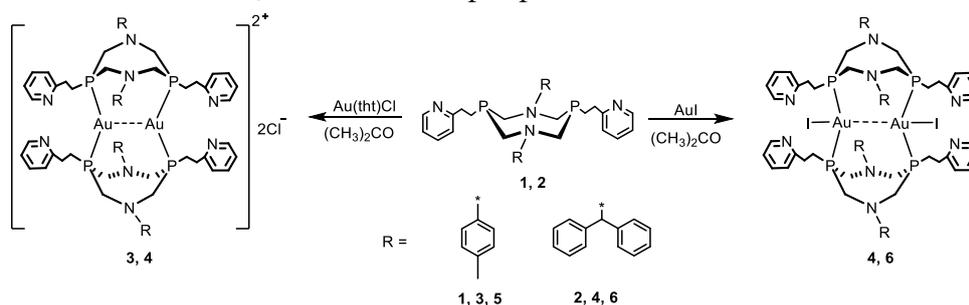


Схема 1. Синтез комплексов **3-6**.

Полученные комплексы проявляют фосфоресценцию в твердом состоянии при комнатной температуре (λ_{em} 548 (**3**), 505 (**4**), 535 (**5**), 525 (**6**)).

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 22-13-00147

Список литературы

1. Dayanova, I.R.; Auropilic Interactions of Dimeric Bisphosphine Gold(I) Complexes Pre-Organized by the Structure of the 1,5-Diaza-3,7-Diphosphacyclooctanes / Dayanova, I.R.; Faezova, A.I.; Strelnik, I.D., et al // *Inorganics*, **2022**, 10, 224.

УДК 665.772

СИНТЕЗ БЕСФТОРОВЫХ ЛЫЖНЫХ МАЗЕЙ СКОЛЬЖЕНИЙ

Хисматуллин А. А.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: ackapuck@gmail.com

Ключевые слова: эксперимент, парафин, лыжная мазь скольжения

Использование фтористых лыжных смазок сопровождается выбросом вредных химических веществ в окружающую среду, которые могут оказывать неблагоприятное воздействие на воду и качество почвы. Цель работы создать конкурентоспособную формулу лыжной мази без фтора. Для выполнения работы использовались последние научные открытия в данной области, патенты крупнейших зарубежных и русских компаний. Были привлечены профессиональные спортсмены для объективной оценки качества мази.

В ходе работы были проанализированы финские смазки компании “Vauhti” и их состав. Определив формулу, были получены парафины на основе полиэтиленового воска и различных добавок. Мази были исследованы различными способами (ДСК, гидрофобность, твердость, реологические исследования) и сопоставлены с фтористыми добавками в лабораторных условиях. Образцы были отправлены профессиональным спортсменам для испытаний на лыжне в Ханты-Мансийскую область. Некоторые из них показали результат наравне с фтористыми смазками.

В результате проделанной работы было получено 30 парафинов. Некоторые образцы показали результаты, приближенные к лучшим фтористым смазкам.

Список литературы

1. Felix Breitschädel, Nora Haaland, Nuria Espallargas. A Tribological Study of UHMWPE Ski Base Treated with Nano Ski Wax and its Effects and Benefits on Performance / Procedia Engineering, Volume 72, 2014, Pages 267-272, ISSN 1877-7058
2. Viswanathan S. Saji. Wax-based artificial superhydrophobic surfaces and coatings / Colloids and Surfaces A: Physicochemical and Engineering Aspects // Volume 602, 2020, 125132, ISSN 0927-7757

УДК 547

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ СОЛЕЙ МОЧЕВИНЫ С КИСЛОТАМИ ЭЛЕМЕНТОВ V ГРУППЫ

Холикова Г.К., Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М., Акрамов А.Я., Фатуллаев Н.Н.,
Турдиева Г.А., Кахрамонова М.З., Нарзуллаева М.Р.

Узбекистан, Бухара, Бухарский государственный университет

Uzbekistan, Bukhara, Bukhara State University

Email: b.sh.ganiyev@buxdu.uz

Ключевые слова: мочевины, электронные спектры поглощения, порошковая дифрактометрия, антипирен, антикоррозионный состав.

С 2022 года в Бухарском государственном университете начаты исследования по синтезу и изучению состава, свойства молекулярных солей мочевины с азотной, фосфорными и мета-ванадиевой кислотами.

Целью исследований являлись получение соединений, повышающих усвояемость питательных компонентов избыточно накопленных минеральных удобрений в почве, растворение аккумулированных соединений ионов токсичных тяжелых металлов в почве, изучение антикоррозионных составов для металлов и антипиреновых составов для огнезащиты природных и синтетических полимерных материалов. Состав и строение полученных образцов фосфатов мочевины изучены методами ИК-спектроскопии, монокристаллической и порошковой дифрактометрии, а также электронными спектрами поглощений (рис.1). Предварительно, с применением растворов нитратных и орто-фосфатных солей достигнуто повышение усвояемости P_2O_5 (8-11%) растениями в различных сильно соленых почвах Бухарской области (в контрольных водных вытяжках 0,7-1,01%). В настоящее время эти исследования продолжаются.

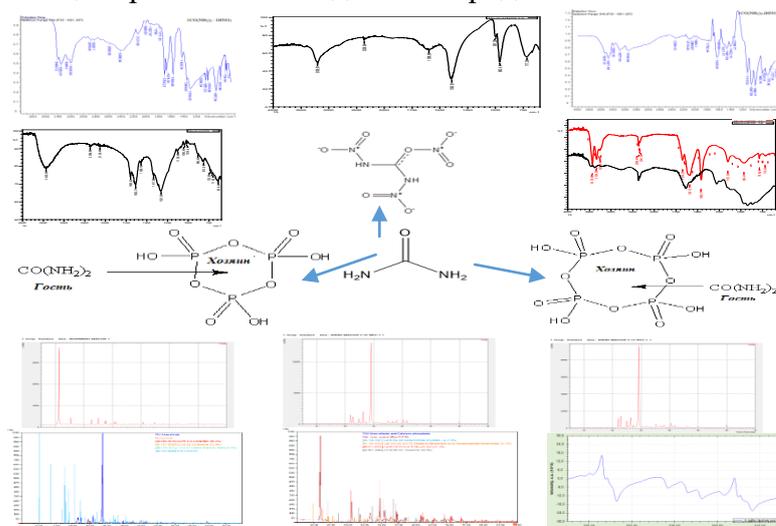


Рис. 1. Строение и спектры солей мочевины

УДК 543.429.23

ЯМР-РЕЛАКСАЦИОННОЕ ЗОНДИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ПОЛИПЛЕКСОВ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ПОЛИЭТИЛЕНИМИНА

Чернуха Е.А., Савенков А.Ю., Овчинникова Е.П., Власенко В.В., Журавлева Ю.И.

Россия Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: yulialab6@mail.ru

Ключевые слова: ЯМР-релаксационное зондирование, полиплексы, ПЭИ.

Одним из перспективных направлений современной координационной химии является исследование роли парамагнитных ионов d-металлов в образовании устойчивых полиплексов в водных и в высокоорганизованных водных средах, полиплексы на основе полиэлектролитов нашли широкое применение в медицине и в качестве магнитных меток.

Полиплексы представляют собой комплексы ионов металлов, или ДНК с полиэлектролитами, обладающими катионной или анионной функцией, образующихся за счет электростатического взаимодействия. В качестве катионного полимера при образовании полиплексов могут выступать полиэтиленимин, полилизин, хитозан, дендримеры.

Образование полиплексов возможно контролировать методом ЯМР-зондирования: значительный рост релаксационной эффективности в растворах тиронатных комплексов гадолиния(III) в широкой области pH объяснен связыванием их с катионными центрами в цепи полиэтиленимина (ПЭИ), последующее добавление анионов полистиролсульфоната (ПСС) не приводит к существенному вытеснению ПЭИ-связанных металлокомплексов в воду, что указывает на наличие целевых полиплексов в водных растворах.

Методом ЯМР-зондирования установлено образование полиплексов в системе Gd(III)-Tir-ПЭИ-ПСС на основе парамагнитных ионов гадолиния(III) и избытка тирона путем взаимодействия с анионным полимером полистиролсульфонатом натрия (ПСС) и катионным полимером полиэтиленимином (ПЭИ). Данные полиплексы образуются при соотношении компонентов 1:2.5:115:10 и устойчивы в широкой области pH 4-10.

В присутствии физиологической концентрации хлорида натрия (150 мМ) происходит частичное разрушение полиплекса в системе Gd(III)-Tir-ПЭИ-ПСС при pH > 8, что может быть обусловлено ослаблением связи между катионным и анионным полимерами.

СЕКЦИЯ 2

Аналитическая химия и химия окружающей среды

УДК 542.943-92+547.562

КИНЕТИКА ОКИСЛЕНИЯ 2,6-ДИМЕТИЛФЕНОЛА ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ПЕРОКСИДА ВОДОРОДА И ВОЛНОВОГО УДАРА

Абдюшева А.Р., Зимин Ю.С.

Россия, Уфа, Уфимский университет науки и технологий

Russia, Ufa, Ufa University of Science and Technology

E-mail: abduyshevaaa@gmail.com

Ключевые слова: 2,6-диметилфенол, пероксид водорода, волновой удар, окисление, кинетические закономерности.

Фенол и его замещенные относят к числу наиболее опасных загрязнителей природных водоемов. Для удаления фенолов из сточных вод применяют различные окислительные системы, среди которых особо следует отметить O_3-O_2 смесь [1, 2]. В последнее время интерес вызывают методы, представляющие собой комбинацию окислителя и физического фактора (например, совместное воздействие пероксида водорода и волнового удара). По этой причине целью данного исследования явилось изучение кинетики окисления 2,6-диметилфенола (2,6-ДМФ) под действием пероксида водорода и при совместном воздействии H_2O_2 и волнового удара.

Реакцию 2,6-ДМФ с H_2O_2 в водных растворах проводили в стеклянном термостатируемом реакторе. За кинетикой процесса следили по изменению концентрации замещенного фенола. Установлено, что окисление 2,6-ДМФ под действием H_2O_2 описывается следующим кинетическим уравнением:

$$-d[2,6\text{-ДМФ}]/dt = (k_0 + k [H_2O_2]) [2,6\text{-ДМФ}].$$

В интервале 313–363 К изучена температурная зависимость константы скорости k второго порядка и определены активационные параметры исследованной реакции.

Обнаружено, что комбинированное воздействие пероксида водорода и волнового удара приводит к существенному увеличению (на несколько порядков) скорости расходования 2,6-диметилфенола, открывая дополнительные перспективы для борьбы с фенольными соединениями.

Список литературы

1. Зимин, Ю.С. Влияние условий проведения процесса на кинетику и стехиометрию озонированного окисления фенолов / Ю.С. Зимин, В.Д. Комиссаров // Вестник Башкирского университета. – 2004. – № 4. – С. 31-33.
2. Комиссаров, В.Д. К вопросу о механизме озонлиза фенолов / В.Д. Комиссаров, Ю.С. Зимин, С.Л. Хурсан // Кинетика и катализ. – 2006. – Т. 47. – № 6. – С. 875-880.

УДК 543.552

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЛЕВОФЛОКСАЦИНА С ПОМОЩЬЮ СЕНСОРА НА ОСНОВЕ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОГО ФУЛЛЕРЕНА

Абрамов И.А., Гайнанова С.И.

Россия, Уфа, Уфимский университет науки и технологий

Russia, Ufa, Ufa University of Science and Technology

E-mail: papa.abramov@mail.ru

Ключевые слова: вольтамперометрический сенсор, функционализированный фуллерен, левофлоксацин.

Определение антибиотиков – актуальная задача современной аналитической химии. Однако, вследствие из чрезмерного потребления создается риск развития аллергических реакций и токсических эффектов в организме человека. Следовательно возникает потребность в развитии методов определения антибактериальных препаратов, среди которых особое место занимает вольтамперометрический анализ, не только отвечающий требованиям высокой чувствительности и селективности, но и обладающий высокой экспрессностью.

В нашем исследовании на основе стеклоуглеродного электрода разработан сенсор для вольтамперометрического определения левофлоксацина (Лев) с чувствительным слоем из фуллерена C₆₀, функционализированного S-2-хлоро-N-(1-фенилэтил)ацетамидом. Для усиления аналитического сигнала использована углеродсодержащая подложка из восстановленного оксида графена. Количественное определение Лев проводилось методом дифференциально-импульсной вольтамперометрии в диапазоне концентраций от $1.0 \cdot 10^{-6}$ до $5.0 \cdot 10^{-4}$ М. При построении калибровочного графика наблюдаются две линейные зависимости в диапазонах $1.0 \cdot 10^{-6}$ – $3.0 \cdot 10^{-5}$ и $3.0 \cdot 10^{-5}$ – $5.0 \cdot 10^{-4}$ М. Предел обнаружения и количественного определения составили $3.7 \cdot 10^{-8}$ М и $1.2 \cdot 10^{-7}$ М соответственно. Определение Лев в моче, плазме крови и таблетках осуществлялось методом введено-найденно, относительное стандартное отклонение составило 0.4-3.5%.

Таким образом, вольтамперометрический сенсор на основе оксида графена и функционализированного фуллерена способствует решению задач по разработке чувствительных методик анализа антибиотиков, как средств контроля за их надлежащим использованием, общественным здравоохранением, а также для разработки новых лекарственных соединений.

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

УДК 543.33

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МАТРИЧНЫХ КАТИОНОВ ПЛАСТОВЫХ ВОД НЕФТЯНЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ МЕТОДОМ ЭМИССИОННОЙ ФОТОМЕТРИИ ПЛАМЕНИ

Афзалетдинов Р.Д., Кучина О.М., Судаков В.А., Гарифзянов А.Р.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: boss.afzaletdinov@mail.ru

Ключевые слова: пластовые воды (ПВ), гидрохимический анализ, эмиссионная фотометрия пламени.

Важнейшие показатели ПВ – общая минерализация и содержание главных ионов – Ca^{2+} , Mg^{2+} , Na^+ , K^+ , Cl^- , SO_4^{2-} , HCO_3^- . В большинстве лабораторий Ca^{2+} , Mg^{2+} определяются комплексонометрическим титрованием, HCO_3^- – кислотно-основным, Cl^- – аргентометрическим, SO_4^{2-} – гравиметрически в виде BaSO_4 . Разностью между общей минерализацией и содержанием перечисленных выше ионов определяется суммарное содержание K^+ и Na^+ . Этот метод может быть успешно использован только при точном выполнении анализа остальных ионов; в этом случае результаты не дают точную информацию о содержании K^+ (в ПВ меньше, чем Na^+). Поэтому актуально улучшение методического обеспечения аналитических лабораторий нефтедобывающих предприятий – разработка доступных, эффективных методик отдельного определения K^+ и Na^+ в ПВ.

Эмиссионной фотометрией пламени определяют щелочные металлы. Однако применение существующих методик, используемых при анализе ПВ приводит к существенным ошибкам из-за особенности химического состава ПВ – сильный матричный эффект NaCl при определении K^+ , наличие в ПВ значительных количеств соединений, используемых для улучшения нефтеотдачи (эмульгаторы, деэмульгаторы, ингибиторы).

Разработанные нами методики учитывают эти особенности. Использование молярной шкалы концентраций при разбавлении исследуемых образцов ПВ и дифференциального регистрирования аналитического сигнала позволило снизить погрешность $\delta\%$ до 1 для Na^+ и до 5 для K^+ .

Список литературы

1. Алекин О.А. Руководство по химическому анализу вод суши / Алекин О.А., Семенов А.Д., Скопинцев Б.А. – Ленинград: Гидрометеиздат, 1973. – 270 с.

УДК 543.866

ИММУНОХИМИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЦИПРОФЛОКСАЦИНА В МЕДИКО-БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТАХ

Багманова А.Х.¹, Рамазанова А.Н.¹, Брусницын Д.В.¹, Медянцева Э.П.¹, Зиганшин М.А.¹, Еремин С.А.², Донгур-Оол Д.А.¹, Баишева Д.В.¹, Каримова А.Л.¹, Ягодкина Е.А.¹, Зотагина М.О.¹, Дворникова П.В.¹

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan federal university

²Россия, Москва, Московский государственный университет
Russia, Moscow, Moscow state university
E-mail: yasmin1103@mail.ru

Ключевые слова: поляризационный флуоресцентный иммуноанализ, силикатные наночастицы, трейсер, ципрофлоксацин.

Актуальной задачей в настоящее время является контроль содержания антибиотиков в медико-биологических объектах. Для повышения селективности определения антибиотиков используют иммунохимические методы анализа.

Для определения антибиотика фторхинолового ряда ципрофлоксацина разработаны амперометрические иммуносенсоры на основе планарных электродов, модифицированных кластерными комплексами рения и силикатными наночастицами на основе молибдена (выбраны в качестве аналитического сигнала) в сочетании с углеродными нанотрубками и поляризационный флуоресцентный иммуноанализ в моче человека.

Аналитические возможности разработанных иммуносенсоров при определении ципрофлоксацина показывают, что лучшие аналитические характеристики наблюдаются для электродов, модифицированных силикатными наночастицами на основе молибдена в сочетании с углеродными нанотрубками, область рабочих концентраций изменяется в диапазоне от 1×10^{-9} до 5×10^{-5} М, нижняя граница определяемых концентраций на уровне 7×10^{-10} М.

В случае использования поляризационного флуоресцентного иммуноанализа для определения ципрофлоксацина область рабочих концентраций изменяется в диапазоне от 1×10^{-10} до 1×10^{-5} М.

Разработаны методики количественного определения антибиотика ципрофлоксацина в моче человека с помощью иммунохимических методов анализа. Установлено, что содержание ципрофлоксацина в моче 5×10^{-8} М, относительное стандартное отклонение 0.060.

УДК 543.06

ОПРЕДЕЛЕНИЕ КАТИОННОГО СОСТАВА КОММЕРЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ ПИТЬЕВОЙ ВОДЫ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ ЭМИССИОННОЙ ФОТОМЕТРИИ ПЛАМЕНИ И МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ С ИНДУКТИВНО СВЯЗАННОЙ ПЛАЗМОЙ

Баширов И.Д., Афзалетдинов Р.Д., Гараева Г.Р., Нургалиев Д.К., Гарифзянов А.Р.

Химический институт им. А.М. Бутлерова КФУ, Казань

420008, Россия, г. Казань, ул. Кремлёвская, д.29/1.

E-mail: ilyas2016a3@gmail.com

Ключевые слова: вода питьевая, ИСП-МС, пламенная фотометрия.

В настоящее время перед человечеством остро встает вопрос о доступности питьевой воды, что обусловлено заметными климатическими изменениями и увеличением численности населения в развивающихся странах мира. Во многих регионах единственным источником получения качественной питьевой воды является бутилированная вода. В 2021 году объем мирового рынка бутилированной воды оценивался в \$240 млрд. Химический состав этой продукции жестко регламентирован по органолептическим и токсикологическим параметрам во всех странах мира. При этом их химический состав весьма разнообразен. В последние годы наблюдаются многочисленные попытки фальсификации этой продукции. При этом доказать преступления такого рода оказывается чрезвычайно сложно.

Одним из наиболее перспективных способов решения данной проблемы является использование современных методов анализа, позволяющих определить макро- и макрокомпонентный состав этих вод. Целью настоящей работы является изучение микроэлементного состава образцов бутилированной воды, реализуемой в городе Казани.

С использованием метода масс-спектрометрии с индуктивно связанной плазмой был проведен элементный анализ около 100 образцов питьевых вод. Проведено сопоставление полученных результатов с данными, приведёнными производителями. Установлено, что во всех образцах регламентируемые параметры не отличаются от заявленных производителями. Полученные результаты позволяют обоснованно подойти к подбору элементов-трассеров для выявления фальсификатов продукции данного типа. В качестве независимого метода при определении макрокомпонентов питьевых вод - ионов натрия и калия предложено использовать метод эмиссионной фотометрии пламени, который обеспечивает меньшую погрешность определения этих катионов.

УДК 543.55

ЭЛЕКТРОПОЛИМЕРИЗАЦИЯ АЗУРА С ИЗ ВОДНЫХ СРЕД И ГЛУБОКИХ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ

Бегишева Е.А.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: begischewa2000@gmail.com

Ключевые слова: вольтамперометрия, Азур С, ДНК-сенсор, валрубицин, глубокий эвтектический растворитель

Использование глубоких эвтектических растворителей для синтеза электрополимеризованных покрытий позволяет получать новые материалы, обладающие лучшими аналитическими и операционными характеристиками определения различных соединений, а также расширить область применения биосенсорных устройств.

В работе рассмотрены свойства поли(Азур С), синтезированного из 0.1 М раствора мономера в глубоком эвтектическом растворителе релине (смесь хлорида холина и мочевины в соотношении 1:2). Для покрытий поли(Азур С), синтезированных из релина или 0.1 М фосфатного буферного раствора с 0.1 М NaNO_3 , pH=7.0 была проведена оценка стабильности характеристик и электрохимических параметров. Показано, что переход от водных сред к средам глубоких эвтектических растворителей значительно влиял на изучаемые параметры синтезируемых электрополимеризованных покрытий. На основе покрытия поли(Азур С) из релина был разработан ДНК-сенсор для определения противоракового препарата антрациклинового ряда валрубицина. Полимерное покрытие инкубировали 20 минут в растворе 1 мг/мл ДНК тимуса телят, затем в растворе валрубицина. В данном случае использовали ратиометрический подход, поскольку регистрировали два сигнала: на катодной ветви пик поли(Азур С) падал за счет взаимодействия ДНК с валрубицином, а сигнал валрубицина увеличивался с ростом концентрации аналита. В режиме циклической вольтамперометрии сенсор был чувствителен к валрубицину в диапазоне от 10 мкМ до 1 мМ, с пределом обнаружения 10 мкМ. Переход к квадратно-волновой вольтамперометрии позволил понизить предел обнаружения валрубицина до 3.16 мкМ.

УДК 543.94

АМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ БИОСЕНСОРЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АФЛАТОКСИНА М1

Лопатко Н.Ю., Ван Чжаоминь, Куксенок А.А., Бейлинсон Р.М.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: nlopatko82@gmail.com

Ключевые слова: афлатоксин М1, амперометрические биосенсоры, углеродные наноматериалы, щелочная фосфатаза.

Афлатоксин М1 представляет собой соединение, продуцируемых тремя видами аспергилл: *Aspergillus flavus*, *Aspergillus parasiticus* и *Aspergillus nomius*, которые загрязняют растения и растительные продукты. Афлатоксин М1 может быть обнаружен в молоке или молочных продуктах, полученных от домашнего скота, который проглотил зараженный корм. М1 обладает гепатотоксическим и канцерогенным действием и относительно стабилен при пастеризации, хранении и переработке молока. Поэтому разработка методов определения данного вещества является актуальной задачей.

Были разработаны амперометрические биосенсоры на основе щелочной фосфатазы на печатных графитовых электродах, модифицированных восстановленным оксидом графена (ВОГ) и углеродными нанотрубками (УНТ), для определения афлатоксина М1.

При изучении действия афлатоксина М1 на фермент-субстратную систему щелочная фосфатаза-1-нафтил фосафт динатриевая соль, было установлено, что данное соединение оказывает ингибирующее действие (уменьшение аналитического сигнала) в концентрационном диапазоне 1×10^{-10} - 1×10^{-8} М с $c_H = 7 \times 10^{-11}$ М. Максимальный процент ингибирования составил 71%.

Для модифицированных углеродными наноматериалами биосенсоров сохранилась тенденция уменьшения величины аналитического сигнала при действии эффектора. Диапазон определяемых концентраций расширился: от 1×10^{-11} до 1×10^{-8} М в случае применения обоих модификаторов, c_H составил для ВОГ 8×10^{-12} М, а для УНТ 5×10^{-12} М. Максимальная степень (процент) ингибирования составляет 73% для ВОГ и 77% для УНТ в изученной области концентраций афлатоксина М1.

Разработанные методики для определения афлатоксина М1 апробированы в анализе образцов молока.

УДК 543.55+543.8

ЭЛЕКТРОД НА ОСНОВЕ ПОЛИ(ЭРИОХРОМ ЧЕРНОГО Т) ДЛЯ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ L-ТИРОЗИНА

Габдрафикова Г.Р., Зиятдинова Г.К.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: GRGabdrfikova@stud.kpfu.ru

Ключевые слова: вольтамперометрия, химически модифицированные электроды, электрополимеризация, азокрасители, наночастицы оксидов металлов, аминокислоты, L-тирозин, биологически активные добавки, контроль качества.

В настоящее время в обществе большое внимание уделяется применению различных биологически активных добавок. Однако их применение может иметь негативные последствия для здоровья человека, поскольку, в отличие от лекарственных средств, для биодобавок не проводится обязательный контроль качества. Одним из примеров является L-тирозин – незаменимая аминокислота, которая широко представлена на рынке в составе различных биодобавок.

Предложен новый химически модифицированный электрод на основе послойной комбинации наночастиц диоксида олова, диспергированных в додецилсульфате натрия, и электрополимеризованного в эриохром черного Т для вольтамперометрического определения L-тирозина. Оптимизированы условия получения полимерного покрытия (концентрация мономера, число циклов сканирования, окно поляризации и скорость сканирования потенциала), обеспечивающего достоверное увеличение токов окисления L-тирозина по сравнению со стеклоуглеродным электродом с нанесенными наночастицами диоксида олова. Электроды охарактеризованы с помощью сканирующей электронной микроскопии и комплекса электрохимических методов. Показано статистически достоверный рост эффективной площади поверхности электрода и скорости переноса электрона. Установлены параметры электроокисления L-тирозина на электроде с поли(эриохром черным Т) на фоне буферного раствора Бриттона-Робинсона pH 2.0. Диапазон определяемых содержаний составляют 0.75-100 мкМ, а предел обнаружения – 0.66 мкМ. Установлена селективность отклика L-тирозина в присутствии неорганических ионов, аскорбиновой кислоты, дофамина, метионина, лейцина и гистидина, что является преимуществом созданного электрода. Практическая применимость предложенного подхода показана на примере биодобавок на основе L-тирозина.

УДК 543.866

ВЫБОР МОДИФИКАТОРОВ ПОВЕРХНОСТИ ЭЛЕКТРОДОВ КАК ОСНОВЫ ИММУНОСЕНСОРОВ ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ ТРИЦИКЛИЧЕСКИХ АНТИДЕПРЕССАНТОВ

Газизуллина Э.Р., Медянцева Э.П.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: elvina1704@yandex.ru

Ключевые слова: кластерные комплексы рения, углеродные наноматериалы, иммуносенсор, трициклические антидепрессанты

Тенденции развития методов аналитической химии помимо высокой чувствительности и селективности требуют доступных и экспрессных способов определения лекарственных соединений. Комбинация перспективных наноматериалов с иммуносенсорными технологиями способствует совершенствованию аналитических возможностей.

Предложены гибридные материалы (сочетания углеродных нанотрубок, фуллерена, оксида графена, восстановленного оксида графена с гексарениевыми халькогенидными кластерами ($K_4[Re_6S_8](OH)_6$ и $K_4[Re_6S_8](CN)_6$)) и наноалмазами) в качестве модификаторов поверхности печатных графитовых электродов при разработке импедиметрических и амперометрических иммуносенсоров на примере определения трициклических антидепрессантов.

Выбор компонентов гибридного модификатора основан на том, что кластерные комплексы рения и наноалмазы обеспечивают электрохимическую активность (ток их окисления выступает в качестве аналитического сигнала), а углеродные наноматериалы повышают электропроводность и адсорбционную способность. Для закрепления структур нанесение проводили в составе хитозана или аминокпроизводного на платформе полиэфирополиола второго поколения.

Поиск лучших сочетаний компонентов основан на данных, полученных методами дифференциально-импульсной вольтамперометрии и спектроскопии электрохимического импеданса. Морфология модифицированных покрытий охарактеризована атомно-силовой и сканирующей электронной микроскопией.

УДК 543.552

ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНЫЙ АНАЛИЗ НАПРОКСЕНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОГО СЕНСОРА НА ОСНОВЕ ОКСИДА ГРАФЕНА И МОДИФИЦИРОВАННОГО ХИТОЗАНА

Гайнанова С.И., Абрамов И.А.

Россия, Уфа, Уфимский университет науки и технологий

Russia, Ufa, Ufa University of Science and Technology

E-mail: svetlanaga07@gmail.com

Ключевые слова: напроксен, энантиоселективный анализ, вольтамперометрический сенсор, оксид графена, хитозан.

Напроксен (Нап) относится к группе нестероидных противовоспалительных препаратов и обладает доказанной анальгетической эффективностью. В результате клинических исследований доказано, что R-Нап способен вызывать нежелательные побочные эффекты в организме человека и обладает меньшей фармакологической активностью по сравнению с S-Нап. В связи с этим, определение и распознавание энантиомеров Нап является важной задачей. Для решения подобных задач в современной аналитической химии все чаще применяются вольтамперометрические сенсоры. Подбор наиболее подходящих хиральных селекторов для высокочувствительного и селективного анализа является основополагающим принципом при разработке сенсоров.

В данной работе описана разработка нового энантиоселективного сенсора на основе восстановленного оксида графена и хитозана, ковалентно связанного с N-Тозилпролином для распознавания и определения энантиомеров Нап. Эффективность распознавания возросла при послойном нанесении на поверхность стеклоуглеродного электрода всех составляющих чувствительного слоя. Коэффициент энантиоселективности (I_R / I_S) составил 1.6, а разность потенциалов ($E_R - E_S$) - 40 мВ. Сенсор позволяет проводить количественный анализ энантиомеров в линейном диапазоне концентраций 20-500 μM с пределом обнаружения 0.4 и 0.9 μM для R- и S- Нап, соответственно. При анализе биологических жидкостей сенсор правильно определил концентрации энантиомеров Нап с относительным стандартным отклонением менее 4.7 %.

Таким образом, предложенный сенсор является потенциальным кандидатом для анализа реальных объектов.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РНФ в рамках научного проекта № 21-13-00169.

УДК 542.61+546.63

МЕМБРАННАЯ ЭКСТРАКЦИЯ КАТИОНОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ О-2-ЭТИЛГЕКСИЛ-N,N-ДИ-2-ЭТИЛГЕКСИЛАМИНОМЕТИЛФОСФОНОВОЙ КИСЛОТЫ

Гайнетдинова Ю.И., Зайцева Е.В., Гарифзянов А.Р.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: ugajnetdinova0@gmail.com

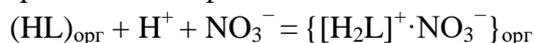
Ключевые слова: мембранная экстракция, редкоземельные элементы

В настоящее время актуальной задачей является разработка эффективных гидрометаллургических процессов разделения ионов редкоземельных элементов (РЗЭ). Значительный интерес в этом отношении представляет метод мембранной экстракции с импрегнированными жидкими мембранами (ИЖМ).

Целью настоящей работы является изучение мембранной экстракции трехзарядных катионов редкоземельных элементов с использованием нового мембранного переносчика-О-2-этилгексил-N,N-ди-2-этилгексиламинометилфосфоновой кислоты (НЛ) из нитратных сред.

В качестве жидкой фазы импрегнированной мембраны использовался раствор НЛ в керосине. Изучение влияния концентрации переносчика в мембранной фазе показало, что оптимальной является концентрация 0,2 М, при дальнейшем повышении концентрации переносчика проницаемость мембраны не изменяется.

Установлено, что повышение концентрации азотной кислоты от 10^{-2} до 0,1 М приводит к резкому возрастанию скорости переноса ионов всех РЗЭ, а при дальнейшем увеличении концентрации азотной кислоты от 0,1 до 0,5 М понижается скорость транспорта в 2-3 раза. В то же время добавление в принимающий раствор с рН=2 нитрата натрия ведет к монотонному росту проницаемости мембраны. Наблюдаемые эффекты можно объяснить протонированием реагента при высоких концентрациях азотной кислоты и связыванием его в органической фазе в ионный ассоциат:



Проведена оптимизация состава мембранной фазы, позволившая достичь проницаемость мембран для катионов РЗЭ до 10^{-4} м/с.

Оценена возможность использования исследованных мембранных экстракционных систем для решения реальных задач по разделению катионов РЗЭ и отделению их от сопутствующих матричных компонентов гидрометаллургических растворов.

УДК 543.55+543.8

ЭЛЕКТРОД, МОДИФИЦИРОВАННЫЙ НАНОЧАСТИЦАМИ ДИОКСИДА ЦЕРИЯ И ЦЕТИЛПИРИДИНИЙ БРОМИДОМ, ДЛЯ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПРОПИЛГАЛЛАТА

Григорьева И.О., Зиятдинова Г.К.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: IrOGrigoreva@stud.kpfu.ru

Ключевые слова: вольтамперометрия, химически модифицированные электроды, наночастицы оксидов металлов, диоксид церия, поверхностно-активные вещества, пропилгаллат, анализ пищевых продуктов.

Пропилгаллат – синтетический фенольный антиоксидант, используемый в пищевой, косметической и фармацевтической промышленности. Его определение является актуальной задачей, поскольку его предельно допустимая концентрация в пищевых продуктах составляет 200 мг/кг. Пропилгаллат окисляется на электродах, в частности, химически модифицированных. Среди модификаторов представляют интерес наночастицы оксидов металлов в высших степенях окисления.

Предложен новый способ вольтамперометрического определения пропилгаллата на стеклоуглеродном электроде, модифицированном наночастицами диоксида церия и цетилпиридиний бромидом. Цетилпиридиний бромид выполняет функцию диспергирующего агента, обеспечивающего стабилизацию суспензии наноматериала, а также выступает как сомодификатор электродной поверхности. Показано, что модификация электрода приводит к смещению потенциала на 20 мВ к меньшим значениям, а токи окисления увеличиваются в 2.6 раза. Электроды охарактеризованы сканирующей электронной микроскопией и электрохимическими методами. Установлено, что электроокисление пропилгаллата протекает необратимо и контролируется поверхностными процессами. Рассчитаны параметры электроокисления и предложена схема электродной реакции. Диапазоны определяемых содержаний пропилгаллата в дифференциально-импульсном режиме составляют 0.10-2.5 и 2.5-50 мкМ с пределом обнаружения 0.067 мкМ. Способ апробирован на экстрактах подсолнечного и кунжутного масел.

УДК 543.55

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ И БИОСЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ АСИММЕТРИЧНЫХ МЕДИАТОРОВ ЭЛЕКТРОННОГО ПЕРЕНОСА

Гусейнова А., Евтюгин Г.А.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan Federal University

E-mail: guseinova.adelya@yandex.ru

Фенотиазиновые красители находят широкое применение в аналитической химии и биоанализе благодаря специфичности взаимодействия с белками и нуклеиновыми кислотами, выраженной окраске и окислительно-восстановительным свойствам. Красители используют для контрастирования биологических препаратов в микроскопических исследованиях, в качестве лекарственных препаратов антипсихотического и противоракового действия. Свойства фенотиазинов как индикаторов значительно зависят от заряда и стерического объема заместителей. В этой связи актуальна задача скрининга новых соединений фенотиазинового ряда в водных и водноорганических средах для установления возможного влияния указанных факторов на их электрохимические свойства.

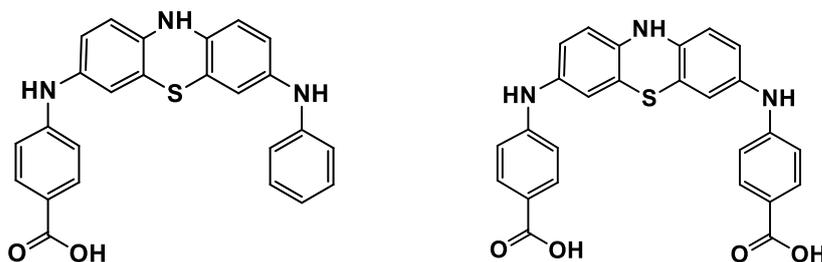


Рис. 1. Структурные формулы новых медиаторов электронного переноса.

В данной работе проведено сравнение электрохимических характеристик моно- и дикарбоксилированных производных фенотиазина (рис.1) в водно-органических средах таких как: ацетон, метанол, ацетонитрил, изопропиловый спирт. Показан обратимый характер процесса переноса электрона и зависимость регистрируемых токов от природы органического растворителя. Продемонстрирован закономерный рост токов пика окисления и восстановления при увеличении скорости сканирования потенциала, соответствующий диффузионно-смешанному контролю переноса электрона. Определено влияние природы заместителей на стехиометрию переноса ионов водорода и электрона в различных интервалах pH. Выраженную зависимость от условий измерения показал дикарбоксилированный фенотиазин, что можно связать с влиянием собственного заряда молекулы и склонностью к агрегации.

УДК 691.175.5/8

ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЧНОСТЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ

Ефимов В.М.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: formik@mail.ru

Ключевые слова: биоразлагаемый пластик, биodeградация, механическая прочность, деструкция, полимер.

Отрицательной чертой современного этапа индустриализации является повышенное количество отходов, негативно воздействующих на состояние биосферы. Цель настоящей работы: исследовать пакеты (26 образцов) с маркировкой «эко» или «биоразлагаемые» различных торговых сетей России и Европы на соответствие заявленным свойствам.



Самодельная разрывная машина

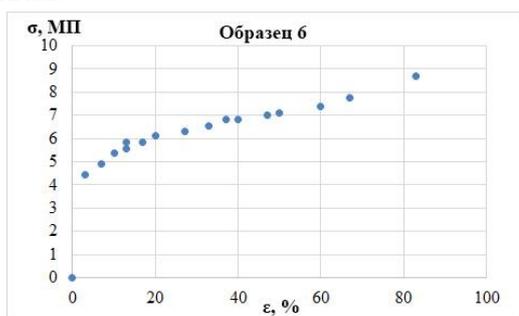


Диаграмма условных напряжений для образца 6.

В качестве параметров связанных с биodeградацией пластиков были выбраны: изменение толщины пакетов, изменение массы образцов и изменение величины разрушающего напряжения для пакетов до и после пребывания их в условиях, соответствующих природным (образцы находились под слоем

почвы в течение 6 месяцев).

Для оценки степени биоразложения по изменению механической прочности как функции степени разрушения ансамблей химических связей, была самостоятельно спроектирована и сконструирована разрывная машина оригинальной конструкции, работающая в диапазоне напряжений необходимых для данных испытаний. В работе также было проанализировано изменение максимальной относительной деформации ϵ до и после пребывания образцов в почве.

Экспериментально установлено: пакеты с пометкой биоразлагаемый на данном этапе развития технологии не имеют экологического преимущества перед обычными пакетами, не имеющими подобной маркировки. Таким образом, были выявлены многочисленные факты сознательного или неосознанного введения в заблуждение массового потребителя относительно экобезопасности полимерных материалов. Исследование позволило сформулировать обновленные правила поведения потребителя, способствующие уменьшению количества пластиковых отходов в окружающей среде.

УДК 543.9

ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОНОБЕНЗИЛФТАЛАТА В ВОДЕ МЕТОДОМ ПОЛЯРИЗАЦИОННОГО ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО ИММУНОАНАЛИЗА

Жарикова О.Г.¹, Косурова Д.С.¹, Шанин И.А.¹, Арутюнян Д.А.¹,

Мухаметова Л.И.¹, Еремин С.А.²

¹Россия, Москва, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова
Russia, Moscow, M.V. Lomonosov Moscow State University

²Россия, Москва, Институт биохимии им. А.Н. Баха
Russia, Moscow, A.N. Bach Institute of Biochemistry

Ключевые слова: поляризация флуоресценции, иммуноанализ, фталаты.

В качестве пластификаторов широко применяются диэфиры фталевой кислоты, которые легко высвобождаются в окружающую среду. Бутилбензилфталат (BBzP) - часто используется при производстве напольных покрытий, детских игрушек, пищевых упаковок. BBzP и его метаболит монобензилфталат (MBzP) - обладают физиологической активностью и встречаются в объектах окружающей среды. Цель работы: разработка и оптимизация методики определения MBzP в воде с помощью поляризационного флуоресцентного иммуноанализа (FPIA). Карбодиимидным методом получен конъюгат MBzP с альбумином быка (BSA) и использован для иммунизации кроликов. Получены антисыворотки после трех циклов иммунизации. Синтезирован и очищен трейсер MBzP с глицинаминофлуоресцином (GAF). Изучена кинетика связывания MBzP- GAF с антисыворотками. Построены калибровочные зависимости и оптимизирована методика FPIA определения MBzP и определены аналитические характеристики метода (предел обнаружения $EC_{10}=0.1$ мкг/мл и чувствительность метода $EC_{50}=2.5$ мкг/мл). Перекрестное реагирование данных антител не превышает 0.1% к диэфирам фталевой кислоты, но моноэфиры дают высокий процент кроссреактивности (>300%). Данная методика подтверждена методом «введено-найдено», процент открытия составил от 80 до 110%. Проверены образцы воды из реальных объектов окружающей среды и показано, что в образцах воды моноэфиры фталатов не обнаружены. Таким образом, получены иммунореагенты, антитела и трейсер для общего анализа монопроизводных фталатов. Оптимизирована методика с пределом обнаружения и апробирована методом «введено-найдено», исследованы реальные образцы воды из окружающей среды.

Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ 21-14-00306.

УДК 543.43+546.681

ИЗУЧЕНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ СКАНДИЯ С БРОМПИРОГАЛЛОЛОВЫМ КРАСНЫМ В ПРИСУТСТВИИ КАТАМИНА АБ

Заборских М.В., Денисова С.А.

Россия, Пермь, Пермский государственный университет

Russia, Perm, Perm State National Research University

E-mail: mariazaborskih08@gmail.com

Ключевые слова: комплексообразование, ПАВ, спектрометрические характеристики.

Перспективным направлением по модификации цветных реакций является прием улучшения условий взаимодействия ионов металлов с металлохромными реагентами при введении третьего компонента – катионного поверхностно-активного вещества (КПАВ). Такие реакции имеют большую практическую ценность и используются для разработки эффективных спектрофотометрических методов определения многих элементов.

В качестве объекта исследований в работе использовали промышленно выпускаемое КПАВ – катамин АБ ((алкил(C₁₀₋₁₈)-диметилбензиламмоний хлорид).

Изучены реакции комплексообразования ионов скандия с бромпирогаллоловым красным (БПК) и катамином АБ. При различных значениях рН и соотношениях компонентов сняты спектры поглощения растворов БПК и его комплексов со скандием в двойной системе и в присутствии катамина АБ. Показано, что значение рН существенно влияет на выбор оптимальной концентрации ПАВ для комплексообразования. При рН 6,4 в присутствии $5,2 \cdot 10^{-3}$ моль/л катамина АБ происходит стабилизация растворов, в два раза увеличивается коэффициент молярного поглощения ($\epsilon_{\text{БПК}-\text{Sc}} = 1,11 \cdot 10^4$; $\epsilon_{\text{БПК}-\text{Sc}-\text{Kat}} = 2,60 \cdot 10^4$), наблюдается bathochromный сдвиг λ_{max} комплексов на 26 нм.

Методами изомолярных серий и насыщения установлен состав двойных комплексов скандия с БПК, а также комплексов с катамином АБ. Исследования проводились в присутствии ацетатной буферной смеси с рН 6,40. Полученные данные свидетельствуют, что соотношение Sc:БПК в двойной системе равно 1:2. А в присутствии катамина АБ образуются комплексы с соотношением Sc:БПК = 1:3.

Таким образом, при введении в систему скандий – БПК $5,2 \cdot 10^{-3}$ моль/л катамина АБ происходит улучшение спектрофотометрических характеристик комплексов.

УДК 543.552+543.635.9

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ТАНИНОВ В РАСТИТЕЛЬНОМ СЫРЬЕ

Иванова М.П., Зиятдинова Г.К.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: MP Ivanova@stud.kpfu.ru

Ключевые слова: вольтамперометрия, химически модифицированные электроды, углеродные нанотрубки, фенольные антиоксиданты, танины, лекарственное растительное сырье.

Танины – природные фенольные соединения, содержащиеся в растительных материалах, обуславливая их практически полезные свойства или терапевтическое действие. Поэтому содержание танинов в растительном сырье используется для его стандартизации и оценки качества, что требует разработки простых и чувствительных способов их определения. В качестве стандарта обычно используется танин, для определения которого можно использовать вольтамперометрию.

Рассмотрено вольтамперометрическое поведение танина на стеклоуглеродном (СУЭ) и модифицированном многостенными углеродными нанотрубками (МУНТ) электродах в среде буферного раствора Бриттона-Робинсона. Показано, что потенциалы окисления танина на МУНТ/СУЭ смещаются на 30 мВ в область меньших значений, а токи окисления достоверно увеличиваются по сравнению с СУЭ. МУНТ формируют на электродной поверхности сетчатое покрытие из сильно переплетенных трубок толщиной 40–70 нм, а также небольшие агрегаты. Показано увеличение эффективной площади поверхности МУНТ/СУЭ ($75 \pm 3 \text{ мм}^2$ vs. $8.9 \pm 0.2 \text{ мм}^2$ для СУЭ) и 6-кратное уменьшение сопротивления переносу заряда (12.1 ± 0.9 и $72 \pm 3 \text{ кОм}$ соответственно). Установлено необратимое электроокисление танина на СУЭ/МУНТ, контролируемое поверхностными процессами. Окисление по первой ступени протекает с участием двух электронов и двух протонов.

В условиях дифференциально-импульсной вольтамперометрии в среде буферного раствора Бриттона-Робинсона рН 2.0, диапазон определяемых содержаний танина составляет 0.10–7.5 мкМ, а предел обнаружения – 0.038 мкМ. Подход использован для определения танинов в лекарственном растительном сырье (дуба коре, ольхи соплодиях, кровохлебки корневищах и корнях, лапчатки и бадана корневищах).

УДК 543.55

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНОЙ ЧЕРНИ И НОВЫХ ЧАСТИЧНО ОКИСЛЕННЫХ ПИЛЛАР[5]АРЕНОВ

Калинина М.А., Евтюгин Г.А.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: wefy2009@yandex.ru

Ключевые слова: пиллар[5]арен, медиатор электронного переноса, вольтамперометрия, углеродная чернь.

Пиллар[5]арены – это макроциклические соединения с цилиндрической хиральной структурой с наличием полости регулируемого размера и формы. Благодаря своим уникальным свойствам и наличию в структуре гидрохиноновых колец данные соединения могут найти применение в составе электрохимических сенсоров в качестве медиаторов электронного переноса.

В данной работе использовали новые производные пиллар[5]аренов. Стеклоуглеродный электрод модифицировали углеродной чернью, а затем смесью производного пиллар[5]арена и ферроценкарбоновой кислоты, после чего регистрировали циклические вольтамперограммы, изучая возможности оптимизации протокола получения покрытия и его электрохимические свойства. На первых этапах работы были охарактеризованы компоненты модифицирующего слоя в отдельности. При сборке слоя было показано, что значения токов пиков при многократном циклировании потенциала снижаются, что говорит о недостаточной адсорбции слоя на поверхности рабочего электрода. В результате оптимизации процесса получения покрытия было принято решение использовать электрополимеризованный анилин, который наносили на поверхность модифицирующего покрытия. При этом полианилин в составе модифицирующего слоя имел достаточно малую толщину, так как покрытие получали за четыре цикла сканирования потенциала. Входящая в полиэлектrolитный слой ферроценкарбоновая кислота не только играла роль медиатора электронного переноса, но и предположительно выполняла функции противоиона, удерживающего на поверхности электрода поликатионный продукт полимеризации анилина за счет его электростатического взаимодействия с карбоксильными группами. Разработанное покрытие в будущем будет рассматриваться как платформа для разработки сенсоров для определения низкомолекулярных соединений.

УДК 543.55+543.8

**ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭВГЕНОЛА НА ЭЛЕКТРОДЕ,
МОДИФИЦИРОВАННОМ ЭЛЕКТРОПОЛИМЕРИЗОВАННЫМ
ПИРОГАЛЛОЛОВЫМ КРАСНЫМ**

Калмыкова А.Д., Зиятдинова Г.К.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: alena.kalmykova.pnb.2000@mail.ru

Ключевые слова: вольтамперометрия, химически модифицированные электроды, электрополимеризация, трифенилметановые красители, углеродные нанотрубки, фенольные антиоксиданты, эвгенол, эфирные масла.

Эвгенол является природным фенольным антиоксидантом и основным компонентом ряда эфирных масел. Определение содержания эвгенола представляет практический интерес, поскольку его терапевтический эффект является дозозависимым. Подобно другим природным фенольным соединениям эвгенол электроактивен в анодной области потенциалов, что позволяет использовать для его определения методы электроанализа.

Разработан вольтамперометрический способ определения эвгенола на электроде, модифицированном карбоксилированными многостенными углеродными нанотрубками (МУНТ-СООН) и электрополимеризованным пирогаллоловым красным. Найдены рабочие условия получения пленки поли(пирогаллолового красного) в потенциодинамическом режиме в нейтральной среде, обеспечивающие наилучший вольтамперометрический отклик эвгенола. Электроды охарактеризованы с помощью сканирующей электронной микроскопии и электрохимических методов. Вольтамперные характеристики эвгенола на стеклоуглеродном и модифицированных электродах подтверждает эффективность предложенного покрытия для определения эвгенола. Рассчитаны параметры электроокисления эвгенола на полимер-модифицированном электроде и предложена схема реакции.

В условиях дифференциально-импульсной вольтамперометрии на фоне буферного раствора Бриттона-Робинсона рН 2.0 диапазон определяемых содержаний эвгенола составляет 0.75-100 мкМ с пределом обнаружения 0.73 мкМ. Показана высокая селективность определения эвгенола в присутствии неорганических ионов и типичных фенольных и терпеновых компонентов эфирных масел. Подход апробирован на эвгенол-содержащих эфирных маслах.

УДК 543.866

**ВЛИЯНИЕ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ И
КЛАСТЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ МОЛИБДЕНА НА АНАЛИТИЧЕСКИЕ
ВОЗМОЖНОСТИ ИММУНОСЕНСОРОВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ
АМИТРИПТИЛИНА**

**Кашина А.К., Рамазанова А.Н., Брусницын Д.В., Семенова С.А., Кусачева И.С,
Табачная Д.А.**

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: knastyia.2011@mail.ru

Ключевые слова: иммуносенсор, углеродные нанотрубки, кластеры молибдена, амитриптилин.

Определение лекарственных вещества в настоящее время связано с использованием композитов в составе иммуносенсоров, которые повышают электропроводность первичного преобразователя сигнала и увеличивают площадь поверхности электрода.

В рамках нашей работы разработаны электрохимические иммуносенсоры на основе планарных электродов, модифицированных многостенными углеродными нанотрубками и кластерными комплексами молибдена в циклическом хитозане для определения амитриптилина в моче человека.

Исследование гибридных композитов на основе кластерных комплексов молибдена в циклическом хитозане проведено комплексом физических и электрохимических методов: атомно-силовая и сканирующая электронная микроскопия, спектроскопия электрохимического импеданса, циклическая вольтамперометрия, дифференциальная импульсная вольтамперометрия.

Аналитические возможности разработанных иммуносенсоров при определении амитриптилина, показывают, что область рабочих концентраций изменяется в диапазоне от 5×10^{-9} до 1×10^{-4} М, нижняя граница определяемых концентраций на уровне 7×10^{-10} М.

При анализе мочи человека для нивелирования влияния эффекта матрицы и уменьшения влияния электрохимически активных компонентов, входящих в состав мочи, проводили ее разбавление фосфатным буферным раствором с рН 7.5 в 10 раз.

Разработаны методики определения амитриптилина модифицированными иммуносенсорами в моче человека. Содержание амитриптилина в моче 2×10^{-9} М, относительное стандартное отклонение 0.062.

УДК 543.423.1

ВЛИЯНИЕ АЗОТНОЙ КИСЛОТЫ НА АНАЛИТИЧЕСКИЙ СИГНАЛ РЗЭ ПРИ АНАЛИЗЕ РАСТВОРОВ МЕТОДОМ АЭС МИП

Конькова Е.К., Чибирев Е.О., Гарифзянов А.Р.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: redatushared@gmail.com

Ключевые слова: атомно-эмиссионная спектроскопия, микроволново-индуцированная плазма, матричные эффекты, редкоземельные элементы.

Учет матричных эффектов макрокомпонентов, содержащихся в анализируемых растворах, имеет важное значение для получения достоверных результатов при количественном определении редкоземельных элементов (РЗЭ) [1]. Исследовано влияние азотной кислоты на интенсивность ионных аналитических линий $\lambda(I)$ при анализе растворов, содержащих РЗЭ методом атомно-эмиссионной спектроскопии с микроволново-индуцированной плазмой (АЭС МИП). При повышении концентрации азотной кислоты от 0 до 1 моль/л относительная интенсивность спектральных линий всех исследованных РЗЭ понижается на 10-20%. На рисунке показано относительное изменение аналитического сигнала определяемого элемента в зависимости от концентрации азотной кислоты в пробе при постоянной концентрации ионов металлов – $2,8 \cdot 10^{-4}$ моль/л.

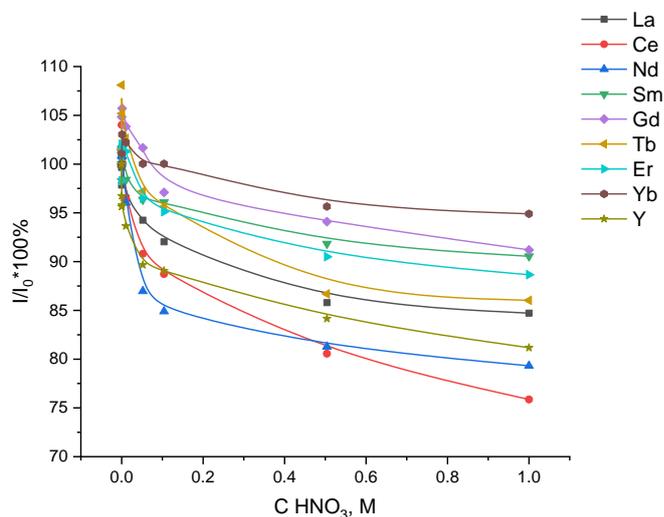


Рис. 1. Влияние добавок HNO₃ на аналитический сигнал РЗЭ.

Список литературы

1. Башилов А. Атомно-эмиссионная спектроскопия микроволновой плазмы: новый метод элементного анализа / А. Башилов, О. Рогова // Аналитика. – 2013. - №3. - С. 48-57

УДК 502.65

ВТОРИЧНОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОТХОДОВ ПРЕДПРИЯТИЙ ТЭК

Королев В.И.¹, Зверева Э.Р.^{1,2}

*¹Россия, Казань, Казанский государственный энергетический университет
Russia, Kazan, Kazan State Power Engineering University*

*²Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan Federal University
E-mail: eziodepakes@gmail.com*

Ключевые слова: ТЭК, вторичное использование отходов, карбонатный шлам, негашеная известь.

Ежегодно в России на объектах энергетики образуется примерно 90-95 млн тонн, при этом только объем золошлаковых отходов ежегодно пополняется и уже равен 2 млрд тонн. Перед объектами ТЭК стоит задача по решению проблемы дальнейшей обработки, хранения и утилизации отходов с получением экологической и экономически выгодной продукции. Одним из перспективных методов использования отходов химводоподготовки является его применение при обработке осадков сточных вод. Анализ литературных данных и информации о уже реализованных в России, и за рубежом проектах по обеззараживанию осадков сточных вод показал, что наиболее экономически целесообразным и простым способом является использование в качестве основного реагента негашеную известь (СаО). При частичном замещении СаО отходом химводоподготовки получаем экологически безопасную технологию обработки осадков, которая позволит снизить затраты на обработку СаО в связи с использованием карбонатного шлама без существенного снижения эффективности обработки [1].

Список литературы

1. Королев В.И., Зверева Э.Р. Российский опыт применения отходов химводоподготовки в хозяйственной деятельности: перспективы использования при обработке осадков сточных вод (обзорная статья) // Известия вузов. Проблемы энергетики. 2022. Т. 24. № 6. С. 47-62.

УДК 543.866

НОВЫЕ ВАРИАНТЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АРИСТОЛОХИЕВОЙ КИСЛОТЫ I ТИРОЗИНАЗНЫМИ БИОСЕНСОРАМИ И ПОЛЯРИЗАЦИОННЫМ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫМ ИММУНОАНАЛИЗОМ

Королькова К.А., Лопатко Н.Ю., Бейлинсон Р.М.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: nlopatko82@gmail.com

Ключевые слова: аристолохиевая кислота I, поляризационный флуоресцентный иммуноанализ, тирозиназный биосенсор.

Аристолохиевые кислоты (АК) – группа родственных нитрофенантренкарбоновых кислот, среди которых аристолохиевая кислота I (АК) и аристолохиевая кислота II обладают канцерогенными, нефропатическими и мутагенными свойствами. Известно, что эти соединения содержатся в растениях семейства кирзановых, к которым относится копытень европейский, который, в свою очередь, применяется в народной медицине для лечения различных заболеваний, в том числе алкоголизма.

Для определения АК I был разработан амперометрический биосенсор на основе печатных графитовых электродов с иммобилизованной тирозиназой в качестве биочувствительной части. Диапазон определения составил 1×10^{-10} - 1×10^{-8} М с $R^2 = 0.9864$ и $c_H = 7 \times 10^{-11}$ М. Использование модификации поверхности электрода восстановленным оксидом графена позволило улучшить аналитические характеристики биосенсора: рабочий диапазон 1×10^{-11} - 1×10^{-8} М, $R^2 = 0.9928$ и $c_H = 8 \times 10^{-12}$ М. Электроды, модифицированные углеродными нанотрубками позволили расширить диапазон определяемых концентраций 1×10^{-12} - 1×10^{-8} М, $R^2 = 0.9882$ и $c_H = 5 \times 10^{-13}$ М.

При разработке другого способа определения АК I - поляризационного флуоресцентного иммуноанализа были подобраны рабочие разведения трейсера 1/10000 АК I -этилендиаминфлуоресцеин-изотиоцианат и антител (1/200). Разработанный способ позволил определять АК I в линейном диапазоне концентраций 1×10^{-11} - 1×10^{-7} М с $c_H = 7 \times 10^{-12}$ М и $R^2 = 0.9998$.

Разработанные методики были апробированы на травяных отварах, используемых в народной медицине для лечения алкоголизма, в состав которых входит копытень европейский. АК I была обнаружена в одном из образцов на уровне $(8.2 \pm 0.3) \times 10^{-11}$ М с S_T не более 0.057.

УДК 543.423.1

ЖИДКОСТНАЯ И МЕМБРАННАЯ ЭКСТРАКЦИЯ ТРЕХЗАРЯДНЫХ КАТИОНОВ ПРАЗЕОДИМА, НЕОДИМА, ГАДОЛИНИЯ И ТЕРБИЯ О-ОКТИЛ[(N-МЕТИЛ-N,N-ДИОКТИЛ)АММОНИОМЕТИЛ]ФОСФОНАТОМ

Курашов Я.В., Гарифзянов А.Р.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

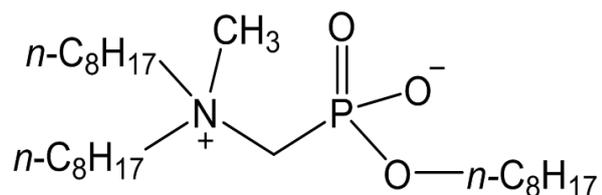
E-mail: yakurashov@outlook.com

Ключевые слова: жидкостная экстракция, мембранная экстракция, редкоземельные элементы.

Последнее десятилетие на международных рынках наблюдается значительный рост спроса на редкоземельные элементы (РЗЭ) и их соединения. В связи с этим актуальной становится задача повышения эффективности гидрометаллургических процессов по добыче и переработке руд этих элементов. При переработке растворов азотнокислого выщелачивания руд, содержащих РЗЭ широко используется жидкостная экстракция. Однако этому процессу присущ ряд недостатков, связанных прежде всего с использованием высоких объемов легковоспламеняющихся жидкостей. Указанного недостатка лишен метод мембранной экстракции с импрегнированными жидкими мембранами (ИЖМ).

Успешность проведения мембранной экстракции в значительной степени зависит от правильности выбора реагента-переносчика.

В настоящей работе изучены экстракционные и мембранно-транспортные свойства нового реагента - о-октил[(N-метил-N,N-диоктил)аммониометил]фосфоната.



Установлено, что повышение концентрации нитрат ионов в водной фазе повышает степень извлечения трехзарядных катионов лантана, празеодима, неодима, гадолиния, тербия и гольмия при жидкостной экстракции раствором экстракционного реагента в смеси 1,2-дихлорбензол - керосин (1:1).

Также исследована мембранная экстракция ионов РЗЭ с раствором переносчика того же состава. Дана оценка возможности использования данных экстракционных систем для решения проблемы разделения ионов РЗЭ.

УДК 543.866

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ МОДИФИКАТОРА НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ КОБАЛЬТА И ВОССТАНОВЛЕННОГО ОКСИДА ГРАФЕНА В БИОСЕНСОРНЫХ УСТРОЙСТВАХ

Легасова А.О., Рамазанова А.Н., Брусницын Д.В., Капралова Ф.Т., Драная Я.О.,
Чернова П.С., Димиев А.М., Свалова А.В.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Ruassia, Kazan, Kazan federal university

E-mail: legasovaa@mail.ru

Ключевые слова: биосенсор, восстановленный оксид графена, наночастицы кобальта.

Необходимо отметить, что наночастицы оксида кобальта применяют в водородных топливных элементах или аккумуляторах, а наночастицы гидроксида кобальта в типографии и радиолокации.

Использование наночастиц кобальта в составе биосенсоров объясняется наличием высокой каталитической активности, химической стабильностью и возможностью функционализации.

При получении наночастиц кобальта в растворе используют различные стабилизирующие агенты: полиэтиленгликоль, полистирол, полиакриламид, додецилсульфат натрия, триэтаноламин. Однако наибольший интерес представляет получение наночастиц кобальта непосредственно на поверхности восстановленного оксида графена.

Одним из наиболее распространённых методов исследования электрохимической активности наночастиц кобальта является циклическая вольтамперометрия, которая используется для изучения электрохимических свойств наночастиц кобальта в различных условиях, таких как изменение рН среды, размеров частиц и их форм.

Спектроскопия электрохимического импеданса используется для оценки изменений в электродных свойствах при различных условиях эксперимента.

Наночастицы кобальта обладают электрохимической активностью и дают сигнал на циклической вольтамперограмме при потенциале (480 ± 30) мВ. В случае дифференциальной импульсной вольтамперометрии сигнал от наночастиц кобальта наблюдается при потенциале (380 ± 20) мВ.

Изученные наночастицы кобальта могут использоваться в качестве модификаторов в составе биосенсоров при определении лекарственных веществ.

УДК 543.55

**ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ И АМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ
ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ТЕТРАЦИКЛИНА НА ЭЛЕКТРОДЕ,
МОДИФИЦИРОВАННОМ БИНАРНОЙ СИСТЕМОЙ ПАЛЛАДИЙ-ЗОЛОТО И
КОМПОЗИТОМ ОКСИДА ГРАФЕНА**

Мурдасова Д.А., Поздняк А.А., Гедмина А.В.
Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan Federal University
E-mail: murdasova0406@mail.ru

Ключевые слова: вольтамперометрия, тетрациклин, биметаллическая система палладий-золото, восстановленный оксид графена.

Тетрациклин является антибиотиком широкого спектра действия, применяется для лечения инфекционных заболеваний человека и в ветеринарной практике. Из-за ряда побочных действий антибиотиков тетрациклинового ряда создание чувствительного, селективного и экспрессного способа количественного определения тетрациклина, для контроля качества лекарственных средств и пищевой продукции является актуальной задачей.

В ходе данной работы методом циклической вольтамперометрии было исследовано электроокисление тетрациклина на электродах с биметаллической системой палладий-золото (Pd-Au) и на композите на основе восстановленного оксида графена (GO_{red}) и бинарной системы (Pd-Au- GO_{red}), иммобилизованных на поверхность электрода из стеклоуглерода (СУ).

Биметаллическую систему Pd-Au на поверхность СУ наносили в потенциостатическом режиме, варьируя условия электроосаждения (величину потенциала электролиза и время осаждения). Установлено улучшение электрохимических характеристик отклика при иммобилизации Pd-Au на подложку из восстановленного оксида графена. Показано, при осаждении Pd-Au на GO_{red} повышается каталитической активность бинарной системы, что выражается в увеличении каталитического эффекта. Разработан способ высокочувствительного вольтамперометрического определения тетрациклина на композитном электроде Pd-Au- GO_{red} -СУ. Нижняя граница определяемых содержаний тетрациклина составляет 5×10^{-8} М. Разработанный электрод Pd-Au- GO_{red} -СУ был применен в условиях проточно-инжекционной системы и показал высокую чувствительность до 5×10^{-9} М. Правильность, предлагаемых способов, оценена методом «введено-найдено» в модельном растворе и в образцах мёда из различных регионов Поволжья.

УДК 543.55

ЭЛЕКТРОПОЛИМЕРИЗОВАННЫЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ ПОЛИ(АЗУРА А) ИЗ ВОДНО-ОРГАНИЧЕСКИХ СРЕД

Нестерова Ю.А.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan federal University

E-mail: junesterova55@gmail.com

Ключевые слова: электрополимеризация, водно-органическая среда, вольтамперометрия, Азур А, электрохимический сенсор.

Электрохимические вольтамперометрические сенсоры в последнее время находят широкое применение для анализа соединений разных классов – от белковых молекул до низкомолекулярных соединений.

В работе рассмотрены свойства электрополимеризованных покрытий на основе фенотиазинового красителя Азура А, полученных из водно-органических сред, содержащих 10% этанол (ПАА_{эт}) или изопропанол (ПАА_{изп}), а также из водного раствора, насыщенного тетрахлорметаном (ПАА_{тхм}). Проведена оценка стабильности характеристик и электрохимических параметров полученных полимерных покрытий, которые являются электроактивными и могут выступать в роли медиаторов электронного переноса. Разработанные модификаторы были использованы для создания электрохимических сенсоров на ряд аналитов, таких как гидрохинон, кверцетин, аскорбиновая кислота, допамин, мочевиная кислота, нитрит натрия, цистеин. Градуировочные зависимости получали методом добавок. Для сравнения аналитических характеристик аналогичные зависимости получали на немодифицированном стеклоуглеродном электроде (СУЭ). Концентрации аналитов варьировали в диапазоне от 50 мкМ до 10 мМ. Лучшие медиаторные свойства для сигналов окисления кверцетина, допамина, цистеина, аскорбиновой кислоты при рН фосфатного буферного раствора 7.0 и 8.0 демонстрировало покрытие на основе ПАА_{изп}. Линейный интервал определяемых концентраций кверцетина составил от 70 мкМ до 10 мМ, с пределом обнаружения 70 мкМ. Сигнал мочевиной кислоты и цистеина регистрировали на вольтамперограммах только в случае немодифицированного СУЭ и ПАА_{изп}. Токи окисления цистеина на ПАА_{изп} были в два раза выше, лучше выражены и разрешены, чем на немодифицированном СУЭ.

УДК 543.553

**АМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ ТИРОЗИНАЗНЫЙ ИММУНОСЕНСОР,
МОДИФИЦИРОВАННЫЙ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫМИ МАТЕРИАЛАМИ,
ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЛХИЦИНА**

Перескокова Е.В., Лопатко Н.Ю., Бейлинсон Р.М.
Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan Federal University
E-mail: p.v.elizaveta@mail.ru

Ключевые слова: колхицин, иммуноферментные сенсоры, наноструктурированные материалы, графитовые печатные электроды.

Колхицин – растительный алкалоид, получаемый экстракцией безвременника осеннего. Данный препарат рассматривают, как лекарство от коронавирусной инфекции, а также в качестве соединения для создания новых противораковых средств. Однако его применение ограничено широким спектром побочных действий.

Для селективного определения колхицина разработан иммуноферментный сенсор, представляющий собой графитовый печатный электрод, на поверхности которого проводили соиммобилизацию тирозиназы и Ат против колхицина. Установлено, что в присутствии колхицина наблюдается увеличение аналитического сигнала сенсора в области концентраций 1×10^{-11} - 1×10^{-6} М с $C_n = 7 \times 10^{-12}$ М, т.е. колхицин является активатором тирозиназы. Наибольший активирующий эффект достигается при использовании Ат в разведении 1:10.

В качестве модификаторов поверхности электродов использовали восстановленный оксид графена (ВОГ), углеродные нанотрубки (УНТ) и нанокompозит ВОГ с наночастицами никеля (НЧ Ni).

Изучение действия колхицина на модифицированные УНТ и ВОГ иммуносенсоры показало, что эффект активации наблюдается в той же области концентраций, однако удалось снизить нижнюю границу определяемых концентраций (5×10^{-12} М и 6×10^{-12} М для ВОГ и УНТ соответственно), улучшить коэффициент чувствительности, увеличить максимальный процент активации. Наилучшие результаты были получены при использовании нанокompозита ВОГ/НЧ Ni в качестве модификатора поверхности электрода. В этом случае C_n понизилась до 4.5×10^{-12} М.

Рассчитана константа связывания иммунного комплекса Ат - колхицин ($K_a = (7.3 \pm 0.3) \times 10^9$ моль⁻¹). Оценена специфичность данных Ат по отношению к диклофенаку.

Разработана методика определения колхицина с помощью тирозиназных иммуносенсоров, модифицированных ВОГ и НЧ Ni, в растворе искусственной урины с относительным стандартным отклонением не больше 5.2%

УДК 622.765+541.183.24

ОСАЖДЕНИЕ И ФЛОТАЦИЯ ИОНОВ СКАНДИЯ (III) И ТУЛИЯ (III) АЛКИЛБЕНЗОЛСУЛЬФОКИСЛОТОЙ

Райзер А.Е.¹, Хузягулова М.М.¹, Денисова С.А.¹, Заболотных С.А.^{1,2}

¹Россия, Пермь, Пермский государственный национальный исследовательский университет

Russia, Perm, Perm State National Research University

²Россия, Пермь, «Институт технической химии Уральского отделения Российской академии наук»

Russia, Perm, "Institute of Technical Chemistry Ural Branch of Russian Academy of Science"

E-mail: lady.rayzer@mail.ru, nefediev@yandex.ru

Ключевые слова: осаждение, редкоземельные элементы, флотация.

Изучена возможность осаждения ионов скандия (III) и тулия (III) с промышленно-выпускаемым АПАВ алкилбензолсульфокислотой (АБСК) для последующего флотационного извлечения. Установлено, что максимальная степень осаждения Sc^{3+} раствором АБСК (62,70 %, $pH_{равн} = 1,9$) наблюдается из 0,01 моль/л растворов при трехкратном избытке осадителя. При меньшей концентрации иона металла количество осадка уменьшается в связи с увеличением растворимости. Осаждение Tm^{3+} достигает максимума (98,24 %, $pH_{равн} = 1,48$) при 3,5-кратном избытке АБСК. Осадки скандия и тулия с АБСК выделены препаративно и проанализированы методами элементного анализа и термогравиметрии. Согласно полученным результатам, при отсутствии щелочи образующиеся осадки представляет собой простые соли $Sc(C_nH_{2n+1}C_6H_4SO_3)_3$ и $Tm(C_nH_{2n+1}C_6H_4SO_3)_3$.

Испытания по ионной флотации проводили на механической флотомашине ФМЛ 0,3 с объемом камеры 300 мл. Остаточное содержание ионов металлов в камерном продукте определяли спектрофотометрически. Были установлены оптимальные условия для ионной флотации Sc(III) и Tm(III) с алкилбензолсульфокислотой: $\tau_{фл} = 5$ мин; $v = 40$ мл/мин; Sc : АБСК = 1:1; Tm: АБСК = 1:3. Экспериментальные данные показали, что флотация ионов Sc(III) АБСК в присутствии щелочи проходит в интервале pH 4,35 - 5,00, для Tm(III) в интервале pH 2,50 - 6,70. При этом максимальное извлечение ионов Sc(III) и Tm(III) составляет 91% и 88% соответственно. В данных условиях в составе осадка присутствовали алкилбензолсульфонат-ионы, обеспечивающие возможность протекания флотации. При более высоких pH осадки не флотировались.

УДК 547-386+543.422.3

ИЗУЧЕНИЕ РЕАКЦИИ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ N-БЕНЗИЛОИЛ-N'-(8-ХИНОЛИЛСУЛЬФОНИЛ)ГИДРАЗИНА С ИОНАМИ Cu(II)

Саитов Д.Б., Ельчищева Ю.Б., Павлов П.Т.

Россия, Пермь, Пермский государственный национальный исследовательский университет

Russia, Perm, Perm State National Research University

E-mail: analitik1973@mail.ru

Ключевые слова: органические лиганды; комплексообразование, цветные металлы, ацилсульфонилгидразины, спектрофотометрия.

Настоящая работа посвящена изучению комплексообразующих свойств N-бензилоил-N'-(8-хинолилсульфонил)гидразина (БХСГ) в качестве перспективного хелатообразующего лиганда с дополнительным координационным центром по атому азота хинолильного радикала для практического использования данного реагента в процессах концентрирования ионов Cu(II).

В результате реакции комплексообразования ионов Cu(II) с БХСГ в аммиачной среде образуется раствор ярко-зелёного цвета. Зарегистрированы и идентифицированы спектры поглощения БХСГ и его комплекса с ионами Cu(II). Максимальное поглощение комплекса наблюдается при длине волны 390 нм. Время развития окраски комплексного соединения составляет 20–30 минут. Результаты исследования влияния кислотности на комплексообразование БХСГ с ионами Cu(II) показали, что оптимальный диапазон pH составляет – 11,6–12,4. Методами насыщения и сдвига равновесий доказано, что молярные соотношения $[Cu(II)]:[БХСГ] = 1:1$. Результаты кондуктометрического титрования доказывают, что образуются комплексы $[Cu(II)]:[БХСГ] = 1:1$ и $2:1$. В оптимальных условиях построен градуировочный график; закон Бугера-Ламберта-Бера выполняется в интервале от 0,32 до 3,2 мг Cu(II) в 25 мл раствора. Правильность и сходимость спектрофотометрического определения ионов Cu(II) с БХСГ в аммиачной среде рассчитаны с помощью методов математической статистики. Относительная ошибка составляет 2,08 %; доверительный интервал (мг/25 мл) – $1,6225 \pm 0,0339$.

УДК 543.423.1

МЕМБРАННАЯ ЭКСТРАКЦИЯ КАТИОНОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ О-2-ЭТИЛГЕКСИЛ(N,N-ДИ-2-ЭТИЛГЕКСИЛАМИНОМЕТИЛ)ФОСФОНАТОМ

Сафина Г.Г. Ахмадуллина Л.И , Гарифзянов А.Р.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

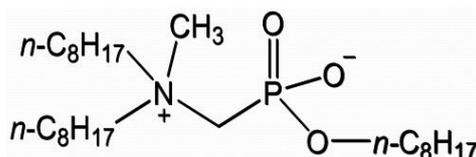
E-mail: tanziliasafina@mail.ru

Ключевые слова: мембранной экстракция, редкоземельные элементы.

В связи с возрастающим спросом редкоземельные элементы и их соединений, которые широко используются в оптике и в радиоэлектронике, а также для получения специальных сплавов актуальной задачей становится разработка новых экономичных методов извлечения их из минералов и руд, а также нетрадиционных источников.

В этом отношении весьма перспективным представляется использование для этих целей методов мембранной экстракции через жидкие импрегнированные мембраны. Данный метод обладает существенным преимуществом перед обычной жидкостной экстракцией, поскольку требует значительно меньших объемов органических растворителей и экстракционных реагентов.

Успешность использования мембранной экстракции в значительной степени определяется правильным выбором состава жидкой мембраны, прежде всего мембранного переносчика. В настоящей работе исследована возможность применения в качестве мембранного переносчика ионов РЗЭ о-2-этилгексил(п,п-ди-2-этилгексиламинометил) фосфонатом (L).



Мембрана готовилась путем пропитывания фторопластовых фильтров с диаметром пор 0,45 мкм 0.1 раствором в смеси дихлорбензол с керосином (1:1). Оптимальная концентрация переносчика в мембранной фазе 0.1М. Скорость мембранного транспорта ионов редкоземельных элементов из нитратных и перхлоратных сред оказалась достаточно высокой и достигала $2 \cdot 10^{-5}$ м/с.

Изучения влияния концентрации азотной кислоты, а также перхлорат ионов в отдающей фазе свидетельствует о том, что процесс мембранного транспорта осуществляется через образование в мембранной фазе ионного ассоциата следующего состава $\{[L_n L_3^{3+}] \cdot 3A_u^-\}$ где $A_u^- = NO_3^-, ClO_4^-$.

УДК 543.866

**АМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ ИММУНОСЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ ЭЛЕКТРОДОВ,
МОДИФИЦИРОВАННЫХ ВОССТАНОВЛЕННЫМ ОКСИДОМ ГРАФЕНА В
СОЧЕТАНИИ С КЛАСТЕРНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ ПЕРЕХОДНЫХ
МЕТАЛЛОВ, ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИМИПРАМИНА**

**Смирнова А.А.¹, Рамазанова А.Н.¹, Брусницын Д.В.¹, Зиганшин М.А.¹, Семенова
С.А.¹, Елистратова Ю.Г.², Мустафина А.Р.²**

*¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan Federal University*

*²Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
E-mail: sanna3501@gmail.com*

Ключевые слова: иммуносенсор, восстановленный оксид графена, кластеры рения, имипрамин.

Тенденцией развития биосенсоров является использование в качестве модификаторов современных перспективных модификаторов на основе углеродных материалов и кластерных комплексов переходных металлов, что дает возможность регулировать характеристики получаемых биосенсорных устройств.

В нашей работе разработаны амперометрические иммуносенсоры на основе планарных электродов, модифицированных восстановленным оксидом графена в сочетании с кластерными комплексами рения и молибдена, для определения имипрамина в моче человека.

В качестве аналитического сигнала выбран ток окисления кластерных комплексов рения или молибдена, что использовано в качестве метки в иммуносенсоре.

Аналитические возможности разработанных иммуносенсоров при определении имипрамина печатными графитовыми электродами, модифицированными восстановленным оксидом графена в сочетании с кластерными комплексами молибдена в хитозане, показывают, что область рабочих концентраций изменяется в диапазоне от 1×10^{-9} до 1×10^{-5} М, нижняя граница определяемых концентраций на уровне 8×10^{-10} М.

Разработаны методики определения имипрамина в моче человека. Установлено, что содержание имипрамина в моче 2×10^{-8} М, относительное стандартное отклонение 0.065.

УДК 543.55+543.8

ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР НА ДИГИДРОКВЕРЦЕТИН ДЛЯ КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ДОБАВОК

Тарабукина А.Д., Зиятдинова Г.К.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: ADTarabukina@stud.kpfu.ru

Ключевые слова: вольтамперометрия, химически модифицированные электроды, наночастицы оксидов металлов, диоксид олова, поверхностно-активные вещества, дигидрокверцетин, анализ биологически активных соединений.

В настоящее время в различных отраслях промышленности активно используются биологические добавки, содержащие флавоноиды. Среди последних можно выделить дигидрокверцетин, применяемый в пищевой, косметической, фармацевтической и агропромышленности. Содержание дигидрокверцетина в различных объектах необходимо контролировать, что требует разработки чувствительных, селективных, простых и экспрессных методов.

Разработан вольтамперометрический сенсор для определения дигидрокверцетина, основанный на его окислении на стеклоуглеродном электроде (СУЭ), модифицированном диспергированными в цетилпиридиний бромиде наночастицами диоксида олова. Модификация электродной поверхности обеспечивает увеличение степени обратимости электродной реакции, а также значимое увеличение редокс-токов по сравнению со СУЭ (в 2.3 и 3.3 для анодного и катодного пиков соответственно). Морфология электродной поверхности охарактеризована сканирующей электронной микроскопией. Данные электрохимических методов подтверждают статистически достоверное увеличение эффективной площади поверхности электрода и скорости переноса электрона. Показано, что электроокисление сопровождается переносом протонов и контролируется как диффузией, так и поверхностными процессами. В условиях дифференциально-импульсной вольтамперометрии диапазон определяемых содержаний дигидрокверцетина составляет 0.075–25 мкМ с пределом обнаружения 70.7 нМ. Разработанный сенсор успешно применен в анализе биодобавок дигидрокверцетина. Полученные результаты сопоставлены с данными кулонометрического титрования электрогенерированным бромом.

УДК 373.1

САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА ОБУЧАЮЩИХСЯ В ЦИФРОВОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ СРЕДЕ

Текаева О.О., Сагитова Р.Н.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: o.tekayeva1999@gmail.com

Ключевые слова: самостоятельная работа, цифровая образовательная среда, обучение химии.

Современная образовательная среда становится цифровой и интерактивной, что требует изменения подходов к организации учебного процесса. Самостоятельная работа обучающихся в условиях цифровизации образования [1, 2] становится одним из ключевых инструментов формирования компетентных выпускников. Одним из главных достоинств цифровой образовательной среды является возможность организации дистанционной самостоятельной работы обучающихся.

В результате опытно-экспериментальной работы с российскими и туркменскими обучающимися установлено, что цифровая образовательная среда позволяет обучающимся работать в коллаборативном режиме: обмениваться с другими учащимися знаниями из разных частей страны и работать над проектными работами в группах. Это помогает им развивать коммуникативные навыки. Наконец, использование цифровых ресурсов в образовательной среде для самостоятельной работы обучающихся позволяет развить навыки самоорганизации и управления временем, что является важным навыком для будущей карьеры.

Список литературы

1. Гильманшина, С.И. Авторские цифровые ресурсы как элементы образовательной среды подготовки учителей химии / С.И. Гильманшина, Г.Д. Каримова, Р.Н. Шакирова // Современные проблемы науки и образования. – 2022. – № 1. – URL: <https://science-education.ru/article/view?id=31435> (дата обращения: 01.02.2022).

2. Гильманшина, С.И. Разработка и внедрение цифровых видеоматериалов методического сопровождения химического практикума / С.И. Гильманшина, А.Р. Рахманова, В.А. Миннахметова // Современные наукоемкие технологии. – 2022. – № 4. С. 151-155.

УДК 546.03+541.49

ПРОЦЕССЫ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ И ЭКСТРАКЦИИ КАТИОНОВ ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ И ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С N-(КАРБОКСИМЕТИЛ)-N-АЛКИЛАМИНОМЕТИЛЕН(О-ЭТИЛ)ФОСФОНОВОЙ КИСЛОТОЙ

Толкачева Е.В., Мирзаянов И.И., Гарифзянов А.Р.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

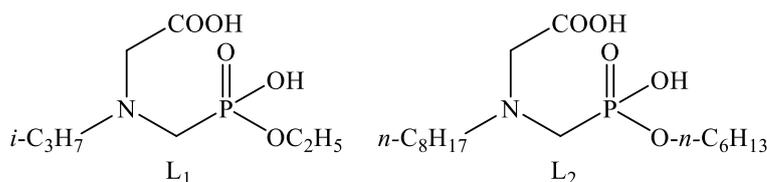
Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: all.tired@yandex.ru

Ключевые слова: аминоксифонаты, экстракция, комплексоны, комплексообразование, комплексоны фосфорорганические, кислотно-основные свойства, константы устойчивости комплексов

В современном мире активно растёт число промышленных предприятий и добыча рудных ископаемых. В связи с этим увеличивается спрос на извлечение металлов из сточных вод производств и гидрометаллургических растворов. Органические комплексоны являются перспективными соединениями для извлечения ионов металлов из низкоконцентрированных растворов.

В настоящей работе проведён синтез и исследованы комплексообразующие и экстракционные свойства (N-карбоксиметил)-N-изопропил-(О-этил)аминометилфосфоната (L_1) и (N-карбоксиметил)-N-октил-(О-гексил)аминометилфосфоната (L_2) в системах с катионами щелочноземельных, переходных и редкоземельных элементов.



Результаты рН-метрического титрования L_1 показывают, что закономерности в изменениях констант устойчивости соответствуют правилу Ирвинга-Уильямса; при этом образующиеся комплексы менее прочные, чем комплексы их структурного аналога – метилиминодиуксусной кислоты.

Изучение экстракционных процессов с участием L_2 в системе $H_2O/CHCl_3$ показало достижение полного извлечения металлов при рН 3 для Cu^{2+} , La^{2+} , Nd^{3+} , Yb^{3+} и рН 4.5 для Co^{2+} , Ni^{2+} . При этом 40-кратный избыток Ca^{2+} не оказывает существенного влияния на экстракцию Cu^{2+} при рН 3-3.5.

УДК 543.866

**ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МОДИФИКАТОРЫ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ МЕДИ В
СОЧЕТАНИИ С ВОССТАНОВЛЕННЫМ ОКСИДОМ ГРАФЕНА ДЛЯ
РАЗРАБОТКИ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ БИОСЕНСОРОВ**

**Федорова Д.А., Рамазанова А.Н., Брусницын Д.В., Медянцева Э.П., Журавлева Ю.И.,
Асылгараева А.Ф., Димиев А.М., Свалова А.В.**

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: fedorovadarina255@gmail.com

Ключевые слова: биосенсор, восстановленный оксид графена, наночастицы меди.

В настоящее время наночастицы оксида меди активно используются в качестве катализатора для различных процессов окисления, а наночастицы гидроксида меди могут быть использованы в качестве пигментов и в керамической промышленности. Наночастицы меди имеют ряд преимуществ при использовании в биосенсорах в качестве модификаторов: высокая площадь поверхности, возможность проводить функционализацию поверхности, то есть закреплять различные биомолекулы, такие как антитела или аптамеры.

Использование в работе восстановленного оксида графена позволяет сохранить высокую электропроводность подложки и путем модификации его поверхности улучшить его свойства.

Особенность данного исследования состоит в том, что наночастицы меди синтезированы непосредственно на восстановленном оксиде графена путем химического восстановления боргидридом натрия и отжигом полученного композита, что позволяет повысить электропроводность получаемого модификатора.

Установлено, что наночастицы меди обладают электрохимической активностью и дают сигнал при потенциале (510 ± 30) мВ. Изучение их электрохимического поведения проводили с использованием циклической и дифференциальной импульсной вольтамперометрией, а также спектроскопией электрохимического импеданса.

Полученный модификатор на основе наночастиц меди в сочетании с восстановленным оксидом графена может быть использован при разработке электрохимических биосенсоров для определения лекарственных веществ в биологических жидкостях.

УДК 543.94

**АМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ ТИРОЗИНАЗНЫЕ ИММУНОСЕНСОРЫ,
МОДИФИЦИРОВАННЫЕ НАНОМАТЕРИАЛАМИ РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ ДЛЯ
ОПРЕДЕЛЕНИЯ ХЛОРАМФИНИКОЛА**

Цуй Ичень, Явишева А.А., Бейлинсон Р.М.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: 1149433392@qq.com

Ключевые слова: тирозиназный иммуносенсор, хлорамфеникол, наноалмаз, восстановленный оксид графена, углеродные нанотрубки, фуллерен, наночастицы золота.

Хлорамфеникол – антибиотик, имеющий широкое применение против многих видов микроорганизмов. Необходим контроль содержания данных лекарственных соединений в окружающей среде, продуктах питания и биологических жидкостях. Для такого мониторинга особый интерес представляют разработки, сочетающие варианты электрохимии, иммуноанализа и применение наноматериалов различной природы для модификации поверхности сенсоров.

В работе для определения хлорамфеникола предложены амперометрические иммуносенсоры на основе платиновых планарных электродов, модифицированных наноматериалами различной природы (углеродными нанотрубками, фуллереном C₆₀, наноалмазом, восстановленным оксидом графена, наночастицами золота (НЧ Au)), иммобилизованного фермента тирозиназы и моноклональных антител против хлорамфеникола.

Линейный диапазон градуировочной зависимости тока от концентрации хлорамфеникола в случае тирозиназного иммуносенсора составил 1×10^{-9} М - 1×10^{-6} М, c_H 3×10^{-10} М. Иммуносенсоры, модифицированные такими углеродными наноматериалами, как наноалмазы и фуллерен позволили расширить диапазон определяемых концентраций от 1×10^{-10} до 1×10^{-6} М, снизить нижнюю границу определяемых концентраций: c_H 2×10^{-11} М и 5×10^{-11} М в случае фуллерена и НА соответственно, увеличить максимальный процент ингибирования до 84% (фуллерен), 88% (наноалмазы). Иммуносенсоры, модифицированные нанокompозитами: углеродные наноматериалы / наночастицы золота показали наилучшие характеристики в случае модификации поверхности сенсора наноалмазами /НЧ Au.

Разработанные иммуносенсоры были апробированы в анализе пищевых продуктов и морской воды.

УДК 543.94

ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ФЕРМЕНТНЫЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИЛЛАР[5]АРЕНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПЕЧАТНОЙ ПРОТОЧНОЙ ЯЧЕЙКИ СО СМЕННЫМ РЕАКТОРОМ

Шафигуллина И.З., Стойков Д.И., Евтюгин Г.А.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

Email: insiyashafigullina@gmail.com

Ключевые слова: электрохимия, ферментный анализ, медицина.

Актуальной задачей современной аналитической химии является создание новых портативных аналитических устройств в интересах медицины и фармакологии. Нами был предложен ферментный электрохимический сенсор с хроноамперометрической регистрацией сигнала на основе печатного графитового электрода (ПГЭ), модифицированного различными производными пиллар[5]арена (П[5]А), для определения мочевой кислоты. Модификацию ПГЭ проводили различными способами: совместная электрополимеризация тионина и метиленового синего с предварительным капельным нанесением на рабочую поверхность 1 мкл углеродной черни (УЧ) и П[5]А из общей суспензии в пропиленкарбонате; капельное нанесение 1 мкл УЧ и пиллар[3]арен[2]хинона (П[3]А[2]Х) в отсутствие или в присутствии ферроцена из общей суспензии в пропиленкарбонате.

Хроноамперометрические измерения проводили в проточной ячейке со сменным реактором, изготовленной методом 3D-печати из полимолочной кислоты. На внутренних стенках реактора проводили иммобилизацию фермента посредством карбодиимидного связывания. Модифицированный электрод закрепляли в ячейке, после чего через нее пропускали фоновый буферный раствор до стабилизации тока и далее - раствор субстрата. При этом регистрировали электрохимический отклик продукта ферментативной реакции.

Для сенсора на основе незамещенного П[5]А с включением сополимера предел обнаружения пероксида водорода составил 50 нМ, а мочевой кислоты – 0.1 мкМ. Сенсоры на основе П[3]А[2]Х показали более высокую чувствительность по отношению к пероксиду водорода: для УЧ/П[3]А[2]Х – 10 нМ, для УЧ/П[3]А[2]Х/Ферроцен – 0.1 нМ. Таким образом, новое производное П[5]А продемонстрировало улучшенные медиаторные свойства, что может быть использовано при разработке новых электрохимических сенсоров и биосенсоров.

УДК 544.7

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК В ПРЕДПОСЕВНОЙ ИНКРУСТАЦИИ СЕМЯН ДЛЯ СНИЖЕНИЯ НАПЫЛЕНИЯ

Якупов И.С., Григорян Е.А.

Россия, Казань, Казанский национальный исследовательский технологический университет

Russia, Kazan, Kazan National Research Technological University

E-mail: katyagrigrig2005@gmail.com

Ключевые слова: инкрустация полимерами, протравливание посева, лабораторное и полевое прорастание.

В ходе создания, уборки и сохранения семян, наблюдаются снижения посевного качества (лабораторное и полевое прорастание, энергию прорастания) и уменьшение изначальной силы роста. Установлено, что при протравливании семян, препарат не только притесняет болезнетворную микрофлору, но и обнаруживает фитотоксическое воздействие по отношению к проросткам. Это ведёт к затормаживанию ростовых процессов, опускается напряженность роста крупнокорневой системы. Следовательно, при протравливании семян пестицидами, помечаются два недостатка.

Первый связан с проявлением на проростках испытываемых признаков подавления всходов. Второй: такие обработки имеют высокую осыпаемость препаратов с поверхности семян. В конечном итоге хозяйства тянут огромные расходы на приобретение импортных протравителей, которые не всегда получают ожидаемых результатов, однако не проделывать этой важной функции тоже нельзя, потому что протравливание посева семян является обязательной процедурой [1].

Решением проблемы стало использование полимерных плёнок растворимых в воде, но достаточно прочных для минимизирования осыпания. Использование синтетических полимеров способствует лучшему прикреплению веществ к семенам. Также они прибавляют ряд полезных свойств. Инкрустация полимерами эффективна за счёт высоких реологических и адгезивных свойств, способствующих устойчивости к смыванию.

Список литературы

1. Предпосевная инкрустация семян с использованием пленкообразующих препаратов. – URL: (tilimen.org) (дата обращения 11.07.2017).

УДК 543.865

ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХЛОРАМФЕНИКОЛА МЕТОДОМ ПОЛЯРИЗАЦИОННОГО ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО И ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОГО ИНЖЕКЦИОННОГО ИММУНОАНАЛИЗА

Ян Цибо, Явишева А.А., Бейлинсон Р.М.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: 1134091126@qq.com

Ключевые слова: поляризационный флуоресцентный иммуноанализ (ПФИА), последовательный инъекционный иммуноанализ (ПослИА), иммуносенсоры, тирозиназа, хлорамфеникол, диклофенак.

Предложены вариант ПФИА и ПослИА с использованием тирозиназных иммуносенсоров для чувствительного и селективного определения антибиотика хлорамфеникола и противовоспалительного лекарственного препарата диклофенака.

В основе ПФИА лежит конкурентное связывание искомого вещества и трейсера (аналита, меченного флуоресцентной меткой) с ограниченным числом центров связывания специфических антител. В качестве метки при разработке методики ПФИА использовали зеленый флуоресцентный комплекс тербия (III), который оказался чувствительным для определения хлорамфеникола.

Для обеспечения максимального значения аналитического сигнала были подобраны разведения трейсера - 1:10 и антител – 4×10^{-2} мг/мл. Оптимальное время инкубации иммунного комплекса: трейсер - антитела составило 5 мин. Линейный диапазон градуировочной зависимости поляризации флуоресценции от концентрации аналита наблюдался в области концентраций 1×10^{-7} – 1×10^{-11} М.

В качестве метки при разработке амперометрического ИФС для определения хлорамфеникола использовали фермент тирозиназу. Действие сенсора основано на сочетании иммунологической, ферментативной и электрохимической реакциях, приводящих к эффектам «квазиингибирования».

Разработанный вариант ПослИА для определения хлорамфеникола позволил определять его в области концентраций – от 1×10^{-6} до 1×10^{-11} М с c_n 7×10^{-12} М. Условия проведения анализа : скорость потока – 5 мкл/с, время измерения – 2 мин.

Разработанные методики для определения диклофенака и хлорамфеникола апробированы в анализе пищевых продуктов (молоко). Погрешность определения не превышает 0.075.

СЕКЦИЯ 3

Современные проблемы органической и элементоорганической химии

УДК 547.781.1

НОВЫЕ ГЕТЕРОЛИГАНДНЫЕ ННС- ПИРИДИНОВЫЕ КОМПЛЕКСЫ ПАЛЛАДИЯ (II) ТИПА PEPPSI НА ОСНОВЕ П-ТРЕТ-БУТИЛТИАКАЛИКС[4]АРЕНА

Акчурина А.Р., Бурилов В.А., Гафиатуллин Б.Х., Султанова Э.Д., Соловьева С.Е., Антипин И.С.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: lala.kzn@yandex.ru

Ключевые слова: ННС-комплексы Pd(II), PEPPSI комплексы, соли имидазолия

Палладиевые PEPPSI (pyridine-enhanced precatalyst preparation stabilization and initiation) N-гетероциклические карбеновые комплексы показали свою эффективность во многих реакциях кросс-сочетания. Объединение тиакаликс[4]ареновой платформы, обладающей рядом специфических свойств, и ННС лигандов, может существенно расширить потенциал использования PEPPSI ННС-комплексов палладия. На первом этапе нашей работы нами была получена серия монозамещенных солей имидазолия на основе тиакаликс[4]ареновой платформы [2], а затем были синтезированы ННС-комплексы палладия (Рис. 1). Комплексы были охарактеризованы широким спектром физико-химических методов исследования, была изучена их каталитическая активность в реакции кросс-сочетания Сузуки. Палладиевый комплекс с 2,6-диизопропилфенилимидазольным фрагментом показал большую активность по сравнению с коммерческим.

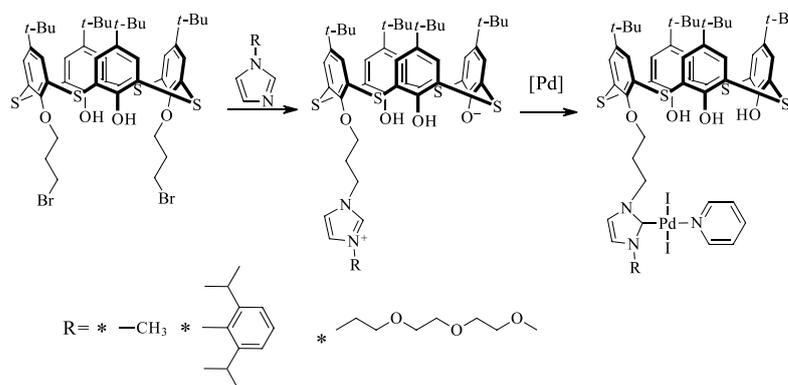


Рис. 1. Общая схема синтеза Pd PEPPSI ННС-комплексов с различными лигандами.

Список литературы

1. Gafiatullin B. Kh., Paskevich I. V., Burilov V. A., Solovieva S. E., Antipin I. S. One-pot Synthesis of Mono-substituted Quaternized *p*-*tert*-Butylthiacalix[4]arenes // *Macroheterocycles*. 2022. Vol. 15. P. 53-58

УДК 547.1

ФОСФИН-КАТАЛИЗИРУЕМОЕ А- И БИСПРИСОЕДИНЕНИЕ ГИДРОФОСФОРИЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ К АКТИВИРОВАННЫМ АЛКИНАМ

Анисимова К.С., Ильин А.В.

Россия, Казань, Казанский Федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: kristinaanisimova08@yandex.ru

Ключевые слова: бисфосфонаты, фосфин-катализируемые реакции, вицинальное бисприсоединение.

Несмотря на то, что был достигнут значительный прогресс в области фосфин-катализируемых реакций непредельных электрофильных соединений, в литературе практически не описаны примеры использования данных реакций для получения соединений с фосфор-углеродной связью.

В рамках настоящих исследований был проведен ряд экспериментов по изучению реакций присоединения диарилфосфинитов к этиловому эфиру фенилпропиоловой кислоты с использованием фосфиновых катализаторов. Кроме того, при соотношении реагентов 1:1 образуется продукт вицинального бисгидрофосфорилирования, а замена фенильного заместителя на метильную группу или на атом водорода позволяет диалкилфосфитам также претерпевать вицинальное бисприсоединение (см. Рис. 1).

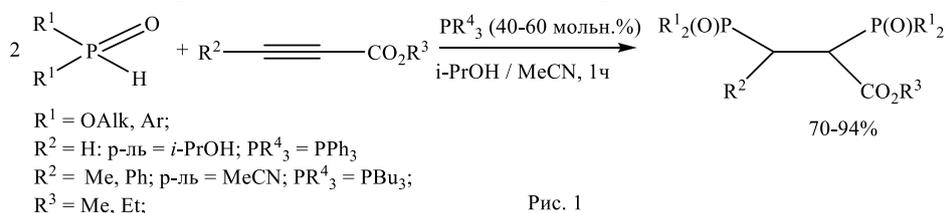


Рис. 1

Рис. 1. Схема получения вицинальных бисфосфорильных соединений

Структура полученных соединений была определена с помощью методов ИК и ЯМР спектроскопии, масс-спектрометрии высокого разрешения и РСА.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-73-10036

УДК 54-44

АЦИЛИРОВАНИЕ САЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ ХЛОРУКСУСНЫМ АНГИДРИДОМ В ПРИСУТСТВИИ ГЕТЕРОГЕННЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ

Атнабаева К.Р.^{1,2}, Нагорнова О.А.², Шабалин К.В.², Фосс Л.Е.², Ивкова Г.А.¹,
Борисов Д.Н.²

¹ Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan Federal University

² Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
Russia, Kazan, A.E. Arbuzov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences
E-mail: 89509457778@mail.ru

Ключевые слова: модифицированные асфальтены, кислотный катализ.

Асфальтены являются остаточным продуктом нефтепереработки, но учитывая их неповторимую природную структуру химическая модификация асфальтенов может приводить к получению разнообразных продуктов с уникальными свойствами [1,2]. Так, преимущества катализаторов на основе нефтяных асфальтенов заключаются в их высокой активности, стабильности и устойчивости к деградации. В ходе работы проведена реакция ацилирования салициловой кислоты хлоруксусным ангидридом в присутствии: катализатора на основе асфальтенов, содержащий сульфокислотные группы (S1), катализатора на основе асфальтенов, содержащий сульфокислотные и нитрогруппы (S2), а также промышленного катализатора КУ-2-8 (S3). В результате синтеза получена ацетилсалициловая кислота со следующим выходом: S1 – 65%, S2 – 79% и S3 – 48%. Структура ацетилсалициловой кислоты подтверждена методом ИК-спектроскопии и данными элементного анализа. Таким образом, катализаторы на основе нефтяных асфальтенов показали хороший выход продуктов синтеза и могут найти применение в качестве промышленного катализатора в реакциях ацилирования.

Список литературы

1. Якубов М.Р. Функционализация нефтяных асфальтенов //Химия нефти и газа. – 2022. – С. 25-26.
2. Borisov D.N., Foss L.E., Shabalin K.V. et al. - Chemistry and Technology of Fuels and Oils. - 2019. – V. 55(5). – P. 552-556.

УДК 543.42+547.1

АКТИВНЫЙ ТРАНСПОРТ ИОНОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ ЛИПОФИЛЬНЫМИ ФОСФОРИЛИРОВАННЫМИ БЕТАИНАМИ

Байгузина Э.А., Султанова Д.Р., Давлетшина Н.В.
Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan Federal University
E-mail: baiguzina.evelina@yandex.ru

Ключевые слова: мембранная экстракция, фосфорилированные бетаины, редкоземельные элементы, ИК-спектроскопия

В настоящей работе изучены мембранно-транспортные и комплексообразующие свойства фосфорилированных бетаинов структуры ${}^-\text{OP}(\text{O})\text{OC}_6\text{H}_{13}\text{CH}_2\text{N}^+(\text{C}_8\text{H}_{17})_2\text{CH}_2\text{C}_6\text{H}_5$ (1) и ${}^-\text{OP}(\text{O})\text{OC}_6\text{H}_{13}\text{CH}_2\text{N}^+(\text{C}_8\text{H}_{17})_2\text{CH}_3$ (2) по отношению к ионам редкоземельных металлов. Перенос ионов осуществлялся по механизму активного транспорта, с использованием жидких поддерживаемых мембран, пропитанных растворами переносчиков. В качестве реагента сравнения использовали промышленный экстрагент триоктилфосфиноксид (3). Результаты экспериментов приведены в таблице в виде значений проницаемости - P_M м/с

Таблица 1

Значения проницаемости P_M для ионов редкоземельных металлов

Переносчики	$P \cdot 10^6$ м/с									
	La	Ce	Pr	Nd	Eu	Gd	Dy	Ho	Er	Y
1	10.5	7.6	7.0	10.6	9.6	8.0	9.2	5.2	9.2	6.5
2	5.9	7.2	8.7	9.0	7.5	7.7	8.3	7.0	5.9	11.5
3	3.0	2.8	3.3	4.9	4.1	4.3	4.6	4.3	2.8	4.0

С
огл
асн
о
по
луч

енным данным исследуемые фосфорилированные бетаины транспортируют некоторые ионы РЗЭ более эффективно: значения проницаемостей в два раза превосходят таковые для триоктилфосфиноксида.

Методом ИК-спектроскопии доказано участие фосфорильной $\text{P}(\text{O})\text{O}^-$ группы в координации с металлами.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-23-00335, <https://rscf.ru/project/22-23-00335/>

УДК 542.97+546.98

ФОСФИН-КАТАЛИЗИРУЕМЫЙ СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ АРГЛАБИНА

Берналь Г.Л.К., Салин А.В.

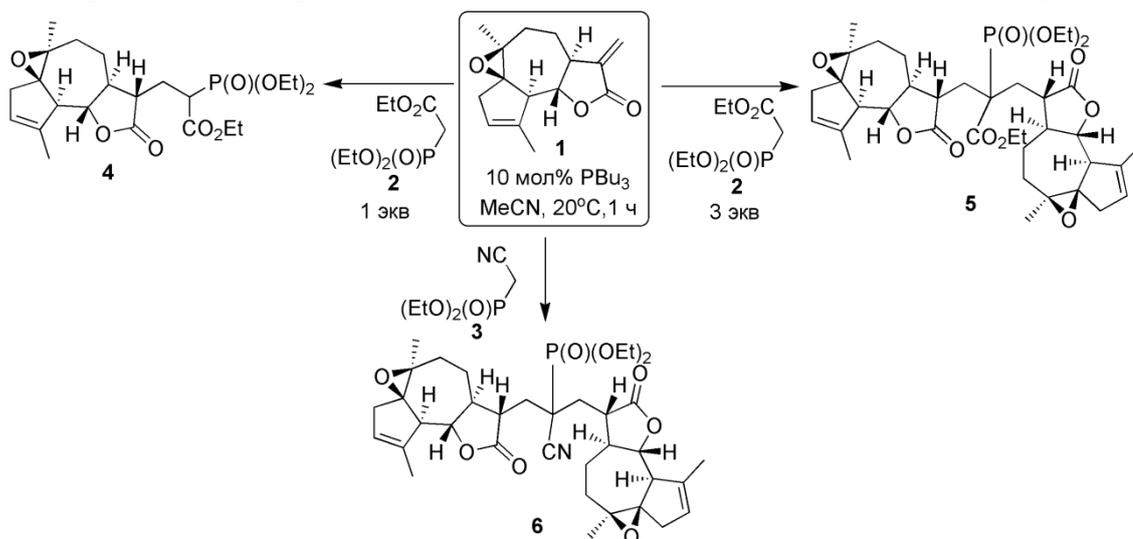
Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: bernalg.laura@gmail.com

Ключевые слова: органокатализ, фосфины, сесквитерпеновые лактоны.

Сесквитерпеновый гваянолидный лактон арглабин **1**, выделяемый из растения *Artemisia Glabella*, используется в медицине в качестве противоопухолевого средства для лечения рака легкого, печени, кишечника, молочной железы и желудка [1]. С целью получения новых производных арглабина в условиях органокатализа трибутилфосфином [2] была проведена модификация данного лактона с помощью реагентов Хорнера:



Строение продуктов доказано методами одно- и двумерной спектроскопии ЯМР, ИК-спектроскопии и масс-спектрометрии высокого разрешения.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ (проект № 23-23-00029).

Список литературы

1. Lone S.H. Arglabin: from isolation to antitumor evaluation. / S.H. Lone, K.A. Bhat, M.A. Khuroo // Chem.-Biol. Interact. – 2015, V. 240. – P. 180-198.
2. Salin A.V. Phosphine-catalyzed Michael additions to α -methylene- γ -butyrolactones. / A.V. Salin, D.R. Islamov // Org. Biomol. Chem. – 2019, V. 17, № 31. – P. 7293–7299.

УДК 547.781.1

СИНТЕЗ НОВЫХ АМФИФИЛЬНЫХ ТРИАЗОЛ СОДЕРЖАЩИХ СОЛЕЙ БИС-ИМИДАЗОЛИЯ

Богданов И.М.¹, Бурилов В.А.¹, Миронова Д.А.¹, Соловьева С.Е.², Антипин И.С.^{1,2}

¹Россия, Казань, Казанский (Приволжский) федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

²Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН

Russia, Kazan, A.E. Arbutov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of

Sciences

E-mail: ilshat.bogdanov.2018@mail.ru

Ключевые слова: азид-алкиновое циклоприсоединение, кватернизация, соли имидазолия.

В работе сообщается о разработанном подходе получения триазол содержащих производных бис-имидазолия (рис. 1). Структуры новых соединений были доказаны и охарактеризованы методами ¹H и ¹³C ЯМР-, ИК-спектроскопией, а также масс-спектрометрией высокого разрешения с ионизирующим электроспреем.

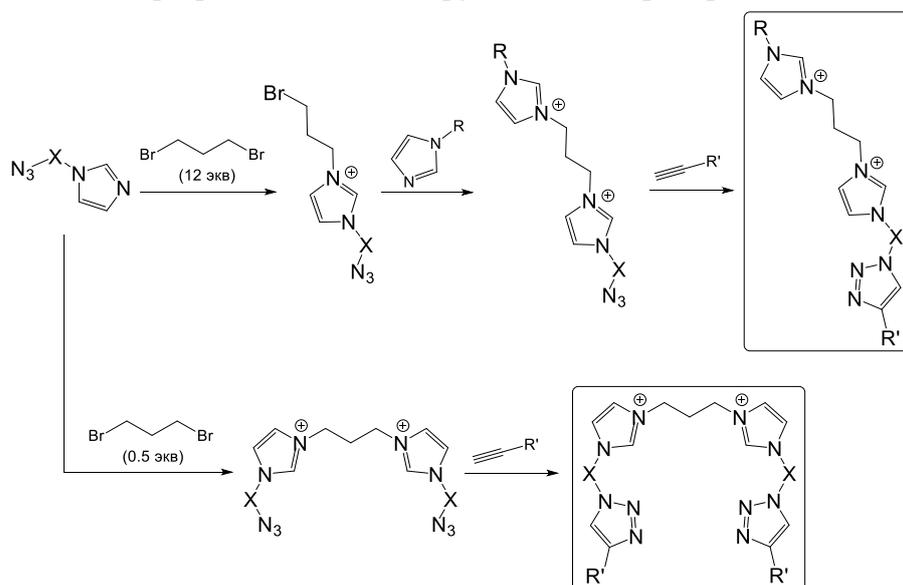


Рис. 1. Стратегия синтеза производных солей бис-имидазолия с триазольными фрагментами

УДК 547.744

ФОСФИН-КАТАЛИЗИРУЕМЫЕ РЕАКЦИИ ПОЛУЧЕНИЯ α -ЗАМЕЩЕННЫХ ЦИННАМАТОВ И АКРИЛАТОВ

Варанкина В.А., Ильин А.В.

Россия, Казань, Казанский Федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: Viktoriyavarankina2309@mail.ru

Ключевые слова: циннаматы, акрилаты, биологическая активность.

В последнее время все большее количество исследований направлено на изучение свойств веществ, встречающихся в природных источниках. Их применение в разработке новых препаратов, проявляющих различные виды биологической активности является довольно интересной задачей.

Нами были оптимизированы условия получения α -замещенных акрилатов (Рис 1.) и циннаматов (Рис. 2.) с замещенными гидантоинами и некоторыми имидами. Реакции протекали, при 40 мольных % трифенилфосфина за 48 часов. Однако при оптимизации условий было выявлено, что для получения α -замещенных акрилатов более рационально использование 1,4-диоксана, а для получения α -замещенных циннаматов – хлористого метилена. Для большинства соединений удалось вырастить кристаллы, пригодные для рентгеноструктурного анализа. По данным РСА подтверждается, что продукт α -присоединения. Полученные соединения интересны с точки зрения их биологической активности.

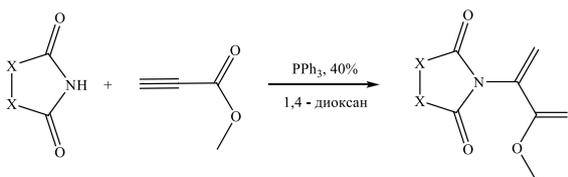


Рис. 1. Схема получения α -замещенных акрилатов

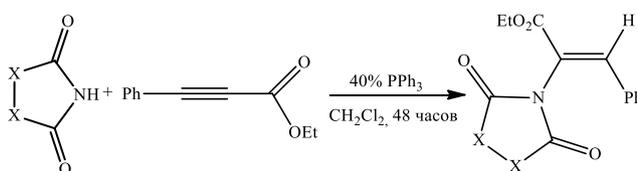


Рис. 2. Схема получения α -замещенных циннаматов

УДК 547.022

ИНТЕГРАЦИЯ ХИМИЧЕСКОЙ БАЗЫ ДАННЫХ В РОБОТИЗИРОВАННЫЕ СИСТЕМЫ

Владимиров Р.Д., Фатыхова А.А., Гимадиев Т.Р., Маджидов Т.И.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: r.vladimirov@outlook.com

Ключевые слова: химическая информация, химические информационные системы, химические базы данных.

В настоящее время всё большую популярность набирают полностью автоматизированные производства, которые демонстрируют высокую эффективность и снижение рисков, связанных с человеческим фактором. Одним из актуальных направлений в автоматизации химических процессов является разработка роботом-химиков, которые смогут не только автономно выполнять базовые функции лаборанта: готовить реагенты и перемешивать растворы, но и помогать в сборе и хранении химической информации, корректировке параметров экспериментов и т.д. Базы данных (БД), обеспечивают удобное хранение и доступность этой информации. В настоящее время имеются множества химических БД с открытым и закрытым доступами и имеются инструменты для создания собственных БД, позволяющие адаптировать и оптимизировать БД под узкие нужды того или иного процесса.

Нами был разработан прототип химической БД «iSynthesisDB» для использования роботом-химиком. Архитектура БД позволяет хранить неорганические и органические молекулы в таблицах NonOrganic и MoleculeStructure. Каждая из этих таблиц содержит полную информацию о структуре молекулы. Все свойства молекул, важные для роботом-химика, например, срок годности, поставщик, количество и т.п. хранятся в таблице MoleculeProperties. Таблица MoleculeStructure допускает хранение только уникальных структур через канонический SMILES.

В дальнейшем запланирована разработка программного интерфейса (API) для работы с БД роботом-химиком в автоматическом режиме без участия человека.

УДК 547.022+547.78+547.45

2-АРИЛМЕТИЛИДЕНОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ТИАЗОЛО[3,2-А]ПИРИМИДИНА: СИНТЕЗ, СУПРАМОЛЕКУЛЯРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЕ И ЦИТОТОКСИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ

Габитова Э.Р.¹, Агарков А.С.^{1,2}, Нefeldова А.А.², Овсянников А.С.², Литвинов И.А.²,
Волошина А.Д.², Соловьева С.Е.², Антипин И.С.¹

¹ Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan Federal University

² Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
Russia, Kazan, A.E. Arbutov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of
Sciences

E-mail: elina81100@gmail.com

Ключевые слова: тиазоло[3,2-а]пиримидины, твердофазная структура, цитотоксичность, водородные связи, нецентросимметричные кристаллы.

В настоящее время актуальной остаётся проблема поиска новых противоопухолевых препаратов, способных сочетать в себе высокую эффективность и низкую токсичность по отношению к здоровым клеткам. Таким образом, производные тиазоло[3,2-а]пиримидина являются перспективными структурными фрагментами для разработки препаратов [1]. Данная работа посвящена синтезу, изучению структуры и противоопухолевой активности производных тиазоло[3,2-а]пиримидина, содержащих 2-арилметиленовые группы (Рис. 1). [2]

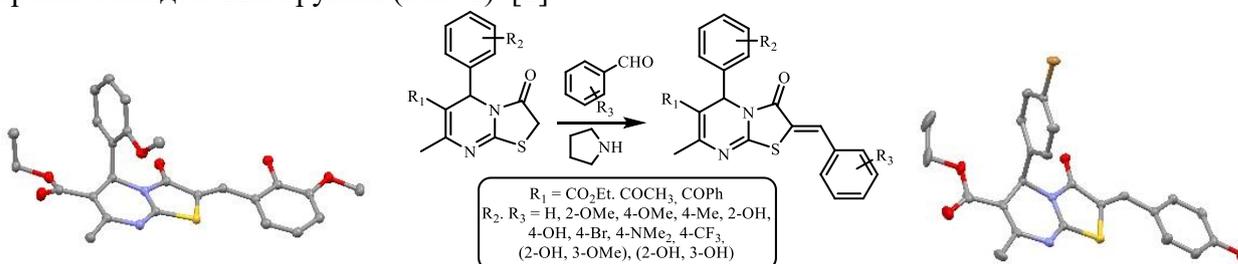


Рис. 1. Синтез 2-арилметиленовых производных тиазоло[3,2-а]пиримидина и кристаллические структуры полученных производных согласно методу РСА

Список литературы.

1. El-Shahat, M.; Salama, M. et al. Mini-Rev. Med. Chem. 2021, 21(1), 118-131.
2. Agarkov, A.S.; Nefedova, A.A.; Gabitova, E.R. et al. Molecules 2022, 27(22),

7747.

УДК 544.122.2

СИНТЕЗ И МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ХЕЛАТНЫХ РАЗНОЛИГАНДНЫХ АМИНОКИСЛОТНЫХ N,O-КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ

Галимов М.Н., Абдуллина Д.Р., Берестова Т.В.

Россия, Уфа, Уфимский университет науки и технологий

Russia, Ufa, Ufa University of Science and Technology

E-mail: miras200181@gmail.com

Ключевые слова: комплексы переходных металлов, хелатные комплексы.

На основе квантовохимического моделирования проведено исследование структурных особенностей хелатных аминокислотных разнолигандных комплексов переходных металлов (Co(II), Cu(II), Ni(II), Zn(II)).

Установлены закономерности в реализации структуры комплексов между металлами, а также закономерности в появлении конформации «ванна» или «кресло». Такая реализация структуры может быть связана с тремя факторами, возникающими у оптически активного атома углерода: тетраэдрической геометрией, абсолютной конфигурацией хирального центра (*R,S*), а также с пространственным расположением лигандов относительно комплексообразователя.

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

Было установлено, что участие иона металла с координационным числом 4 (Cu(II)) или 6 (Co(II), Ni(II)) в комплексообразовании с N,O-лигандами приводит в основном к плоско-квадратной конфигурации [3] в независимости от *цис*-, *транс*-изомерии соединения. В такой структуре атом металла располагается в центре плоского квадрата, а атомы «N» и «O» – в его вершинах. В случае, когда координационное число металла равно 5, то каркас будет искажаться, и то, насколько сильно будет проявляться искажение, будет зависеть от *цис*- или *транс*-конфигурации образующегося комплекса.

Список литературы

1. Berestova T. V., Kuzina L. G., Amineva N. A., Faizrakhmanov I. S., Massalimov I. A., Mustafin A. G. // J. Mol. Struct. 2017. 1137. P. 260-266.
2. Berestova T. V., Khursan S. L., Mustafin A. G. // Spectrochimica Acta Part A: Molecular and Biomolecular. 2020. V.229. 117950.
3. Berestova, T.V., Gizatov, R.R., Galimov, M.N., Mustafin, A.G. // J. Mol. Struct. 1236. 2021. 130303

УДК 547.022

РЕАЛИЗАЦИЯ ГИБРИДНОГО ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА С ГЛУБОКИМ ОБУЧЕНИЕМ С ПОДКРЕПЛЕНИЕМ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ПУТИ СИНТЕЗА МОЛЕКУЛЫ

Гильмуллин А.Д., Фатыхова А.А., Занков Д.В., Маджидов Т.И.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: almaz.ggilmullin@gmail.com

Ключевые слова: хемоинформатика, виртуальный эксперимент, алгоритм, предсказание пути синтеза, глубокое обучение, машинное обучение

В данном исследовании представлен новый алгоритм, представляющий собой гибрид генетического обучения и обучения с подкреплением, способный предсказывать путь синтеза как целевой молекулы, так и его аналогов.

Стратегия алгоритма заключается в оптимизации прямого синтеза, в котором компьютерная генерация направлена в сторону кратчайших синтетических путей, где выбираются те исходные материалы или образующиеся промежуточные продукты, которые функционально ближе к целевому соединению.

В нашем исследовании рассматривается использование виртуального реактора в качестве ключевого компонента инструмента для кодирования трансформации молекулы в виде целочисленных действий. В его функции входит осуществление химических превращений и создание валидных соединений, соблюдая при этом все правила валентности. Длина списка соответствует количеству этапов синтеза, а каждое целое число представляет конкретное преобразование, такое как восстановление функциональной группы или добавление нового реагента.

В ходе проведения исследования был разработан генетический алгоритм для эффективного оптимизирования целевой функции на основе списка чисел, подаваемых на вход виртуального реактора. Оптимизация осуществлялась путем создания популяции особей, каждая из которых имела хромосому, представленную набором генов, описывающих определенные действия. Такой подход позволил создать список шагов для синтеза целевой молекулы, оптимизированных на коэффициенте схожести - индексе подобия Танимото.

УДК 661.718.2+547.558.2+547.56

НОВЫЕ ГИБРИДНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ НА ОСНОВЕ *para*-АМИНОФЕНИЛАРСОНОВОЙ КИСЛОТЫ

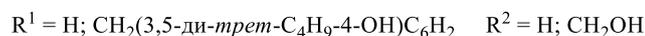
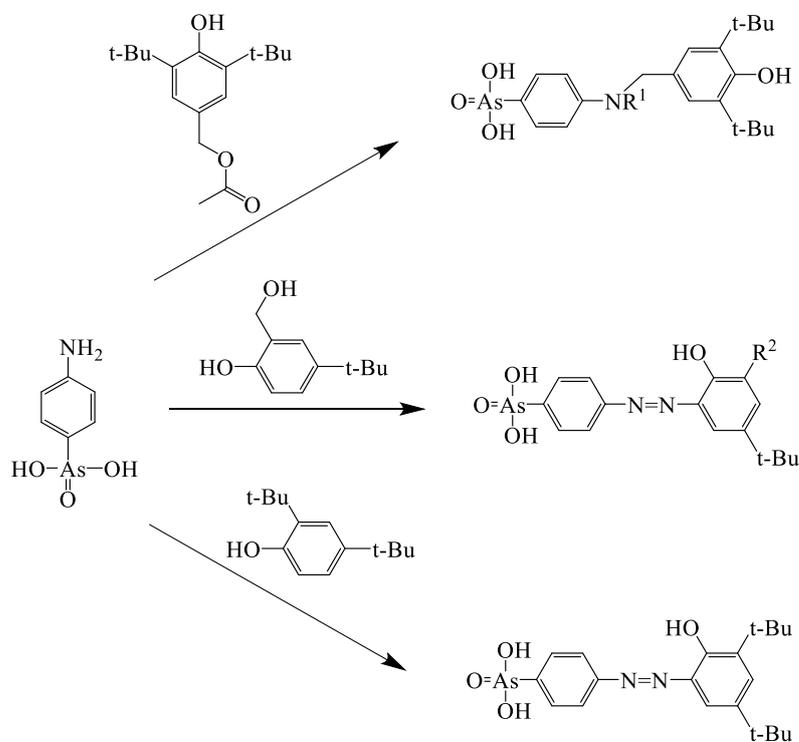
Замалетдинова Д.М., Фархутдинова Э.Р., Рахматуллин Р.Р., Бухаров С.В.
Россия, Казань, Казанский национальный исследовательский технологический университет

Russia, Kazan, Kazan National Research Technological University
E-mail: dinarazamaletdinova13@mail.ru

Ключевые слова: синтез, аминифениларсоновые кислоты, фенольные антиоксиданты, гибридные соединения.

В последнее время появилось много работ по разработке противоопухолевых препаратов на основе мышьякорганических соединений - производных арсоновых кислот. Ранее нами было показано, что модификация 2-аминофениларсоновой кислоты 3,5-ди-трет-бутил-4-гидроксibenзильным фрагментом приводит к повышению ее цитотоксической активности на культурах клеток HeLa.

В настоящей работе осуществлен синтез гибридных соединений на основе 4-аминофениларсоновой кислоты и фенольных антиоксидантов.



УДК 54.057, 543.42

ЖИДКОСТНАЯ ЭКСТРАКЦИЯ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ ФОСФОРИЛИРОВАННЫМИ ПРОИЗВОДНЫМИ 1, 4-ДИАМИНОБУТАНА

Зиннатов Г.А., Давлетшин Р.Р.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: nefediev@yandex.ru

Ключевые слова: синтез, экстракция редкоземельных металлов, УФ-спектроскопия.

Редкоземельные металлы являются важными элементами для многих отраслей промышленности: электроника, производство магнитов, катализаторов и других продуктов. Однако, добыча этих металлов является дорогостоящим и экологически невыгодным процессом. В этом связи использование новых реагентов для экстракции редкоземельных металлов может представлять определенный интерес в решении проблемы их добычи.

Целью настоящей работы является синтез и исследование экстракционных свойств фосфорилированных производных 1,4-диаминобутана. Синтез осуществлялся в однореакторном режиме по реакции Кабачника-Филдса. Структура полученных соединений представлена ниже на рис.1.

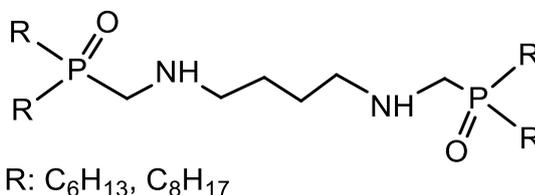


Рис. 1. Структура исследуемых экстрагентов

Показано, что в условиях жидкость-жидкостная экстракции в системе вода-бензол с использованием УФ/Вид-спектроскопии как метода детектирования происходит образование комплекса между полученными соединениями и ионами редкоземельных металлов. Методом ИК-спектроскопии показано участие фосфрильных и амино-групп в комплексобразовании.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

УДК 547.744

СИНТЕЗ НОВЫХ АММОНИЕВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ИЗАТИНА, СОДЕРЖАЩИХ КАРБОКСИЛАТНЫЙ ФРАГМЕНТ

Иванова К.А., Богданов А.В.

Россия, Казань, Казанский Федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: ivanovakristina02@mail.ru

Ключевые слова: изатин, соли аммония, биологическая активность.

Изатин (1*H*-индолин-2,3-дион) относится к классу гетероциклов природного происхождения, различные производные которого проявляют широкий спектр биологической активности: антибактериальную, противогрибковую, противовирусную, антиВИЧ и антитуберкулезную, противоопухолевую и др.

В рамках данной работы алкилированием *in situ* натриевых солей 5-замещенных изатинов нами были синтезированы и охарактеризованы новые этиловые эфиры изатин-1-илуксусной кислоты с последующим получением на их основе водорастворимых четвертичных аммониевых солей, содержащих либо жесткий гидрофильный пиридиниевый, либо лабильный липофильный триэтиламмониевый фрагмент. Все новые соединения были выделены в чистом виде непосредственно после выделения из реакционной массы без дополнительной очистки. Большинство соединений данного ряда представляют собой кристаллические вещества, пригодные для рентгеноструктурного анализа. По данным РСА подтверждается, что продукт α -присоединения. Все полученные соединения представляют интерес в плане проявления ими антиантропо- и антифитопатогенной активности с оценкой их гемолитического действия и влияния на систему гемостаза.

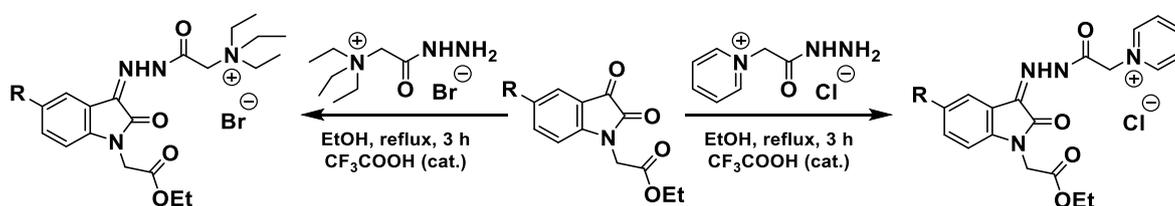


Рис. 1. Схема синтеза аммониевых изатин-3-ацилгидразонов

УДК 547.7

ВОДОРАСТВОРИМЫЕ СОЛИ БЕНЗОФУРОКСАНОВ, ЗАМЕЩЕННЫЕ АЛИФАТИЧЕСКИМИ И АРОМАТИЧЕСКИМИ АМИНАМИ

Искандеров Э.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: emilusername@gmail.com

Ключевые слова: бензофуроксан, амины, противораковая активность, фунгицидная активность, антибактериальные свойства, цитотоксичность, протравители семян.

Бензофуроксановая платформа отличается высокой биологической активностью[1]. Существенным недостатком бензофуроксанов является их малая растворимость в воде.

В ходе исследования были проведены реакции замещения 4,6-дихлор-5-нитробензофуроксана с различными аминами с последующим образованием водорастворимой соли (рис. 1).

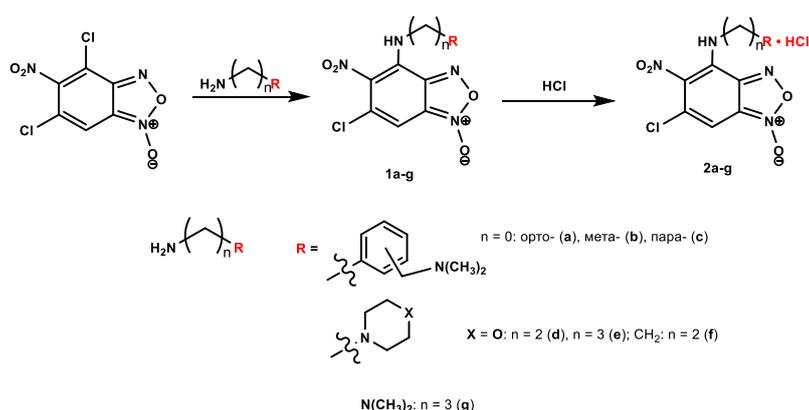


Рис. 1. Общая схема синтеза новых водорастворимых солей бензофуроксанов

Полученные соли были проверены в качестве протравителей семян и противораковых агентов. Так, установили, что соединения, содержащие морфолиновый или N-диметилпропиламиноновый фрагменты, проявили наибольшую цитотоксичность, обладая способностью ингибировать процесс гликолиза раковых клеток. Соединения при добавлении их к семенам растений (пшеница, люцерна, ячмень, рис, сорго) ускорили рост семян, а также снизили негативное влияние бактерий и других микроорганизмов.

Список литературы

1. Chugunova E.A., Anticancer activity of new benzofuroxan-imidazolone hybrids / E.A.Chugunova, A.V. Smolobochkin, A.S. Gazizov, A.R. Burirov, A.D. Voloshina, A.P. Lyubina, S.K. Amerhanova, T.A. Melnikova, A.I. Tulesinova, N.I. Akylbekov, N.A. Akhatayev, V.V. Syakaev // Mendeleev Commun. - 2021 - №31. - P. 865-866.

УДК 547.1'1

ПИРИДИНОВЫЕ АЛКАЛОИДЫ В СИНТЕЗЕ СОЛЕЙ ИЗОМЕРНЫХ ДИТИОФОСФОРНЫХ КИСЛОТ

Кобелева Е.С., Шильникова О.В., Низамов И.С., Низамов И.Д.

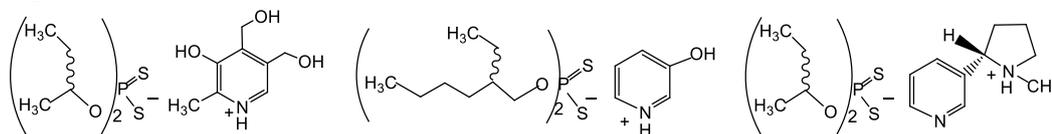
Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: k_kobeleva@mail.ru

Ключевые слова: рацемические спирты, алкалоиды, дитиофосфаты, антимикробная активность.

С целью разработки научных основ создания новых антимикробных препаратов ряд пиридиновых алкалоидов введен в реакции с изомерными дитиофосфорными кислотами на основе хиральных синтетических спиртов, среди которых можно отметить промышленно доступные рацемические бутанол-2 и 2-этилгексанол. Рацемический α -диэтилмалат, в молекуле которого гидроксильная группа остается свободной, в реакции с тетрафосфордекасульфидом образует О,О-ди[1,2-бис(этилкарбоксилат)этил- α -]дитиофосфорную кислоту в виде смеси диастереомеров. Полученные изомерные дитиофосфорные кислоты в реакциях с пиридоксином, 3-гидроксипиридином и (S)-(-)-никотином образуют пиридоксиний, 3-гидрокси- пиридиний и пирролидиний дитиофосфаты.



Гель-диффузионным методом в 1 %-ных растворах в ДМСО установлено, что пиридоксиниевые и 3-гидроксипиридиниевые соли дитиофосфорных кислот превосходят по бактерицидной активности (38-42 мм зоны задержки роста колоний бактерий) антибиотик цефазолин (25 мм) по отношению к *Vacillus cereus*.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

УДК 547.574.3+547.859+547.789.6

МЕТАНОЛИЗ 2-АРИЛМЕТИЛИДЕНОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАЗОЛО[3,2-*a*]ПИРИМИДИНА В УСЛОВИЯХ МИКРОВОЛНОВОЙ АКТИВАЦИИ

Кожихов А.А.¹, Агарков А.С.^{1,2}, Нефедова А.А.², Овсянников А.С.², Исламов Д.Р.^{1,2},
Соловьева С.Е.², Антипин И.С.¹

¹ Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan Federal University

² Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН

Russia, Kazan, A.E. Arbutov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of
Sciences

E-mail: andreykozhikhov2000@gmail.com

Ключевые слова: тиазоло[3,2-*a*]пиримидины, микроволновый синтез, нуклеофильное присоединение, внутримолекулярная перегруппировка.

Химия гетероциклических соединений - одно из важнейших направлений органической химии. К подобным структурам относятся производные 5*H*-тиазоло[3,2-*a*]пиримидинов, модификации которых в литературе основаны лишь на взаимодействии с достаточно сильными нуклеофильными реагентами [1]. При этом сведения о реакционной способности с *O*-нуклеофилами отсутствуют. Поэтому был применен один из эффективных нетрадиционных методов активации - микроволновое облучение [2]. Данная работа посвящена получению новых 2-арилметиленовых производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидина, а также их взаимодействию с метиловым спиртом в присутствии пиридина в условиях микроволновой активации [3].

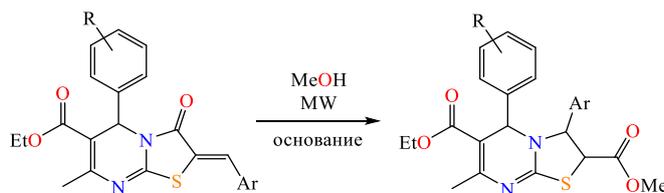


Рис. 1. Взаимодействие 2-арилметиленовых производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидин-2,3-дионов с метанолом в условиях микроволнового излучения

Список литературы.

1. Nagarajaiah, H.M.; Khazi, I.A.; Begum, N.S. J. Chem. Sci. 2015, 127(3), 467-479.
2. Fairoosa, J.; Saranya, S.; Radhika S. et al. ChemistrySelect. 2020, 5(17), 5180–5197.
3. Агарков, А.С.; Кожихов, А.А. и др. Докл. АН. 2022, 505, 50-57.

УДК 547.1

СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ФОСФОРИЛИРОВАННЫХ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ АММОНИЕВЫХ СОЛЕЙ

Кузнецов Н.О., Соловьева А.А., Давлетшин Р.Р.

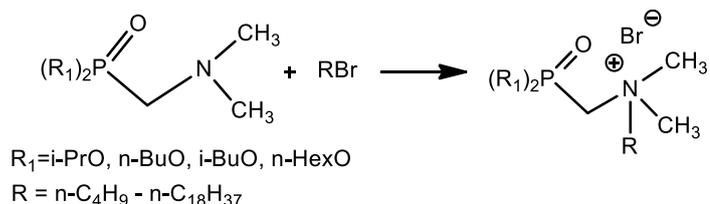
Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: Nikaifon@yandex.ru

Ключевые слова: синтез, биологическая активность, аминоксифонаты.

Нами была разработана двухстадийная методика синтеза фосфорилированных четвертичных аммониевых солей, содержащих *i*-пропильные, *n*-бутильные, *i*-бутильные, *n*-гексильные заместители у атома фосфора. Реакция протекала в течение 2 недель, без растворителя и при комнатной температуре, что позволяло получить наиболее чистые образцы целевого соединения.



В спектрах всех соединений можно отметить присутствие в реакционной смеси исходного аминоксифоната и целевых продуктов, а также примеси в области ~ 6 м.д., которая предположительно является цвиттер-ионным соединением. Продукты очищали методом жидкость-жидкостной экстракцией в системе 75% метанол/бензол, где целевые соединения преимущественно экстрагировались в водную фазу, а примеси оставались в бензоле. Для некоторых соединений получены данные по антимикробной активности

Таблица. Данные антимикробной активности соединений

Соединение	Величина зоны задержки роста, через 24 часа d (мм)				
	<i>E.coli</i>	<i>B. cereus</i>	<i>Ps. aeruginosa</i>	<i>S. aureus</i>	<i>Candida albicans</i>
2	17	24	9	28	18
3	23	30	15	32	25
4	18	23	16	24	22
5	12	15	11	16	15
6	-	-	-	7	7
7	-	-	-	-	-
Хлорид бензалкония ²	8	15	11	13	10
Нафтифин гидрохлорид ³	н/о	н/о	н/о	н/о	12

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»)

УДК 547.1

РЕАКЦИИ ЦИКЛИЧЕСКИХ Р(III)-ПРОИЗВОДНЫХ САЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ С ИМИНАМИ

Куприянова А.А., Ивкова Г.А., Миронов В.Ф.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

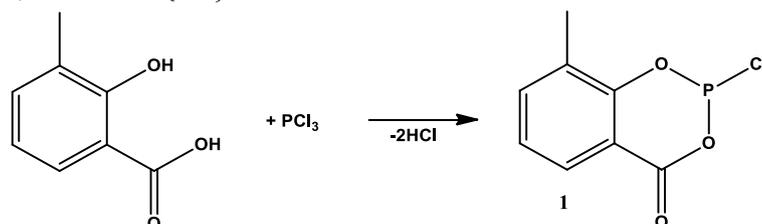
Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: delyakupriyanova@gmail.com

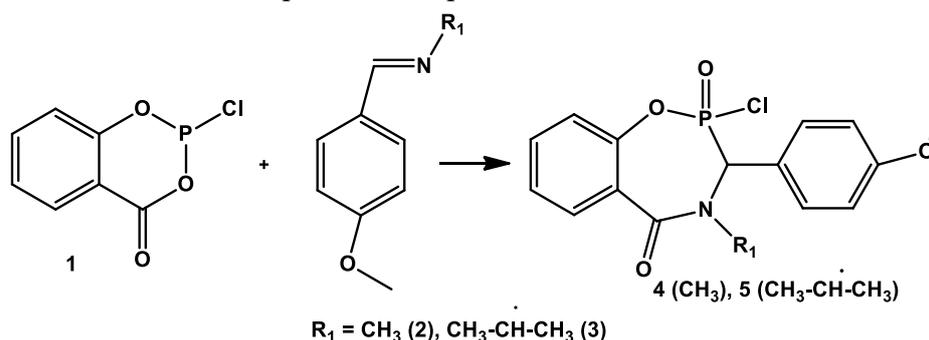
Ключевые слова: α -аминофосфонат, фосфорилированные производные гидроксикарбоновых кислот, имин, ЯМР ^{31}P спектроскопия.

Цель работы: разработка новых методов синтеза α -аминофосфонатов на основе реакций фосфорилированных производных гидроксикарбоновых кислот с иминами.

Нами был синтезирован 2-хлор-8-метил-бензо[*d*]-1,3,2-дифосфорин-4-он (1) из 2-гидрокси-3-метилсалициловой кислоты. Структура соединения подтверждена методами ЯМР ^{31}P , ИК, ЯМР ^1H , ^{13}C и $^{13}\text{C}\{-^1\text{H}\}$.



При взаимодействии фосфита (1) с иминами (2,3) нами установлено образование семичленных гетероциклов – аренофосфепинов (4,5). Прохождение реакций контролировалось методом ЯМР ^{31}P . Отличия в реакционной способности позволили нам высказать суждения о механизме протекания процесса.



$\text{R}_1 = \text{CH}_3$ (2), $\text{CH}_3\text{-CH-CH}_3$ (3)

Работа выполнена при поддержке Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

УДК 547.574.3+547.859+547.789.6

2-АРИЛГИДРАЗОНОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ТИАЗОЛО[3,2-*a*]ПИРИМИДИНА: СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И РЕАКЦИЯ ВОССТАНОВЛЕНИЯ

Мингажетдинова Д.О.¹, Агарков А.С.², Нефедова А.А.², Габитова Э.Р.², Литвинов И.А.², Соловьева С.Е.², Антипин И.С.¹

¹ Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan Federal University

² Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН

Russia, Kazan, A.E. Arbutov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences

E-mail: doming01@mail.ru

Ключевые слова: тиазоло[3,2-*a*]пиримидины, диазотирование, арилгидразоновые производные, геометрическая изомерия, восстановление.

Соединения, имеющие в своем составе тиазопиримидиновый каркас и арилгидразонный заместитель, являются перспективными структурными фрагментами в разработке новых лекарственных препаратов [1]. Данная работа посвящена синтезу и изучению структуры 2-арилгидразоновых производных тиазоло[3,2-*a*]пиримидина. Был обнаружен новый уникальным метод синтеза тиазоло[4,3-*a*]пиримидиновых производных (Рис. 1) [2,3].

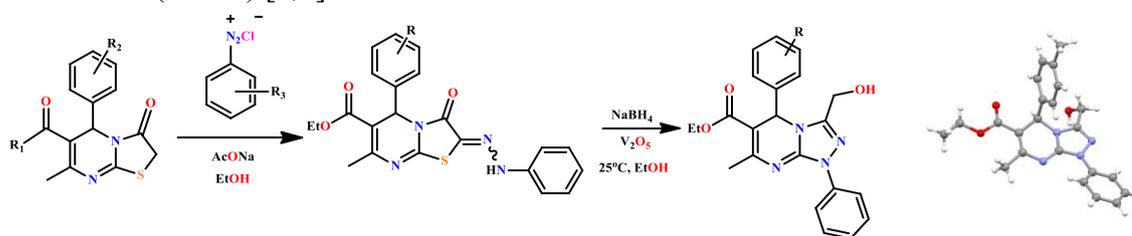


Рис. 1. Схема получения арилгидразонов тиазоло[3,2-*a*]пиримидина и их последующего восстановления и геометрия тиазопиримидина в кристаллической фазе

Список литературы.

1. Chen, L. et al. *ChemMedChem*. **2017**, 12, 1022-1032.
2. Agarkov, A.S. et al. *In Doklady Chemistry*. **2022**, 503(1), 45-50.
3. Lashmanova, E.A. et al. *Chemistry of Heterocyclic Compounds*. **2019**, 55, 1217-1221.

УДК 547.1

БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ФОСФОНИЕВЫХ СОЛЕЙ, ПОЛУЧЕННЫХ ПРИ РЕАКЦИИ ТРЕТИЧНЫХ ФОСФИНОВ С АМИДАМИ АКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ

Нафикова А.В., Романов С.Р., Галкина И.В., Бахтиярова Ю.В.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: nafikova.2001@bk.ru

Ключевые слова: фосфониевые соли, биологическая активность.

Были проведены реакции третичных фосфинов с амидами акриловой кислоты. Реакции проводили в ацетонитриле с добавлением избытка концентрированной хлороводородной кислоты при нагревании (Схема 1.).

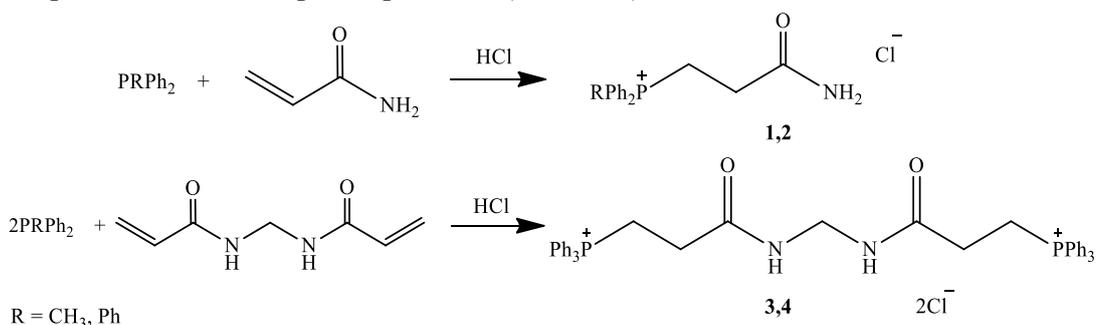


Схема 1.

Таблица 1.

Антимикробная активность соединений 1-3 (диффузионный метод, 1 %, EtOH)

№	Величина зоны задержки роста, d (мм)				
	Escherichia coli	Bacillus cereus	Pseudomonas aeruginosa	Staphylococcus aureus	Candida Albicans
1.	10	11	Нет роста	Нет роста	Нет роста
2.	10	-	-	8	8
3.	-	13	-	13	13
Хлоргексидин	11	8	9	17	15

Список литературы

1. Vadim V. Ermolaev. Sterically Hindered Quaternary Phosphonium Salts (QPSs): Antimicrobial Activity and Hemolytic and Cytotoxic Properties / Vasili A. Miluykov, Anna P. Lyubina, Syumbelya K. Amerhanova, Natalia V. Kulik, Alexandra D. Voloshina, Valentine P. Ananikov // Int. J. Mol. Sci. – 2022.– V. 23 (1). – P. 86.

УДК 547.1

СИНТЕЗ И СТРУКТУРА НОВЫХ α -ГИДРОКСИФИНОКСИДОВ

Осогосток А.Р., Давлетшин, Р.Р.

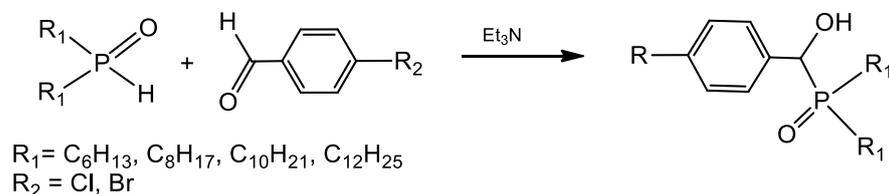
Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: osogostok.sasha@mail.ru

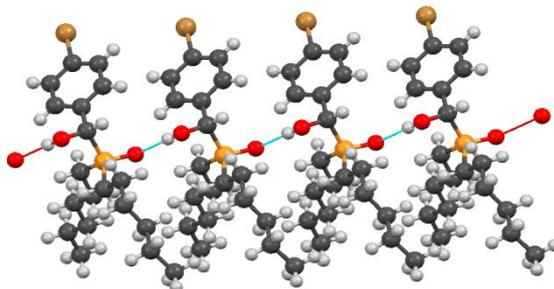
Ключевые слова: синтез, α -гидроксифосфиноксиды.

По реакции Абрамова нами была получена серия новых α -гидроксифиноксидов, содержащих липофильные заместители у атома фосфора.



Синтез проводили по двум методикам: 1) классический органический синтез в бензоле с использованием триэтиламина в качестве катализатора; 2) синтез в условиях микроволнового излучения в бензоле при температуре 110°C в присутствии триэтиламина как катализатора. Полученные результаты свидетельствуют о том, что в условиях микроволнового синтеза реакции протекают в течение 20 мин с хорошим выходом (более 80%).

Структура всех соединений доказана физическими методами исследования. Ниже представлена молекулярная структура ((4-бромфенил)(гидрокси)метил)дигексилфосфиноксида, полученная методом рентгеноструктурного анализа.



Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

УДК 547.3

СИНТЕЗ И ЦИТОТОКСИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОСНОВАНИЯ МАННИХА НА ОСНОВЕ α -ТЕРПЕНИОЛА

Охиров Ш.М.¹, Ишметова Д.В.², Латыпова Э.Р.¹, Вахитов В.А.², Талипов Р.Ф.¹

¹ Россия, Уфа, Уфимский университет науки и технологии

Russia, Ufa, Ufa University of Science and Technology

² Россия, Уфа, Институт биохимии и генетики Российской академии наук

Russia, Ufa, Institute of Biochemistry and Genetics of the Russian Academy of Sciences

Email: okhirov1999@mail.ru

Ключевые слова: α -терпениол, реакция Манниха.

Ранее с целью получения азотсодержащих производных на основе природных соединений была проведена конденсация монотерпеноида α -терпениола **1** по Манниху с диэтиламином в присутствии формальдегида. В результате получили диизопропил{[1-метил-1-(4-метилциклогекс-3-ен-1-ил)этокси] метил}амин **2** (рис. 1), который, согласно программе Pass Online, может проявлять противоопухлевые свойства.

Исследование цитотоксических свойств синтезированного соединения осуществляли путем анализа его влияния на жизнеспособность клеток линии НЕК293 (условно-нормальные эмбриональные клетки почки человека), НерG2 (гепатоцеллюлярная карцинома человека), МСF-7 (аденокарцинома молочной железы человека), А549 (карцинома легкого человека), НТС-116 (аденокарцинома толстого кишечника) с помощью МТТ-метода *in vitro*. Клетки инкубировали с веществом в течение 48 часов. Концентрация вещества составила 1, 10 и 100 мкМ. В результате проведенных исследований установлено, что соединение диизопропил{[1-метил-1-(4-метилциклогекс-3-ен-1-ил)этокси] метил}амин не проявляет цитотоксического действия в отношении каждой из указанных клеточных линий.

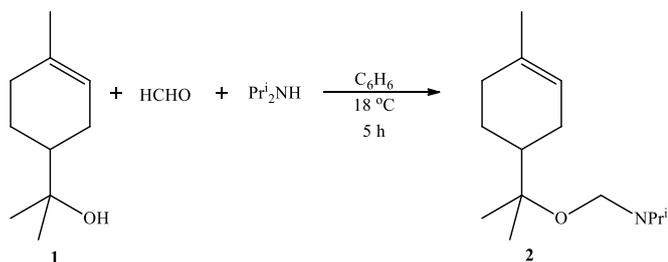


Рис. 1. Схема синтеза диизопропил{[1-метил-1-(4-метилциклогекс-3-ен-1-ил)этокси] метил}амина.

УДК 544.169

АВТОМАТИЧЕСКОЕ ИЗВЛЕЧЕНИЕ РЕАКЦИОННЫХ ПРАВИЛ ДЛЯ ИНСТРУМЕНТОВ КОМПЬЮТЕРНОГО ПЛАНИРОВАНИЯ СИНТЕЗА

Пинигина А.Е., Ахметшин Т.Н., Маджидов Т.И.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: ann.989@mail.ru

Ключевые слова: компьютерные методы планирования синтеза, реакционные правила, фильтрация реакционных данных.

Большинство программ, реализующих компьютерные методы планирования синтеза, основаны на использовании реакционных правил – схем, отражающих способ перехода реагентов в продукты. Наиболее перспективным является их автоматическое извлечение из баз данных реакций. На данный момент уже существуют инструменты, позволяющие извлекать реакционные правила различных типов [1], но ни один из них не является достаточно гибким, а также все еще существует проблема формирования некорректных правил.

В данной работе был сделан инструмент для чистки реакционных данных и автоматического извлечения различных типов реакционных правил. С помощью созданной программы была проведена фильтрация реакций из базы данных USPTO [2], содержащей 1,31 млн. реакций, и получен набор из 1 млн. реакций. Затем из этих двух наборов реакций были извлечены по 6 наборов реакционных правил (с расширением реакционного центра до заданного числа атомов, с включением функциональных групп и колец в реакционный центр). Исходный USPTO содержит значительно больше правил, чем отфильтрованный USPTO. Также было показано, что отфильтрованные реакции, дают преимущественно специфичные правила. Таким образом предложенный метод фильтрации эффективен и сокращает число специфичных и некорректных реакционных правил, что важно для работы инструментов компьютерного планирования синтеза.

Список литературы

1. Coley, C.W. RDChiral: An RDKit Wrapper for Handling Stereochemistry in Retrosynthetic Template Extraction and Application / C.W. Coley, W.H. Green, K.F. Jensen // Journal of chemical information and modeling. – 2019. – Vol.59, №6. – P.2529–2537.
2. Reaction Data Curation I: Chemical Structures and Transformations Standardization / T.R. Gimadiev, A. Lin, V.A. Afonina [et al.] // Molecular Informatics. – 2021. – Vol.40, №12. – P.e2100119.

УДК 547.1

СИНТЕЗ И АНТИМИКРОБНАЯ АКТИВНОСТЬ ЛИПОФИЛЬНЫХ ФОСФОРИЛИРОВАННЫХ БЕТАИНОВ

Санатов И.Р., Ермакова Е.А., Давлетшин Р.Р., Давлетшина Н.В.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

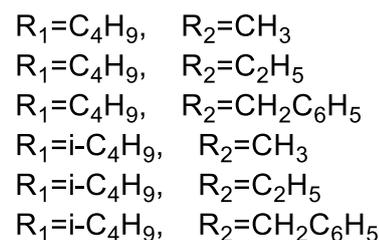
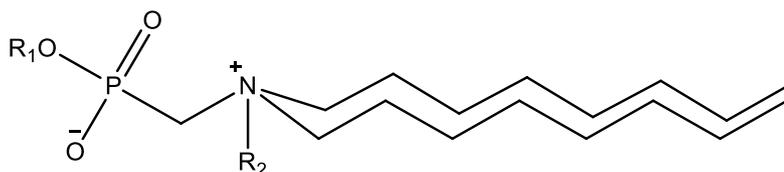
Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: gozerak@gmail.com

Ключевые слова: синтез, цвиттер-ион, антимикробная активность, аминокосфабетаины.

Аминокосфабетаины представляют собой цвиттер-ионные соединения, которые в последние годы привлекают внимание ученых, благодаря уникальным свойствам и широкой возможностью применения [1].

Целью данной работы было синтез и изучение антимикробных свойств липофильных фосфорилированных бетаинов структуры:



Фосфорилированные бетаины получали по трехстадийной методике синтеза: по реакции Кабачника-Филдса получены аминокосфонаты, которые подвергались щелочному гидролизу и последующей реакции алкилирования [2]. Структура полученных соединений описана с помощью комплекса спектральных методов исследования.

Все соединения проявили высокую антибактериальную активность в отношении штаммов бактерий *B. cereus* и *S. aureus*, которая выше, чем у контрольных соединений: хлоргексидина, мирамистина и бензалкония хлорида.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 22-23-00335, <https://rscf.ru/project/22-23-00335/>

Список литературы

1. A. Wu, Y. Gao, L. Zheng, The Royal Society of Chemistry. 21 (2019) 4290–4312.
2. N.V. Davletshina, E.A. Ermakova, D.R. Dolgova, R.R. Davletshina, D.R. Sultanova, I.I. Stoikov, R. A. Cherkasov. Russian Journal of General Chemistry. 92 (2022) 2653-2658

УДК 547.1

СИНТЕЗ ТЕТРАФОСФОРИЛИРОВАННЫХ ДИАМИНОВ

Сардарян А.М., Давлетшин Р.Р.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

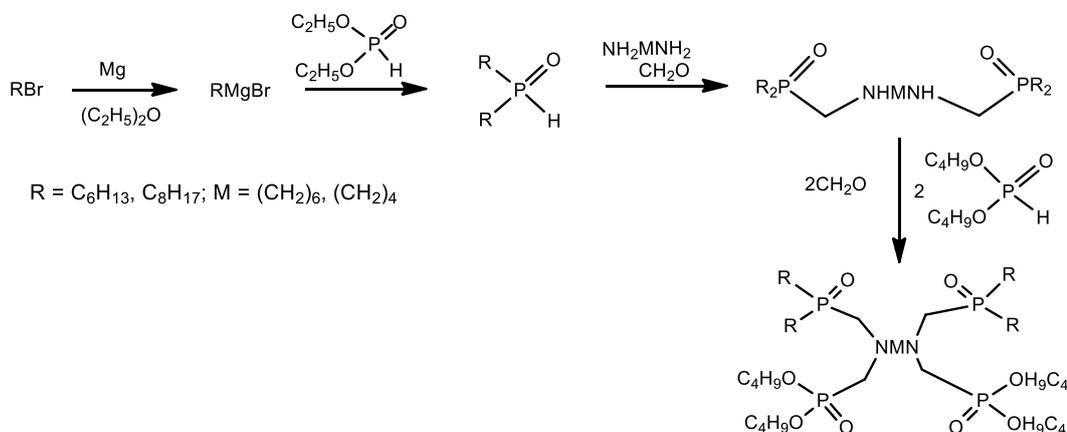
Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: hayarpisardaryan@yandex.ru

Ключевые слова: аминоксфорильные соединения, самосборка, мицеллообразование.

Аминоксфорильные соединения представляют собой класс соединений, сочетающих в себе структурные признаки амфифильных веществ – с одной стороны располагается гидрофильная группа (фосфатная), с другой - гидрофобная алкильная группа. Варьируя гидрофильно-липофильный баланс подобных соединений можно создавать структуры обладающие поверхностно-активными, комплексообразующими, экстракционными и биологически-активными свойствами.

Целью настоящей работы является синтез тетрафосфорилированных диаминов на основе гексаметилендиамина и тетраметилендиамина. Для получения основных продуктов использовалась реакция Кабачника-Филдса в одnoreакторном режиме. Синтез проводили по следующей схеме:



Были оптимизированы способы получения тетрафосфорилированных диаминов и разработаны методики их выделения и очистки. Соединения были выделены в чистом виде и охарактеризованы физическими методами исследования: ИК-спектроскопией, ЯМР ³¹P, ¹H и ¹³C спектроскопией.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

УДК 547.1

**РЕАКЦИЯ БИС(2,2,3,3-ПЕНТАФТОРПРОПИЛОВОГО) ЭФИРА
ПЕНТАФТОРБЕНЗИЛИДЕНМАЛОНОВОЙ КИСЛОТЫ С 2,3-ФЕНИЛ-БЕНЗО[d]-
1,3,2-ОКСАЗАФОСФОРИН-4-ОНОМ**

Сафарова Л.И., Ивкова Г.А.

Россия, Казань, Казанский Федеральный Университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

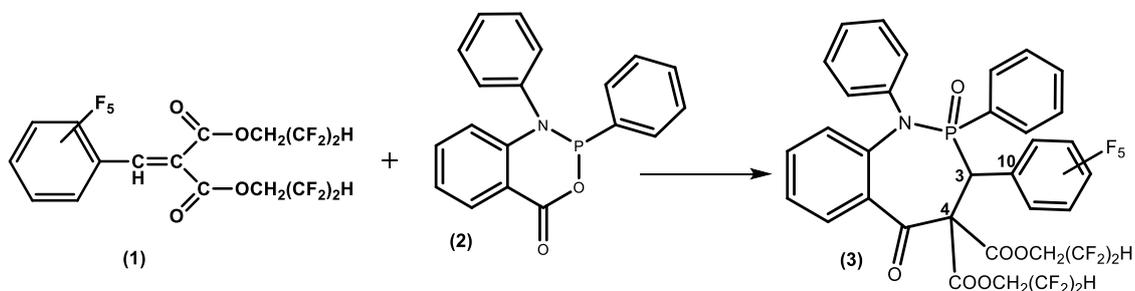
E-mail: safarlenova102@mail.ru

Ключевые слова: циклический фосфит, гидроксикарбоновая кислота, бензилиденмалоновая кислота, ЯМР ^{31}P спектроскопия.

К настоящему времени накоплен обширный материал по изучению свойств циклических фосфитов на основе гидроксикарбоновых кислот [1].

Цель работы – исследование особенностей реакций циклических фосфорилированных производных гидрокси-ароматических кислот с производным эфира бензилиденмалоновой кислоты.

Нами была проведена реакция эфира бензилиденмалоновой кислоты (1), с фенилантранилфосфонитом (2). Ход реакции контролируется методом ЯМР ^{31}P спектроскопии. Реакция протекает достаточно медленно, но стерео- и региоселективно.



Работа выполнена за счет средств субсидии, предоставленной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности, №FZSM-2023-0020

Список литературы

1. Mironov, V.F. Cycloexpansion reactions in benzo[e]-1,3,2-diheterophosphorin-4-ones and 4-oxo-1,3,2-dioxaphospholanes / V.F. Mironov, L. M. Abdrakhmanova, M. N. Dimukhametov, L.M. Burnaeva, G.A. Ivkova, I.V. Konvalova. // Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Related Elements.-2011.- V. 186, № 4.- P. 742-753

УДК 547.1

СИНТЕЗ И АНТИМИКРОБНАЯ АКТИВНОСТЬ О,О- ДИАЛКИЛ(АРИЛ)ГИДРОКСИМЕТИЛФОСФОНАТОВ

Седов А.Н., Соловьева А.А., Давлетшин Р.Р.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: sedandrey1998@gmail.com

Ключевые слова: синтез, биологическая активность, α -гидроксифосфонаты.

Известно, что α -гидроксифосфонаты проявляют широкий спектр биологической активности: антибактериальную, противовирусную, и противораковую активность. В настоящей работе по реакции Абрамова получена, выделена и охарактеризована физическими методами исследования серия О,О-диалкил((п-бромфенил)гидроксиметил)фосфонатов - Et(I), i-Pr(II), Bu(III), i-Bu(IV), Hex(V) и О,О-диалкил((п-хлорфенил)гидроксиметил)фосфонатов - Et(VI), i-Pr(VII), Bu(VIII), i-Bu (IX), Hex(X). Данные по антимикробной активности продуктов (I-X) приведены в таблице:

Таблица 1.

Биологическая активность α -гидроксифосфонатов (I-X).

	Величина зоны задержки роста, d (мм)									
	I	II	III	IV	V	VI	VII	VIII	IX	X
<i>E. coli</i>	-	-	-	11	-	-	-	-	-	-
<i>B.cereus</i>	-	10	13	14	10	-	8	14	15	-
<i>Ps.aeruginosa</i>	-	-	-	-	-	-	-	-	-	-
<i>S. aureus</i>	8	11	12	15	8	-	7	10	11	-
<i>Candida albicans</i>	13	12	13	16	-	-	7	13	13	-

Установлено, что соединения, содержащие атом брома в пара-положении (I-V) проявляют значительно большую активность по отношению к патогенным микроорганизмам, чем их хлорсодержащие аналоги (VI-X).

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»)

УДК 547

СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 3-АРИЛИДЕН-1-ПИРРОЛИДИНА, ОБЛАДАЮЩИХ ЦИТОТОКСИЧНОСТЬЮ ПО ОТОНОШЕНИЮ К ОПУХОЛЕВЫМ КЛЕТОЧНЫМ ЛИНИЯМ ЧЕЛОВЕКА

Сидлярук Н.А.¹, Дикушин Д.А.¹, Смолобочкин А.В.², Ризбаева Т.С.², Газизов А.С.²,
Бурилов А.Р.², Пудовик М.А.²

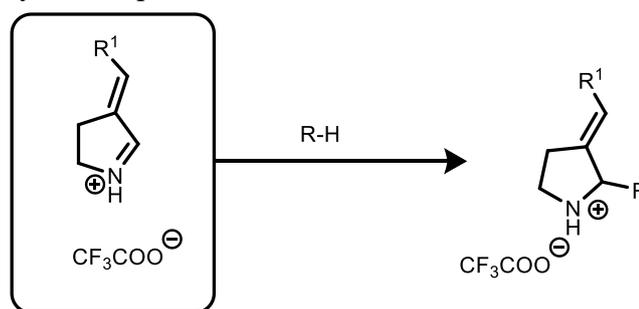
¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan federal university

²Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
Russia, Kazan, A.E. Arbuzov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences
Email: sidlyaruk@inbox.ru

Ключевые слова: пирролидин, клеточные линии, противоопухолевая активность.

Производные пирролидина удостоены пристального внимания исследователей благодаря высокой биологической активности и широкими возможностями использования в медицинской практике. Несомненно, повышенный интерес связан со способностью пирролидинов проявлять противоопухолевую активность. Например, Нафоксидин и Лазофоксифен, используются для лечения рака молочной железы, остеопороза. Типирацил – лекарство для лечения колоректального рака. В 2019 году одобрен для лечения некоторых видов рака молочной железы препарат Алпелисиб. Таким образом, поиск новых путей синтеза замещённых производных пирролидина является важной и актуальной задачей.

Предложенный метод основан на реакции производных 3-арилиден-1-пирролинов с C-нуклеофилами. К преимуществам метода можно отнести высокий выход целевых пирролидинов, мягкие условия реакции.



УДК 547.1'1

ЦИНХОНОВЫЕ АЛКАЛОИДЫ В СИНТЕЗЕ ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЛЕЙ ДИТИОФОСФОНОВЫХ КИСЛОТ НА ОСНОВЕ РАЦЕМИЧЕСКИХ СПИРТОВ

Тутуев М.С., Якимов В.Ю., Низамов И.С., Низамов И.Д.

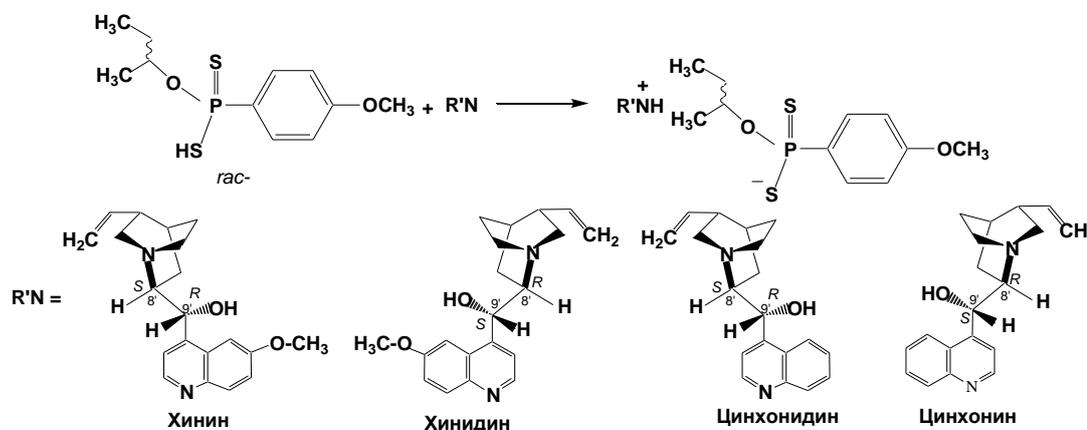
Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: mxim.tutuev@yandex.ru

Ключевые слова: алкалоиды, дитиофосфоновые кислоты, оптическая активность, антимикробная активность.

Дитиофосфоновые кислоты и их соли с несколькими асимметрическими центрами перспективны для создания новых антимикробных препаратов. Для их синтеза предложено использовать реагент Лоуссона и его гомологи, а также такие рацемические спирты, как бутанол-2, 2-этилгексанол и диэтилмалат. На их основе синтезированы рацемические дитиофосфоновые кислоты, которые в реакциях с *8S,9R*-хинином, *8R,9S*-хинидином, *8S,9R*-цинхонином и *8R,9S*-цинхонином образуют оптически активные хинуклидиний дитиофосфонаты, обладающие высокой активностью в отношении *Bacillus cereus* и *Candida albicans*.



Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

УДК 547.841+54.057

НОВЫЙ ПОДХОД К УВЕЛИЧЕНИЮ СЕЛЕКТИВНОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ 4,4-ДИМЕТИЛДИОКСАНА-1,3 – ПОЛУПРОДУКТА В СИНТЕЗЕ ИЗОПРЕНА

Тухватшин В.С., Талипов Р.Ф.

Россия, Уфа, Уфимский университет науки и технологий

Russia, Ufa, Ufa university of science and technology

E-mail: vadimtukhvatshin@yandex.ru

Ключевые слова: изопрен, молекулярный импринтинг.

На сегодняшний день основным методом получения изопрена является диоксанный метод, основанный на термokatалитическом разложении 4,4-диметилдиоксана-1,3 (ДМД), получаемый из формальдегида и 2-метилпропена. Достоинством данного способа является низкая энергоемкость. Однако указанный способ имеет существенный недостаток - наряду с целевым ДМД наблюдается образование побочных продуктов (пираны, фураны) до 30% мас. [1, с. 136]. Нами предлагается новый подход к повышению селективности образования ДМД, основанный на сочетании основных взаимодополняющих факторов: образовании 1,3-диоксанов с участием олигомеров формальдегида через циклическое переходное состояние, возможности применения принципов молекулярного импринтинга и конфигурационного подобия переходного состояния [2, с. 1005]. Ранее с использованием квантово-химических методов было показано [3, с. 47], что максимум стабилизации переходных состояний конкурирующих реакций наблюдается при различных значениях диаметров полости углеродных нанотрубок (9,4 Å в случае 1,3-диоксанов, 10,9 Å - гидрированных пиранов). Полученные зависимости экспериментально подтверждены исследованием формальной кинетики взаимодействия 2-метилпропена с формальдегидом в присутствии синтетических цеолитов, углеродных нанотрубок и стеклоуглерода.

Список литературы

1. Платэ, Н.А., Сливинский Е.В. Основы химии и технологии мономеров / Н.А.Платэ. – Москва: Издательство Наука, 2002. - 696с.
2. Лисичкин Г.В., Крутяков Ю.А. Материалы с молекулярными отпечатками: синтез, свойства, применение / Г.В.Лисичкин // Успехи химии. - 2006. - Т. 75, №10 (75). - С. 998-1017.
3. Vakulin I. V., Talipov R. F. Theoretical investigation of the role of formaldehyde dimers in the Prins reaction // Reaction Kinetics, Mechanisms and Catalysis. 2013. V. 110. P. 41-52.

УДК 544.4

КИНЕТИКА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АКРИЛОНИТРИЛА И ПИПЕРИЛЕНА В ПРИСУТСТВИИ СИНТЕТИЧЕСКОГО ЦЕОЛИТ CaX

Фахретдинов Д.Ш., Якупов И.Ш., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф.

Россия, Уфа, Уфимский университет науки и технологии

Russia, Ufa, Ufa University of Science and Technology

Email: dfahr9@mail.ru

Ключевые слова: Реакция Дильса-Альдера, синтетические цеолиты.

В ходе исследований возможности управления скоростью перициклических реакций введением пористых материалов нами было проведено изучение кинетики реакции Дильса-Альдера с участием акрилонитрила (АН) и пиперилена (ПП) в присутствии цеолита марки CaX. Реакцию проводили в присутствии 5% масс.цеолита CaX при 140 °С в запаянных ампулах. Расход АН при образовании карбонитрила определяли хроматографическим методом (рис. 1).

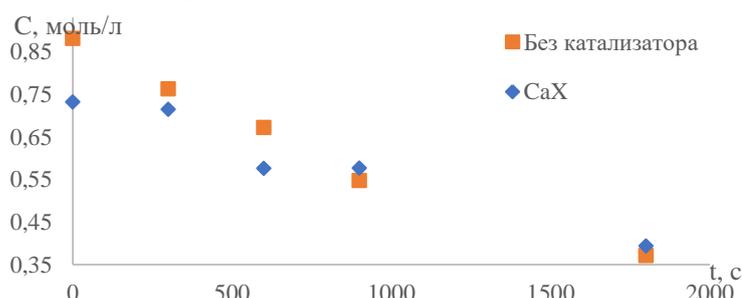


Рис. 1. Кинетическая кривая расхода АН (рис. 1) при конденсации АН и ПП без катализатора и в присутствии CaX при температуре 140 °С

Установлено, что кинетическая кривая расходования АН при конденсации с ПП в присутствии цеолита CaX удовлетворительно ($R^2 = 0.98$) линеаризуются в координатах $\ln C - t$, что свидетельствует о первом порядке реакции по АН. Рассчитанные значения констант скоростей (табл.1) расходования АН при взаимодействии АН и ПП указывают на то, что использование цеолита CaX в выше указанной реакции ведет к приросту скорости расходования АН.

Таблица 1

Значения констант скоростей расходования АН

№ п/п	$k \cdot 10^{-4} \text{ c}^{-1}$
Без катализатора	$3,77 \pm 0,05$
CaX	$4,63 \pm 0,03$

УДК 547.72:547.279.53

ХИРАЛЬНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ 2(5*H*)-ФУРАНОНА, СОДЕРЖАЩИЕ ФРАГМЕНТЫ 2-МЕРКАПТОЭТАНОЛА И МОНОТЕРПЕНОВЫХ СПИРТОВ

Хабибуллина А.М., Раббаниева Э.С., Хабибрахманова А.М., Курбангалиева А.Р.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: AMKhabibullina@stud.kpfu.ru

Ключевые слова: 2(5*H*)-фураноны, γ -лактоны, *S*-гетероциклы, тиоэфиры, сульфоны, оптическая активность.

Данная работа посвящена разработке методов синтеза, изучению строения и биологически активных свойств новых оптически чистых гетероциклов на основе 5-гидроксифуранонов, 2-меркаптоэтанола и терпеновых спиртов.

На первом этапе в реакциях 3,4-дигалоген-2(5*H*)-фуранонов с *l*-менолом и *l*-борнеолом в условиях кислотного катализа получены 5-(*l*-ментилокси)- и 5-(*l*-борнилокси)-2(5*H*)-фураноны в виде смесей двух диастереомеров в соотношении 1 : 1, различающихся конфигурацией атома углерода C⁵ лактонного цикла. Далее в молекулы выделенных индивидуальных (*S*)-стереоизомеров был введен фрагмент 2-меркаптоэтанола в присутствии триэтиламина. В результате получены новые оптически активные 4-сульфанилпроизводные 2(5*H*)-фуранона. Целевые сульфоны в виде бесцветных маслообразных веществ синтезировали путем окисления тиоэфиров пероксидом водорода в уксусной кислоте или *m*-хлорнадбензойной кислотой. Строение новых гетероциклов охарактеризовано методами спектроскопии ИК и ЯМР, состав подтвержден данными метода масс-спектрометрии высокого разрешения.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности (проект № FZSM-2023-0018).

УДК 547.1'1

ХИРАЛЬНЫЕ ПИРИДИНИЙ ДИТИОФOSFONАТЫ НА ОСНОВЕ МОНОТЕРПЕНОВЫХ СПИРТОВ

Чудаков Д.А., Яковлев А.А., Низамов И.С., Низамов И.Д.

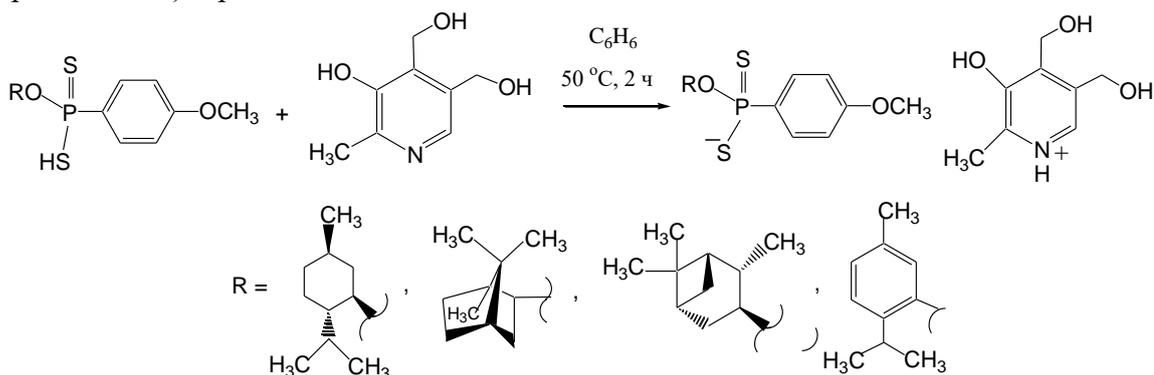
Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: danya.chudakov.2001@mail.ru

Ключевые слова: монотерпены, пиридиновые алкалоиды, дитиофосфонаты, хиральность, антимикробная активность.

Полученные из монотерпеновых спиртов оптически активные дитиофосфоновые кислоты, их соли и эфиры служат основой для создания новых антимикробных препаратов. С целью синтеза хиральных солей дитиофосфоновых кислот в данной работе использованы пиридиновые алкалоиды, включая пиридоксин, его семичленный циклический ацетонид, (*S*)-(-)-никотин, а также 3-гидроксипиридин и 3-(гидроксиметил)пиридин.



Гель-диффузионным методом в 1 %-ных растворах в диметилсульфоксиде установлена высокая бактерицидная активность пиридоксиний дитиофосфонатов в отношении *Bacillus cereus* (с зоной подавления роста микроорганизмов 26-28 мм).

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

УДК 542.97:546.98

ФОСФИН-КАТАЛИЗИРУЕМЫЙ СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ ОКСИНДОЛА С α -МЕТИЛЕНЛАКТОНАМИ

Шабанов А.А., Салин А.В.

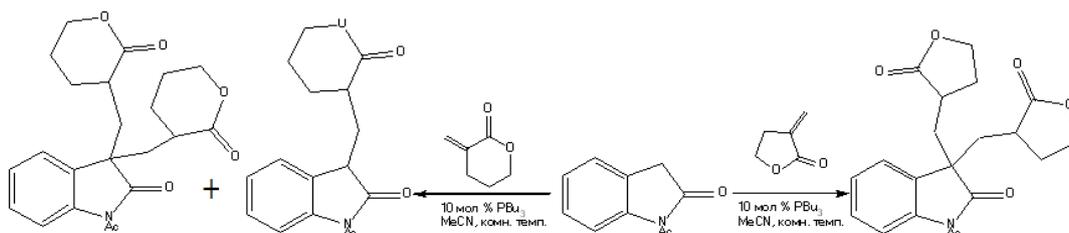
Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: grindaman@mail.ru

Ключевые слова: органокатализ, третичные фосфины, оксиндол, арглабин.

Производные оксиндола привлекают большое внимание, поскольку данный фрагмент присутствует в структуре многих природных и синтетических соединений, обладающих биологической активностью [1, 2]. В настоящей работе впервые осуществлен синтез производных оксиндола и *N*-ацетилоксиндола на основе α -метилена- γ -бутиролактона, α -метилена- δ -валеролактона и арглабина.



Установлено, что трибутилфосфин является эффективным катализатором данных реакций. *N*-Ацетилоксиндол в реакции с пятичленными лактонами дает исключительно продукты бис-присоединения, а в реакции с шестичленным лактоном – смесь продуктов моно- и бис-присоединения с доминированием последнего. 2-Оксиндол ведёт себя как *S,N*-нуклеофил, давая триалкилированные продукты. Реакции с арглабином протекают диастереоселективно без эпимеризации возникающих стереоцентров. Продукты выделены с помощью колоночной хроматографии и идентифицированы с помощью ЯМР-, ИК-спектроскопии, масс-спектрометрии высокого разрешения и РСА.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ (проект № 23-23-00029).

Список литературы

1. Galliford C. V. PyrrolidinyI-spirooxindole natural products as inspirations for the development of potential therapeutic agents / C. V. Galliford, K. A. Scheidt // *Angew. Chem. Int. Ed.* – 2007, V. 46. – P. 8748–8758.
2. Trost B. M. Asymmetric syntheses of oxindole and indole spirocyclic alkaloid natural products / B. M. Trost, M. K. Brennan // *Synthesis* – 2009, V. 2009. – P. 3003–3025.

УДК 547.1'1

РЕАКЦИИ АЛКИЛИРОВАНИЯ ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ БЕТАИНОВ

Шибаетова К.О., Романов С.Р., Галкина И.В., Бахтиярова Ю.В.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: shikaol@yandex.ru

Ключевые слова: элементоорганические бетаины, арсенобетаины, фосфобетаины, аминокислоты, алкилирование

В литературе представлено несколько методов синтеза четвертичных фосфониевых солей из различных реагентов при различных условиях, однако одной из наиболее интересных методик представляется получение путем алкилирования соответствующих бетаинов, так как механизм протекания данной реакции зависит от строения исходного бетаина.

Целью данной работы было установить влияние гетероатома в алкилируемом бетаине на механизм протекания реакции.

На первом этапе нами была разработана простая методика получения фосфониевых солей путем взаимодействия карбоксилатных фосфобетаинов со спиртами с различными углеводородными фрагментами в качестве алкилирующего агента (при этом $R = Me, i-Pr$), а также с добавлением небольшого количества соляной кислоты.

В продолжение полученных результатов были проведены реакции в аналогичных условиях, но в качестве исходных реагентов были взяты арсенобетаин и аминокислота.

Полученные соединения были выделены, очищены и описаны с помощью комплекса спектральных методов (ИК, ЯМР 1H , $^{31}P\{^1H\}$, $^{13}C\{^1H\}$).

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»)

УДК 541.14+547.551.2

АНТИОКИСЛИТЕЛЬНАЯ АКТИВНОСТЬ ЛИМОННОЙ, АСКОРБИНОВОЙ КИСЛОТ И ИХ СМЕСИ

Шумакова А.Е., Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н.

Россия, Уфа, Уфимский университет науки и технологий

Russia, Ufa, Ufa University of Science and Technology

E-mail: Garifa@inbox.ru

Ключевые слова: ингибиторы окисления, константа скорости реакции, синергизм действия ингибиторов окисления.

Лимонная и аскорбиновая кислоты являются основными компонентами сока цитрусовых плодов, что и обеспечивает их полезные свойства. Как добавки они нашли широкое применение в косметической и пищевой промышленности. Аскорбиновая кислота является незаменимым витамином С.

Целью нашей работы является исследование антиокислительных свойств лимонной и аскорбиновой кислот, а также их смеси. Антиокислительную активность кислот и их смеси тестировали на модельной реакции окисления этилбензола. Скорость процесса окисления модельного субстрата этилбензола измеряли на сверхчувствительной манометрической дифференциальной установке. По данным кинетических кривых вычислили скорость поглощения кислорода при окислении этилбензола без добавок и с добавками исследуемых кислот. Установлено, что добавки кислот приводят к снижению скорости поглощения кислорода. Эффект снижения скорости окисления этилбензола зависит от концентрации кислоты в окисляющейся системе. В присутствии добавок кислот в системе сохраняются цепи окисления, что позволило вычислить эффективную константу скорости реакции пероксильного радикала этилбензола с молекулой исследованной кислоты. Константа скорости ингибирования лимонной кислотой в 2 раза больше, чем аскорбиновой.

Следующим этапом исследований является изучение влияния совместных добавок лимонной и аскорбиновой кислот на окисление этилбензола. В этих опытах суммарная концентрация обеих кислот в окисляющейся системе оставалась постоянной, меняли их соотношения. Смесь изученных кислот в соотношении 1:1 снижает скорость окисления этилбензола в 2 раза сильнее, чем ингибирование кислотами врозь – проявляется синергический эффект их совместного действия. Наличие эффекта синергизма для лимонной и аскоорбиновой кислот позволяет снижать их добавки в продукты пищевой и косметической промышленности.

УДК 547-31/-39+547.721/.729+547.863.19+547-304.7

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА КРЕМНИЕВОГО ЭФИРА ХИНОКСАЛИНОВОГО Д-П-А ХРОМОФОРА

Шустиков А.А., Калинин А.А., Гайсин А.И., Шарипова А.В., Шмелев А.Г., Вахонина Т.А., Балакина М.Ю.

Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН

Russia, Kazan, A.E. Arbuzov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences

E-mail: shuustikov@gmail.com

Ключевые слова: НЛО свойства, хромофор, палладий, оксид селена (IV), тетрагидрохинолин, реакция Кнёвенагеля, Хека, Виттига, Вильсмейера-Хаака.

Мы синтезировали новый Д-π-А хромофор из трех структурных ключевых соединений: неопределенного соединения на основе тетрагидрохинолинового гетероцикла с объемным заместителем при атоме азота, производного хиноксалинового альдегида, а также TCF_{PhCy} – трицианосодержащего акцептора электронной плотности (Схема 1).

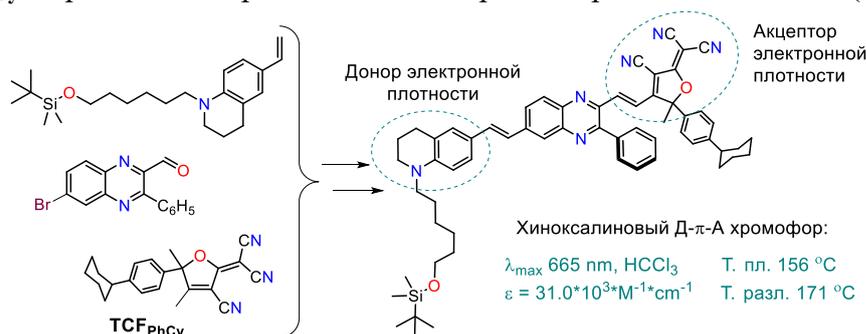


Схема 1. Образование Д-π-А хромофора

Для изучения нелинейно-оптической (НЛО) активности был приготовлен композиционный материал (тонкая пленка) с 25 масс.% содержанием хромофора в ПММА. Методом генерации второй гармоники с применением фемтосекундного лазерного излучения ($\lambda=1028$ нм) был определен НЛО коэффициент, d_{33} , который составил 23 пм/В [1].

Работа выполнена при поддержке Российского научного фонда (проект № 21-13-00206)

Список литературы

1. Kalinin, A.A. Synthesis of D-π-A'-π-A Chromophores with Quinoxaline Core as Auxiliary Acceptor and Effect of Various Silicon-Substituted Donor Moieties on Thermal and Nonlinear Optical Properties at Molecular and Material Level / A.A Kalinin [et al.] // *Molecules*. 2023. V.28(2). № 531. <https://doi.org/10.3390/molecules28020531>

СЕКЦИЯ 4

Супрамолекулярная химия и нанотехнологии

УДК 547.639.5

СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ НОВЫХ ВОДОРАСТВОРИМЫХ МОНО- И ПОЛИАМИНОТРИАЗОЛ ПРОИЗВОДНЫХ КАЛИКС[4]АРЕНА СО СВОБОДНЫМИ ГИДРОКСИЛЬНЫМИ ГРУППАМИ

Акйол К.И., Макаров Е.Г., Исхакова З.Э., Миронова Д.А., Бурилов В.А., Соловьева С.Е., Антипин И.С.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: KIAkjol@stud.kpfu.ru

Ключевые слова: каликсарены, полиамины, клик-химия, связывание ДНК.

Наличие нескольких реакционных центров на верхнем и нижнем ободе каликс[4]аренов позволяет вводить в их структуру различные заместители, что открывает возможность получения веществ с заданными свойствами. Добавление азидных групп к молекулам каликс[4]аренов дает возможность использования данных макроциклов в «клик-реакциях», катализируемых ионами меди (I) (CuAAC).

В результате работы были синтезированы новые незамещенные по нижнему ободу ди- и тетраазидпроизводные каликс[4]арена. При помощи реакции CuAAC на основе данных соединений получены новые водорастворимые моно- и полиаминотриазолы (рис. 1). Было обнаружено, что данные аминотриазолпроизводные каликс[4]арена успешно связываются с молекулами ДНК тимуса теленка путем классической интеркаляции. Также была исследована цитотоксическая активность макроциклов: выяснено, что данные соединения проявляют селективную цитотоксичность по отношению к раковым клеткам молочной и предстательной желез.

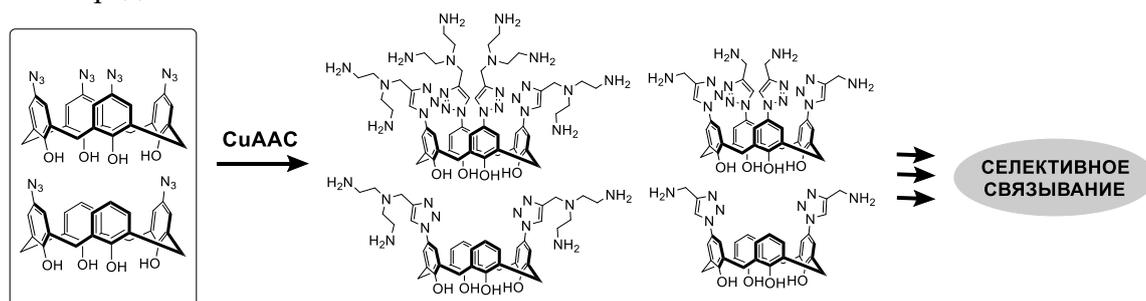


Рис. 1. Новые азид- и растворимые триазолпроизводные каликс[4]арена

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ 21-73-10062.

УДК 547.6

СИНТЕЗ И СВОЙСТВА НОВЫХ ТРИАЗОЛСОДЕРЖАЩИХ АММОНИЕВЫХ/ИМИДАЗОЛИЕВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ КАЛИКС[4]АРЕНА

Ахатова А.Э., Богданов И.М., Бурилов В.А., Гарипова Р.И., Миронова Д.А.,
Соловьева С.Е., Антипин И.С.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

Email: aliyaakhatova01@gmail.com

Ключевые слова: имидазолиевые/аммониевые производные каликс[4]арена, CuAAC, бискаликс[4]арены, молекулы-контейнеры.

Имидазолиевые / аммониевые производные каликс[4]аренов получили широкое распространение в супрамолекулярной химии в качестве синтетических рецепторов, способных к высокоселективному связыванию различного рода субстратов (переходные металлы, биологически значимые молекулы и др.), что особенно применимо в катализе. Введение азидных групп в производные каликс[4]аренов открывает путь для создания широкого спектра триазолсодержащих соединений с различными функциональными группами в мягких условиях благодаря использованию реакции CuAAC [1]. В последнее время все больший интерес направлен на более сложные структуры, состоящие из двух или более каликсаренов. Примерами таких структур могут послужить бискаликс[4]арены с триазольными линкерами, полученные реакцией CuAAC и обладающие новыми свойствами хозяина высокого уровня благодаря их геометрии и совместным эффектам каликсареновых полостей и спейсеров [2]. Эти соединения благодаря своей замкнутой структуре могут использоваться в качестве молекул-контейнеров для транспорта лекарственных средств или хранения различных органических веществ.

В данной работе представлены новые направления развития химии азид-алкинового циклоприсоединения, а именно методики синтеза новых триазолсодержащих дикарбоксильных аммониевых/имидазолиевых производных классического каликс[4]арена и разработка методик синтеза бискаликс[4]аренов, сшитых по верхнему ободу триазольными спейсерами.

Список литературы

1. Сидд, Д.В. Супрамолекулярная химия / Д.В. Сидд, Д.Л. Этвуд. – Москва: ИКЦ“Академкнига”, 2007. – 480 с.
2. Memon, S. Selective complexation of Hg^{2+} by biscalix[4]arene nitriles / S.Memon, G.Uysal, M.Yilvaz // Sep. Sci. Technol. – 2000. – V. 35. – P. 1247-1256.

УДК 544.2

СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И ТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НЕКОТОРЫХ АЛИФАТИЧЕСКИХ ДИПЕПТИДОВ

Ахметшин Ш.Р., Ларионов Р.А., Зиганшин М.А.
Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan Federal University
E-mail: akshamil2251@gmail.com

Ключевые слова: дипептиды, молекулярное распознавание, пористые кристаллы, супрамолекулярные гели, термический анализ.

Короткоцепные олигопептиды в настоящее время активно изучаются, благодаря их способности к самосборке с образованием различных наноструктур. Пористые кристаллы олигопептидов обладают большей сорбционной емкостью по сравнению с другими сорбентами и используются для хранения и разделения газовых смесей. Другим перспективным направлением применения дипептидов является получение на их основе органо- или гидрогелей. При этом особый интерес вызывают гели на основе Fmoc-замещенных линейных дипептидов благодаря высокой стабильности, механической прочности и биосовместимости.

Вместе с тем, на сегодняшний день супрамолекулярные свойства короткоцепных олигопептидов остаются все еще мало изученными, например, их рецепторные свойства в процессах взаимодействия «хозяин» - «гость», остается открытым вопрос о влиянии на самосборку замещенных дипептидов строения их молекул.

В настоящей работе совмещенным методом термического анализа было проведено исследование рецепторных свойств порошка дипептида L-лейцил-L-лейцин по отношению к парам органических соединений. Была обнаружена способность кристаллов дипептида запоминать ранее связанные органические гости. Память рецептора проявляется в виде одного или нескольких тепловых эффектов на кривой ДСК в области температур выше температуры ухода связанных гостей. Также было изучено влияние структуры ряда Fmoc-замещенных линейных дипептидов на их способность к гелеобразованию и свойства гелей. Были получены и охарактеризованы рядом физических методов гели на основе Fmoc-GG, Fmoc-AA, Fmoc-LL, Fmoc-FF.

Работа выполнена за счет средств субсидии, предоставленной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности, №FZSM-2023-0020.

УДК 544.47

НОВЫЕ ПОЛИАМИНОТРИАЗОЛСОДЕРЖАЩИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ КАЛИКС[4]АРЕНОВ: АНАЛИЗ ЦИТОТОКСИЧНОСТИ И СВЯЗЫВАНИЕ С ДНК

Билукова И.М., Миронова Д.А., Макаров Е.Г., Акйол К.И., Бурилов В.А.
Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan Federal University
E-mail: b.islamiya@yandex.ru

Ключевые слова: каликсарен, ДНК связывание, цитотоксичность, полиамины.

В настоящее время осуществляется поиск безопасных и эффективных трансфекционных агентов. В качестве примера перспективных молекулярных платформ для создания трансфекционных агентов могут выступать амфифильные каликсарены, благодаря легкости функционализации и своим агрегационным и комплексообразующим свойствам. Данная работа посвящена исследованию, которое включает в себя анализ цитотоксичности полиаминотриазолсодержащих производных каликс[4]аренов и изучение их способности связывания с ДНК тимуса телёнка. В ходе исследования с помощью методов УФ-видимой спектроскопии, флуоресцентной спектроскопии и кругового дихроизма было показано, что исследуемые макроциклы связываются с ДНК тимуса телёнка посредством классической интеркаляции. Также согласно данным методов динамического рассеяния света и просвечивающей электронной микроскопии, все исследованные каликсарены вызывают значительную компактизацию ДНК. Исходя из анализа цитотоксичности исследуемых соединений, было обнаружено, что макроциклы **1** и **2**, проявляют максимальную цитотоксическую активность по отношению к опухолевым клеточным линиям.

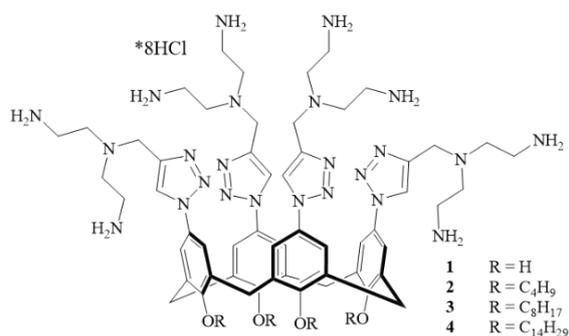


Рис. 1. Структуры исследуемых макроциклов

УДК 546. 56.

ФОРМИРОВАНИЕ МАГНИТОАКТИВНЫХ НАНОЧАСТИЦ КОБАЛЬТА В СРЕДЕ СВЕРХРАЗВЕТВЛЁННЫХ ПОЛИЭФИРОПОЛИОЛОВ В УСЛОВИЯХ ONE-POT СИНТЕЗА

Бурматова А.Е., Горвая А.С., Ханнанов А.А., Кутырева М.П.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: nastyaburmatova15@gmail.com

Ключевые слова: полиольный синтез, сверхразветвлённый полиэфирополиол, наночастицы кобальта.

Полиольный метод синтеза позволяет получать наночастицы с контролируруемыми формами и размерами в одну стадию.

Изучены условия формирования нанопазы CoNPs в среде сверхразветвленного полиэфирополиола (СРПО) четвертого поколения при различных соотношениях $V_{\text{Co(II)}}/V_{\text{OHpolyester polyol}} = 1:500$ (CoNPs-1), 1:250 (CoNPs-2), 1:100 (CoNPs-3), 1:10 (CoNPs-4). Восстанавливающая способность СРПО уменьшается при увеличении концентрации соли-предшественника. По данным УФ-Вид спектроскопии все образцы характеризуются наличием ППР при 277 нм, отвечающий сигналу наночастиц Co^0 . Однако, для образца CoNPs-4 в спектре наблюдается группа полос в области 600-700 нм, относящаяся к d-d-переходам для координированного иона Co(II) в тетраэдрическом окружении. По данным ПЭМ (рис.1) формируются наноразмерные сфероидные полимер-композитные частицы.

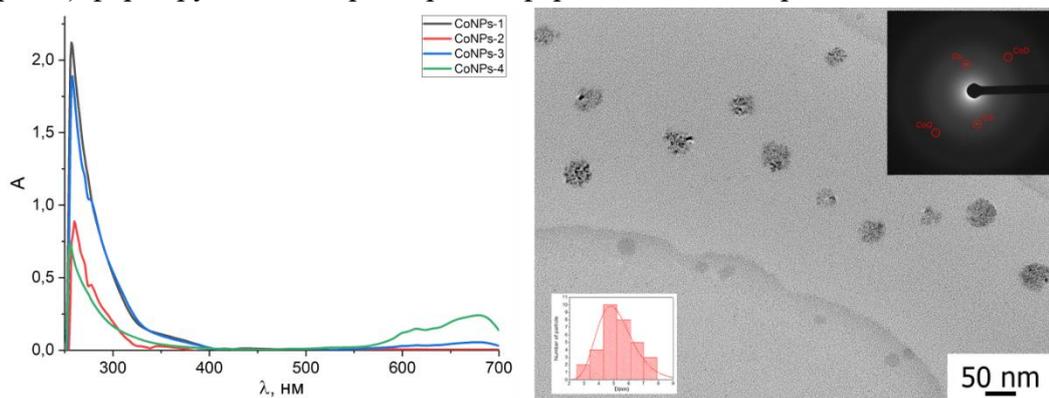


Рис. 1. УФ-Вид спектр и ПЭМ изображение CoNPs

Полученные данные определяют подходы для дальнейшей оптимизации условий one-pot синтеза магнитоактивных полимер-металлических наночастиц кобальта с контролируемым размером и морфологией.

УДК 547.639.5

**КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ДВУМЕРНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ
ПРОИЗВОДНЫХ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНА, ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ ПО
НИЖНЕМУ ОБОДУ ГЕРАНИЛЬНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ: СИНТЕЗ И
ОБРАЗОВАНИЕ СТАБИЛЬНЫХ ПОЛИМОРФОВ**

Вавилова А.А., Стойков И.И.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: Alena_Vavilova_KFU@mail.ru

Ключевые слова: двумерные наноструктуры, тиакаликс[4]арен, терпеноиды, гераниол, полиморфизм.

В последнее время резко возрос интерес к полиморфным системам как к интересному по своей сути явлению и как все более важной составляющей в разработке и маркетинге различных материалов на основе органических молекул. Характеристика всех возможных полиморфов, идентификация стабильного полиморфа и разработка надежного процесса для последовательного производства имеют решающее значение в современном дизайне фармацевтических препаратов и материалов. Для создания структур, способных образовывать моно- и бимолекулярные слои был выбран доступный нетоксичный природный монотерпен гераниол, способный упаковываться и организовываться аналогично фосфолипидам, а также макроциклический фрагмент тиакаликс[4]арена, позволяющий строго ориентировать геранильные фрагменты в пространстве.

В настоящей работе синтезированы производные тиакаликс[4]арена, функционализованные по нижнему ободу геранильными фрагментами в конфигурациях *конус* и *1,3-альтернат*, разработан подход к формированию на их основе двумерных мономолекулярных нанолистов в кристалле, и изучены возможные полиморфные переходы в твердой фазе. Полученные макроциклы могут найти применение в наноматериалах и медицине для современной разработки фармацевтических препаратов и материалов нового поколения.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

УДК 547.639.5

**ТИАКАЛИКС[4]АРЕНЫ, СОДЕРЖАЩИЕ ФЕНИЛМОЧЕВИННЫЕ ФРАГМЕНТЫ
ПО НИЖНЕМУ ОБОДУ: СИНТЕЗ КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩИЕ СВОЙСТВА ПО
ОТНОШЕНИЮ К РЯДУ ОДНОЗАРЯДНЫХ АНИОНОВ**

Волкова Э.Ф., Стойков И.И.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: volkovaelya84@gmail.com

Ключевые слова: тиакаликс[4]арен, синтез, комплексообразующие свойства, УФ спектроскопия.

Трансмембранный перенос анионов находится в центре внимания многих исследователей, работающих в области супрамолекулярной химии, в течение нескольких лет. Большая часть этих исследований обусловлена поиском новых методов лечения заболеваний, вызванных нарушением транспорта анионов. Разработка супрамолекулярных систем для функционирования в биологических системах с терапевтическим эффектом продолжает оставаться одной из актуальных проблем медицинской, органической и супрамолекулярной химии.

Существует широкий диапазон форм и геометрии анионных частиц, и поэтому необходимо конструирование комплексообразователей, комплементарных определенному типу аниона. Удобной платформой для дизайна таких структур является тиакаликс[4]арен. Благодаря наличию макроциклической структуры, возможности модификации по трем направлениям (верхний и нижний ободы и мостиковые фрагменты), они обладают способностью к селективному распознаванию и связыванию различных типов субстратов. Таким образом, работа посвящена синтезу и оценке комплексообразующей способности производных тиакаликс[4]арена, содержащих фенилмочевинные фрагменты, по отношению к ряду однозарядных анионов с помощью УФ спектроскопии.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

УДК 544.47

**(ТИА)КАЛИКС[4]АРЕНЫ С ФЛУОРЕСЦЕНТНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ:
ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА**

Володина А.А., Султанова Э.Д., Миронова Д.А., Бурилов В.А., Соловьева С.Е., Антипин И.С.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: Anastasia101000@yandex.ru

Ключевые слова: каликсарен, тиакаликсарен, флуоресцеин, клик-химия, люминесценция, фотоокислительный катализ

Флуоресцентные производные привлекают внимание исследователей возможностью использования их в качестве сенсоров, фотокатализаторов, а также для создания функциональных материалов [1]. В работе изучены флуоресцентные производные классических и тиакаликс[4]аренов. Для всех соединений установлены квантовые выходы люминесценции. С помощью УФ-видимой спектроскопии, динамического рассеяния света, а также просвечивающей и конфокальной микроскопий изучены агрегационные характеристики макроциклов. Установлено, что производные классического каликс[4]арена образуют сферические агрегаты размером до 400 нм, в то время как симметричный тетрафлуоресцеинсодержащий тиакаликс[4]арен формирует вытянутые червеобразные агрегаты. Установлено, что макроцикл, содержащий тетрадецильные фрагменты, наиболее эффективен в реакции фотоокисления фенолбороновой кислоты. Кроме того, было показано, что в ряде различных доноров электронов (NEt_3 , DABCO и $i\text{Pr}_2\text{EtN}$) данная реакция лучше всего протекает с триэтиламиноном. Представленная работа демонстрирует важность комбинации мицеллярного и фотоокислительного катализа [2].

Список литературы

1. Kumar, R. Revisiting Fluorescent Calixarenes: From Molecular Sensors to Smart Materials / R. Kumar, A. Sharma, H. Singh, P. Suating, H.S. Kim, K. Sunwoo, I. Shim, B.C. Gibb, J.S. Kim // Chem. Rev. – 2019. – V. 119. – № 16. – P. 9657-9721.
2. Burirov, V. Oxyethylated Fluoresceine—(thia)calix[4]arene Conjugates: Synthesis and Visible-Light Photoredox Catalysis in Water–Organic Media / V. Burirov, A. Fatykhova, D. Mironova, E. Sultanova, R. Nugmanov, A. Artemenko, A. Volodina, A. Daminova, V. Evtugyn, S. Solovieva, I. Antipin // Molecules – 2022. – V. 28. – № 1. – Reg. 261.

УДК 544.77;547.64

**СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ НАНОАССОЦИАТЫ НА ОСНОВЕ
СУЛЬФОБЕТАИНОВЫХ И ГИДРОКСИСУЛЬФОБЕТАИНОВЫХ
КАЛИКС[4]РЕЗОРЦИНОВ И КАРБОКСИБЕТАИНОВЫХ
КАЛИКС[4]РЕЗОРЦИНОВ И ИХ ЭФИРОВ**

Гильмуллина З.Р.¹, Морозова Ю.Э.², Соловьева С.Е.^{1,2}

¹ *Россия, Казань, Казанский федеральный университет*

Russia, Kazan, Kazan federal university

² *Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН*

Russia, Kazan, A.E. Arbuzov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences

Email: zukhra120900@gmail.com

Ключевые слова: каликстрезорцины, цвиттер-ионы, БСА, фолиевая кислота.

Амфифильные каликстрезорцины имеют большой потенциал в качестве систем доставки лекарственных препаратов. Цвиттер-ионные фрагменты в растворе создают прочный гидратный слой, препятствующий неспецифической адсорбции белков соединениями. Цель работы - введение цвиттер-ионных фрагментов в структуру каликстрезорцинов и исследование взаимодействия новых макроциклов с биологически активными соединениями.

Нами получены и охарактеризованы методами ¹H и ¹³C ЯМР, ИК - спектроскопии амфифильные каликс[4]резорцины, функционализированные по верхнему ободу карбоксибетаиновыми, сульфобетаиновыми, гидроксисульфобетаиновыми и сложноэфирными группами. Получены данные по микробиологической активности синтезированных макроциклов. Найдены параметры комплексообразования карбоксибетаиновых макроциклов и их эфиров с модельным белком БСА [1]. Получены наноассоциаты сульфобетаиновых и гидроксисульфобетаиновых макроциклов с витамином В₉. Установлены концентрационные условия существования стабильных катионных ассоциатов на основе сложноэфирных макроциклов. На основе полученных данных можно утверждать, что вышеописанные макроциклы применимы в создании наносистем для решения терапевтических задач.

Список литературы

1. Morozova J.E., Gilmullina Z.R., Voloshina A.D., Lyubina A.P., Amerhanova S.K., Syakaev V.V., Ziganshina A.Yu., Mukhametzyanov T.A., Samorodov A.V., Galagudza M.M., Antipin I.S. Calixresorcine carboxybetaines and carboxybetaine esters: synthesis, investigation of in vitro toxicity, anti-platelet effects, anticoagulant activity, and BSA binding affinities. // Int. J. mol. Sci. – Vol. 23. – P. 15298.

УДК 547.639.5

СИНТЕЗ НОВЫХ МОНО- И ДИАЗИД ПРОИЗВОДНЫХ КАЛИКС[4]АРЕНОВ СО СВОБОДНЫМИ ГИДРОКСИЛЬНЫМИ ГРУППАМИ: СИНТЕЗ И ДАЛЬНЕЙШАЯ МОДИФИКАЦИЯ

Исхакова З.Э., Макаров Е.Г., Акйол К.И., Бурилов В.А.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan federal university

Email: ZEIskhakova@kpfu.ru

Ключевые слова: макроциклы, каликсарены, бис-каликсарены, азиды, алкины, клик-химия.

Химия каликсаренов (циклические макромолекулы, состоящие из четырех фенольных фрагментов) является одной из самых активно развивающихся отраслей современной супрамолекулярной науки. Получение синтетической платформы на основе арилазидпроизводных каликс[4]аренов со свободными гидроксильными группами имеет свои перспективы: открываются возможности легкой пост-модификации за счет проведения «клик»-реакций, а также функционализации нижнего обода при помощи ковалентной сшивки или ионных взаимодействий.

В результате данной работы была разработана методика получения моно- и диазид производных каликс[4]аренов (**1** и **2**) со свободными гидроксильными группами, которая включает в себя проведение последовательных реакций: защита нижнего обода бензоильным фрагментом, нитрование, удаление защитной группы, восстановление и диазотирование. Далее на их основе была продемонстрирована возможность селективного получения бис (**3**) и трис-каликс[4]аренов (**4**) с хорошими выходами (рис. 1).

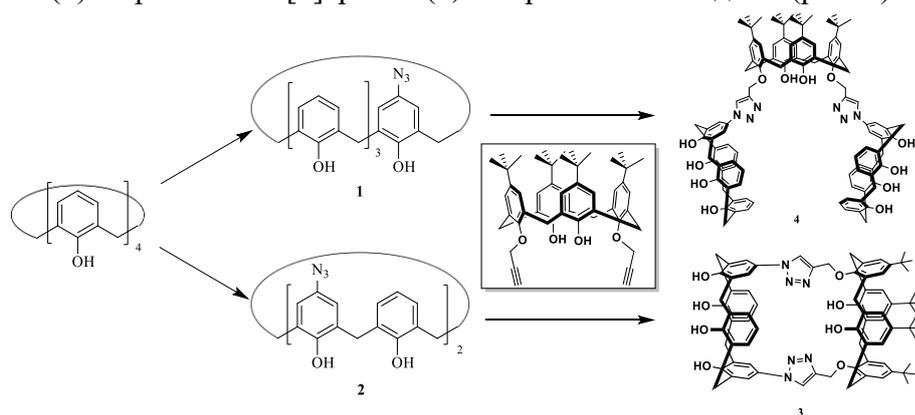


Рис. 1. Синтез азидсодержащих макроциклов и их пост-модификация

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ 21-73-10062.

УДК 544.777

СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИМЕРНЫХ НАНОНОСИТЕЛЕЙ ДЛЯ ДОСТАВКИ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРА В РАКОВЫЕ КЛЕТКИ

Мансурова Э.Э., Волошина А.Д., Шулаева М.М., Фазлеева Р.Р., Низамеев И.Р.,
Любина А.П., Кадиров М.К., Зиганшина А.Ю., Семенов В.Э., Антипин И.С.

Россия, Казань, Химический институт им. А. М. Бутлерова, КФУ

Russia, Kazan, Kazan Federal University

Россия, Казань, Казанский Национальный Исследовательский Технологический
Университет

Russia, Kazan, Kazan National Research Technological University

Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН

Russia, Kazan, A.E. Arbuzov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences

E-mail: elinamans17012@gmail.com

Ключевые слова: фотодинамическая терапия, фотосенсибилизаторы, наноносители, адресная доставка.

Фотодинамическая терапия (ФДТ) — это неинвазивный терапевтический метод, используемый для лечения раковых заболеваний. Метод основан на облучении фотосенсибилизатора светом видимого и ближнего инфракрасного диапазона и генерировании активных форм кислорода (АФК), которые повреждают опухолевые клетки. Однако фотосенсибилизаторы обладают низкой растворимостью в физиологических условиях и малой биодоступностью [1]. Инкапсуляция данных агентов в наноносители способствует их направленному переносу к очагам поражения и увеличению эффективности лечения [2].

В работе представлено 2 вида наноносителей, полученных методом микроэмульсионной полимеризации 5-(3,6-диметилаурацила)пентил акрилата (MNNU-OAc) и соединений, содержащих дисульфидные связи (Рис. 1). Диаллилдисульфид (SS) и N,N'-бис-акрилоилцистамин (NSS) образуют гидрофобное ядро, в которое был помещен мезо-тетракис(N-метилпиридиний-4)порфирина. Распад частиц осуществляется под действием восстанавливающего агента – глутатиона.

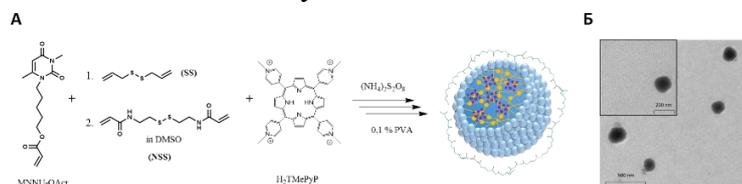


Рис. 1 (А) Схема синтеза полимерного наноносителя; (Б) снимок ПЭМ

Список литературы

1. Benov, L. Photodynamic Therapy: Current Status and Future Directions / L. Benov // Medical Principles and Practice. – 2015. – Vol. 24. – P. 14–28.
2. Kenchegowda, M. Smart Nanocarriers as an Emerging Platform for Cancer Therapy: A Review / M. Kenchegowda // Molecules. – 2022. – V. 27. – P.146.

УДК 547.781.1, 547.162.4, 547.639.5.

СТЕРЕОИЗОМЕРЫ ТИАКАЛИКСАРЕНА, СОДЕРЖАЩИЕ ИМИДАЗОЛИЕВЫЕ ФРАГМЕНТЫ ПО НИЖНЕМУ ОБОДУ: СИНТЕЗ И СВЯЗЫВАНИЕ АНИОНОВ

Моисеева М.В., Терентьева О.С., Падня П.Л., Стойков И.И.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: moiseevam95@gmail.com

Ключевые слова: макроциклы, анионные рецепторы, тиакаликс[4]арены, имидазолиевые соли.

Изучение распознавания биологически значимых анионов является важным шагом к пониманию функционирования многих процессов в живых организмах, что может быть применено для создания искусственных биомиметических систем. Несмотря на достижения современной органической и супрамолекулярной химии, задача создания искусственных анионных рецепторов полностью не решена, что объясняется ее сложностью и специфическими свойствами анионов, а именно большими размерами по сравнению с катионами и разнообразным строением.

Тиакаликсарены с их уникальной трехмерной поверхностью являются одними из самых известных молекул-хозяев для связывания и распознавания различных субстратов, в том числе анионов. Благодаря пространственной предорганизации функциональных групп (таких как имидазолиевые, амидные, мочевиновые) заместителей становится возможно создание на основе тиакаликсарена эффективных анионных рецепторов с заданной структурой и взаимным расположением.

В представленной работе были синтезированы производные *n*-трет-бутилтиакаликс[4]арена, содержащие имидазолиевые фрагменты по нижнему ободу, в конфигурациях *конус*, *1,3-альтернат* и *частичный конус*. Структура полученных соединений была подтверждена спектроскопией ЯМР ^1H и ^{13}C , ИК- спектроскопией и масс-спектрометрией. Взаимодействие макроциклов с анионами было изучено методами спектроскопии ЯМР и электронной спектроскопии поглощения. Было установлено, что в результате образуются ассоциаты состава 1:1 с константами связывания $124\text{--}10950\text{ M}^{-1}$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (No. 19-73-10134).

УДК 547

АМИДОАЛКИЛЬНЫЕ АМИНОПРОИЗВОДНЫЕ ПИЛЛАР[5]АРЕНА КАК АНТИБИОПЛЕНОЧНЫЕ АГЕНТЫ

Назмутдинова В.А., Александрова Ю.И., Шурпик Д.Н., Зеленихин П.В., Стойков И.И.

Россия, Казань, Казанский (Приволжский) федеральный университет
 Russia, Kazan, Kazan Federal University
 E-mail: n-vika-art@mail.ru

Ключевые слова: пиллар[5]арены, антибактериальные системы, ДНК.

Серьезной проблемой в борьбе с инфекционными заболеваниями является способность патогенных микроорганизмов к образованию биопленок. Благодаря низкой токсичности, растворимости в воде и высокой специфичности по отношению к биологическим субстратам пиллар[*n*]арены могут связывать внеклеточную ДНК и тем самым ингибировать рост и развитие патогенных биопленок.

В данной работе впервые были получены новые производные пиллар[5]арена **3-6**, содержащие амидоалкиламинные фрагменты (схема 1). Была предложена новая биосовместимая супрамолекулярная система на основе водорастворимого производного пиллар[5]арена **4**, способная ингибировать развитие биопленки *St. Aureus*, образуя ассоциаты с ДНК, и уменьшать толщину биопленки на 15 %.

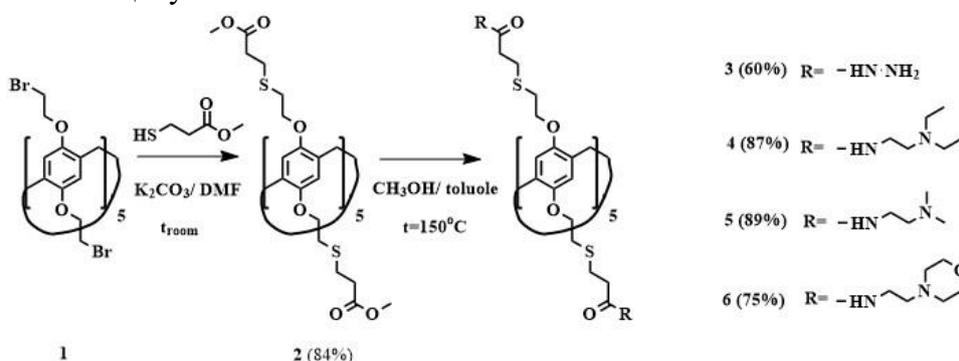


Схема 1.

Характеристики ассоциации **4** с ДНК молок лосося были установлены с помощью УФ-видимой и флуоресцентной спектроскопии. Методами динамического светорассеяния и просвечивающей электронной микроскопии показано образование стабильных наноассоциатов ($d_{cp} = 220$ нм) пиллар[5]арена **4** (10^{-5} М) с модельной нуклеиновой кислотой. МТТ тест показал отсутствие токсичности макроцикла **4** по отношению к клеткам аденокарциномы человека и легкого эпителия коровы.

Таким образом, были получены новые водорастворимые производные пиллар[5]арена, расширяющие потенциал антибиопленочных агентов.

УДК 544.77

ВЛИЯНИЕ МАКРОЦИКЛИЧЕСКОГО ЯДРА НА ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПАМАМ-ДЕНДРИМЕРОВ С ЛИЗОЦИМОМ

Овчинников Д.Г., Мостовая О.А., Стойков И.И.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: danya1075@mail.ru

Ключевые слова: лизоцим, ПАМАМ-дендримеры.

Лизоцим – белок, широко применяемый в промышленности в качестве антимикробного агента. Однако применение препаратов на основе этого белка сопровождается рядом трудностей: быстрая биодegradация белка, его аллергенность требуют соблюдения условий хранения и осторожности применения у лиц со склонностью к аллергии. Нивелировать эти сложности можно, обратимо связав белок с неким соединением и поместив его таким образом в своеобразный контейнер. Перспективным для этой цели представляется использование полиамидаминных (ПАМАМ) дендримеров – разветвлённых макромолекул со строго определённой структурой. Их взаимодействие с белком обусловлено наличием большого количества сайтов связывания (терминальных и внутренних аминогрупп), которые обеспечивают множественные взаимодействия.

В данной работе комплексом спектральных методов (УФ/видимая, флуоресцентная спектроскопия, спектроскопия кругового дихроизма, динамическое светорассеяние) изучено взаимодействие классических ПАМАМ-дендримеров и их макроциклических аналогов с ядром на основе *n*-трет-бутилтиакаликс[4]арена (ПАМАМ-каликс-дендримеров) с лизоцимом и установлено, что замена ядра дендримеров на тиакаликс[4]ареновый фрагмент приводит к значительному усилению связывания, при этом вторичная структура белка не претерпевает изменений. Так, ПАМАМ-каликс-дендримеры связываются с лизоцимом уже в первой генерации ($\lg K_a$ 3.7–3.8), в то время как их классические аналоги имеют схожие характеристики только в третьей генерации ($\lg K_a$ 3.2). Полученные результаты могут найти применение при разработке систем доставки лекарственных средств и хранения биополимеров.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФИ (проект № 21-73-20067).

УДК 547.781.1

СИНТЕЗ НОВЫХ ПРЕКУРСОРОВ ННС КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ *p*-ТРЕТ-БУТИЛ(ТИА)КАЛИКС[4]АРЕНА

Паскевич И.В.,¹ Гафиатуллин Б.Х.,¹ Бурилов В.А.,¹ Соловьева С.Е.,² Антипин И.С.^{1,2}

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

²Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН

Russia, Kazan, A.E. Arbuzov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of

Sciences

E-mail: ilyapaskevich@gmail.com

Ключевые слова: (тия)каликс[4]арен, кватернизация, имидазолий.

Монозамещённые производные каликс[4]аренов [1] благодаря наличию свободных ОН-групп (рис. 1) имеют предпосылки для дальнейшей модификации, наличие одного имидазольного фрагмента позволяет получать ННС комплекса типа PEPSI [2].

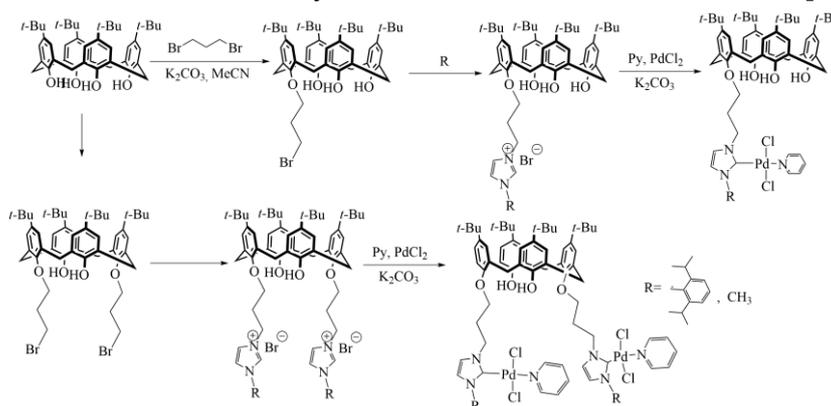


Рис. 1. Стратегия синтеза PEPSI комплексов на платформе каликс[4]арена

Работа выполнена при поддержке гранта РФФ № 22-13-00304.

Список литературы

1. Ben Salem, A. Molecular drug-organiser: Synthesis, characterization and biological evaluation of penicillin V and/or nalidixic acid calixarene-based podands / A. Ben Salem, G. Sautrey, S. Fontanay, R.E. Duval, J.-B. Regnouf-de-Vains // Bioorg. Med. Chem. – 2011. – V. 19. – Is. 24. – P. 7534-7540.
2. Nasielski, J. Structure-activity relationship analysis of Pd-PEPSI complexes in cross-couplings: a close inspection of the catalytic cycle and the precatalyst activation model / J. Nasielski, N. Hadei, G. Achonduh, E.A.B. Kantachev, C.J. O'Brien, A. Lough, M.G. Organ

УДК 54.057+547

ПОЛУЧЕНИЕ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИЛЛАР[5]АРЕНА, СОДЕРЖАЩИХ ЭТАНТИОЛЬНЫЕ ФРАГМЕНТЫ И ТРЕТИЧНЫЕ АМИНОГРУППЫ

Пергат А.В., Александрова Ю.И., Шурпик Д.Н., Стойков И.И.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: pergatarina@yandex.ru

Ключевые слова: пиллар[5]арен, тиран, вторичные амины, ломефлоксацин.

Функционализация вторичных аминов позволяет получать новые соединения с желаемыми свойствами, среди которых действующие вещества лекарственных препаратов, пестициды, красители и прекурсоры для органического синтеза. В связи с чем в данной работе мы предлагаем получение серии третичных меркаптоалкоксиаминов по реакции раскрытия тиранового цикла, что расширит синтетический потенциал получения новых лекарственных средств, а также позволит получить химически активный продукт, содержащий фрагмент антибиотика ломефлоксацина.

В качестве платформы для создания таких систем активно используются пиллар[5]арены, которые впервые были синтезированы научной группой Томоки Огоши в 2008 году. Универсальные методы синтеза и функционализации пилларареновой платформы позволяют получать уникальные макроциклы с низкой токсичностью и высокой растворимостью в воде, что способствует образованию супрамолекулярных комплексов, формирующих умные материалы нового поколения.

Для получения целевых структур нами предварительно по литературной методике были получены меркапто-производные **1-5** следующих вторичных аминов: морфолина, диэтиламина, пиперидина, пирролидина и ломефлоксацина по реакции раскрытия тиранового цикла. Далее прекурсоры **1-4** были введены в реакцию с нуклеофильного замещения с декабромэтоксипиллар[5]ареном с получением функционализированных макроциклов, содержащих этантиольные фрагменты и третичные аминогруппы с выходами 56-69 %. Состав и структура всех полученных соединений подтверждены комплексом физических методов (^1H , ^{13}C { ^1H } ЯМР- спектроскопия, ИК-спектроскопия, МАЛДИ-масс-спектрометрия).

УДК 546.57

ФОРМИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА В СРЕДЕ СВЕРХРАЗВЕТВЛЕННОГО ПОЛИЭФИРОПОЛИМАЛЕАТА

Прытков В.А., Осипова А.М., Кутырева М.П.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: VaAPrytkov@kpfu.ru

Ключевые слова: сверхразветвленные полимеры, наночастицы серебра.

Наночастицы серебра обладают широким спектром применения в различных областях, в частности в медицине и фармакологии. Одним из перспективных методов синтеза наночастиц серебра можно считать синтез наночастиц на основе биodeградируемых сверхразветвленных полиэфирополиолов, модифицированных фрагментами, содержащими карбоксильную группу. Такой метод, в котором полимер выполняет роль и восстановителя, и стабилизатора наночастиц, позволит снизить токсичность и контролировать морфологию наноматериала. В рамках данного исследования оценено влияние температуры и соотношения реагентов на формирование наночастиц серебра в условиях химического восстановления соли - предшественника AgNO_3 в среде H_2O с применением сверхразветвленного полиэфирополиола второй генерации G2_{OH} , содержащего фрагменты моноэфира малеиновой кислоты – $\text{G2}_{\text{OH}}\text{-estMA}$, в роли восстановителя и стабилизатора. Синтезировано два образца наночастиц AgNPs-1 – 2 при мольном отношении $\nu_{\text{Ag}^+}/\nu_{\text{COOH}}(\text{G2}_{\text{OH}}\text{-estMA})$ 1:50 и 1:12 соответственно, представляющие собой коллоидно-устойчивые растворы. Методом электронной спектроскопии подтверждено образование наночастиц серебра и установлены температурные зависимости нанофазы серебра (рис. 1 а, б). Концентрация частиц в растворах и гидродинамический диаметр (d_h) были оценены методом НТА-анализа (рис. 1 в). Полученные образцы представляют собой агрегаты сверхразветвленного полиэфирополималеата $\text{G2}_{\text{OH}}\text{-estMA}$, допированного наночастицами Ag.

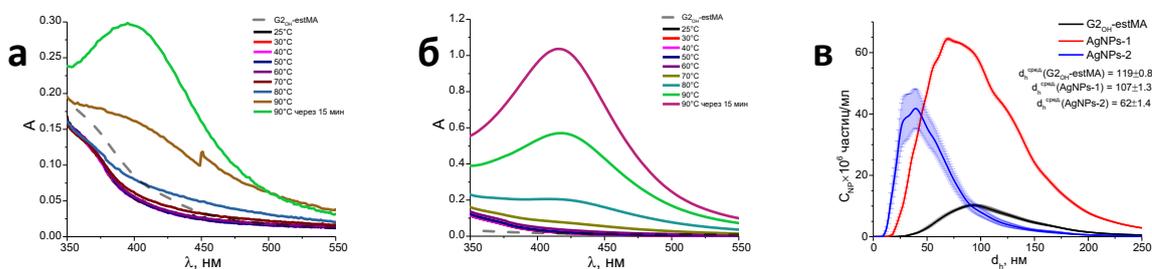


Рис. 1. Электронные спектры поглощения образцов AgNPs-1 - 2 (а и б соответственно) при варьировании температуры протекания реакции и данные НТА – анализа (в).

УДК 547.6

СИНТЕЗ НОВЫХ ТРИАЗОЛСОДЕРЖАЩИХ ПО ВЕРХНЕМУ ОБОДУ КАЛИКС[4]АРЕНОВ В СТЕРЕОИЗОМЕРНОЙ ФОРМЕ «КОНУС»

Пушкарёва Е.А.¹, Бурилов В.А.¹, Богданов И.М.¹, Миронова Д.А.¹, Султанова Э.Д.¹,
Соловьёва С.Е.², Антипин И.С.^{1,2}.

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan Federal University

²Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
Russia, Kazan, Russia, Kazan, A.E. Arbuzov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of
Sciences

E-mail: pushkareva.elizaveta@mail.ru

Ключевые слова: каликс[4]арены, «конус».

Каликс[4]арены, содержащие азидалкильные заместители на верхнем или нижнем ободе, получили широкое распространение в супрамолекулярной химии благодаря легкому синтезу, нетоксичности и разнообразию стереоизомерных форм.

Наличие азидных фрагментов позволяет каликсаренам вступать в реакцию азид-алкинового циклоприсоединения [1]. Введение в каликсареновую платформу триазольных групп является достаточно интересным и перспективным направлением для развития супрамолекулярной химии, поскольку позволяет значительно расширить потенциал получаемых соединений для их дальнейшего использования [2].

В представленной работе предложен подход к синтезу новых триазолсодержащих по верхнему ободу каликс[4]аренов в стереоизомерной форме «конус» (рисунок 1).

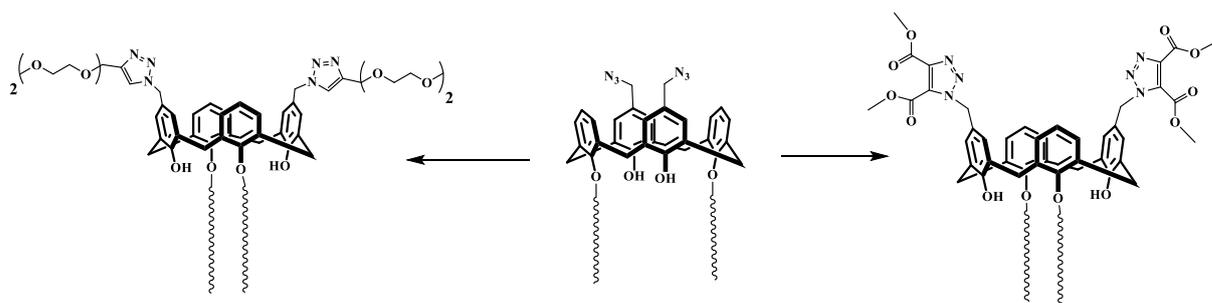


Рис. 1. Синтез новых триазолсодержащих каликс[4]аренов

Список литературы

1. Sean P. Bew, Rebecca A. Brimage, Nathalie L'Hermite, and Sunil V. Sharma. – Org. Lett., Vol. 9, No. 19, 2007.
2. Xun Li, Fawen Ning, Lin Luo and others. – RSC Adv., 2022. – 12, 8394–8403.

УДК 546.56.

СТАБИЛИЗАЦИЯ НАНОЧАСТИЦ БОРИДА КОБАЛЬТА ПРОИЗВОДНЫМИ СВЕРХРАЗВЕТВЛЕННЫХ ПОЛИЭФИРОВ

Россова А.А., Муравьева Д.В., Герасимов А.В., Кутырева М.П.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: anastasia.rossova@yandex.ru

Ключевые слова: перспективные материалы, наночастицы, борид кобальта, легирование.

Одним из перспективных направлений является создание композитных материалов с улучшенными теплофизическими свойствами на основе наночастиц боридов переходных металлов.

Настоящее исследование представляет совокупность некоторых данных по разработке новых методик синтеза наноразмерного борида кобальта в среде сверхразветвленных полиэфиров второй (G_{2OH}), третьей (G_{3OH}) и четвертой (G_{4OH}) *псевдо*-генераций, содержащих периферические ОН группы. Нанофаза Co_xV формируется методом химического восстановления в среде полимера в условиях различных мольных соотношений $v_{Co^{2+}}:v_{NaBH_4}$. При образовании композитного материала наблюдается эффект легирования полимера нанофазой Co_xV , усиливающийся при повышении генерации и разветвленности архитектуры полимера. Термостабильность полимер-неорганического композита повышается с 250 до 400 - 600 °С. Экзотермический эффект при 480 °С обусловлен кристаллизацией аморфного боридов кобальта с диаметром 15 ± 5 нм. (Рис.1)

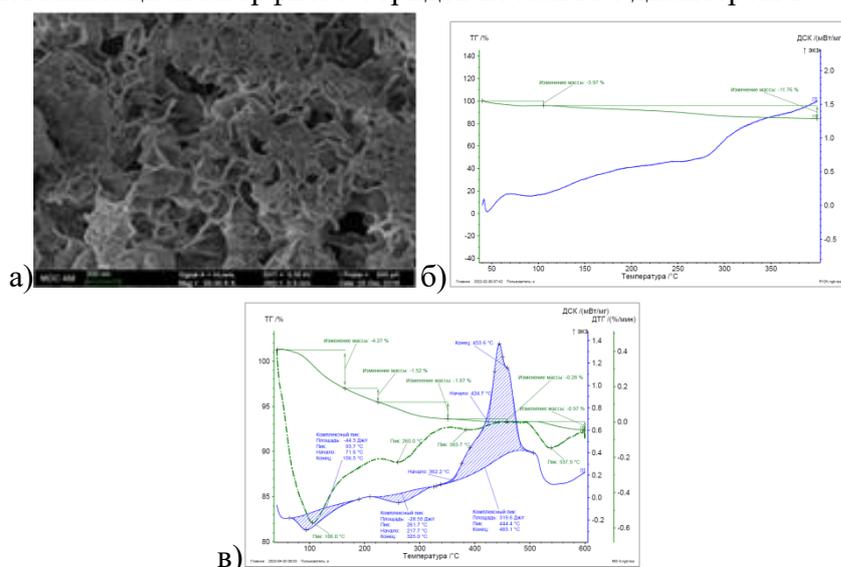


Рис.1. СЭМ изображение Co_xV/G_{3OH} (а), ТГ-ДСК термограммы Co_xV/G_{3OH} (б), Co_xV/G_{4OH} (в)

УДК 547.639.5

**ПРОИЗВОДНЫЕ ПИЛЛАР[5]АРЕНА С АМИНОКИСЛОТНЫМИ
ФРАГМЕНТАМИ: ОБРАЗОВАНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ АССОЦИАТОВ В
ПРИСУТСТВИИ СЫВОРОТОЧНОГО АЛЬБУМИНА**

Такунцева Д.К., Султанаев В.Р., Якимова Л.С., Стойков И.И.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: darya.takuntseva@mail.ru

Ключевые слова: пиллар[5]арен, нековалентная самосборка, аминокислотные заместители, сывороточный альбумин.

Терапевтическая эффективность и биологическая активность лекарственных мультитаргентных систем на основе сывороточных альбуминов обусловлена содержанием мономерной формы белка [1]. Полифункциональные производные пиллар[5]арена с аминокислотными заместителями способны выступать в качестве молекулярных рецепторов [2].

В рамках данной работы были получены водорастворимые деказамещенные производные пиллар[5]арена с карбоксибетаиновыми фрагментами и остатками аминокислот (*L*-фенилаланина, глицина и *L*-аланина). Комплексом физических методов исследована способность синтезированных парациклофанов образовывать наноразмерные ассоциаты в присутствии модельного белка, установлено влияние различных аминокислотных заместителей на константы ассоциации тройных систем (макроцикл–краситель–белок), доли α -спирали в белковой структуре. Оценены цитотоксическая активность макроциклов по отношению к линиям клеток *MCF-7*, *PC-3* и *HSF* с помощью флуоресцентного интеркалирующего агента.

Полученные результаты могут быть полезными для развития белковых лекарственных препаратов и полифункциональных смешанных систем на основе макроциклической платформы деказамещенных пиллар[5]аренов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект № 18-73-10094) <https://rscf.ru/project/18-73-10094/>.

Список литературы

1. Spada A., Emami J., Tuszynski J.A., Lavasanifar A. The uniqueness of albumin as a carrier in nanodrug delivery // *Mol. Pharm.*–2021.–Vol. 18.–P. 1862–1894.
2. Sultanaev V., Yakimova L., et all. Decasubstituted Pillar[5]arene Derivatives Containing *L*-Tryptophan and *L*-Phenylalanine Residues: Non-Covalent Binding and Release of Fluorescein from Nanoparticles // *Int. J. Mol. Sci.*–2023.–Vol. 24.–P. 7700.

УДК 548.312.5+547.567.2+544.431.132

ИЗУЧЕНИЕ ЗАВИСИМОСТИ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ ОТ ТОПОЛОГИИ И РАЗМЕРОВ КОМПОНЕНТОВ КОМПЛЕКСОВ С ПЕРЕНОСОМ ЗАРЯДА НА ОСНОВЕ СЛАБЫХ ДОНОРНЫХ МОЛЕКУЛ И АКЦЕПТОРОВ РЯДА ФТОРПРОИЗВОДНЫХ TCNQ

Федонин А.П.^{1,2}, Ившин К.А.², Метлушка К.Е.², Латыпов Ш.К.², Катаева О.Н.²

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan federal university

²Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН

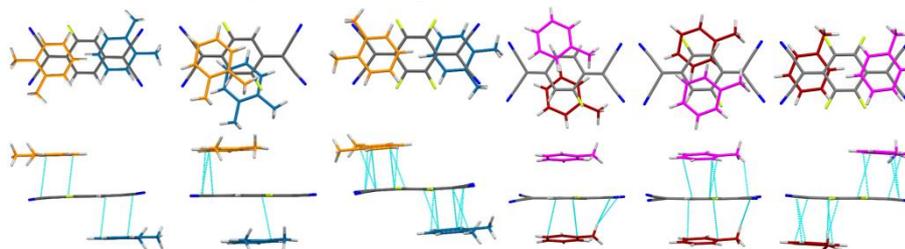
Russia, Kazan, A.E. Arbuzov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences

E-mail: anton.fedonin@mail.ru

Ключевые слова: Комплексы с переносом заряда, сокристаллы, производные тетрацианохинодиметана, супрамолекулярная организация, производные бензола.

В настоящее время особое внимание привлекают органические сокристаллы, которые не только представляют широкие возможности для получения новых материалов на основе сочетания различных донорных и акцепторных систем, но и дают возможность изучать механизмы переноса заряда, природу межмолекулярных взаимодействий и установить взаимосвязь между кристаллической структурой и свойствами материалов.

Было проведено исследование серии сокристаллов на основе $F_xTCNQ/o\text{-Xylol}$ ($x=1, 2, 4$) методом РСА, и дальнейшее сравнение с серией $F_xTCNQ/Toluene$ ($x=1, 2, 4$) [1]. Было показано влияние введения дополнительной метильной группы в молекуле донора малых размеров относительно молекулы акцептора.



Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ №21-13-00220

Список литературы

1. Ившин К.А. Нековалентные взаимодействия в слабых донорно-акцепторных системах на основе толуола и производных тетрацианохинодиметана / Ившин К.А., Федонин А.П., Зиннатуллин Р.Г., Метлушка К.Е., Латыпов Ш.К., Катаева О.Н. // Журнал общей химии. 2022. Т. 92. № 12. С. 1826-1834.

УДК 544.47

КАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ НОВЫХ ПАЛЛАДИЕВЫХ ННС-КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНОВ В РЕАКЦИЯХ КРОСС-СОЧЕТАНИЯ И ВОССТАНОВЛЕНИЯ

Федосеева А.А., Султанова Э.Д., Гафиатуллин Б.Х., Бурилов В.А., Антипин И.С.
 Россия, Казань, Казанский федеральный университет
 Russia, Kazan, Kazan Federal University
 E-mail: afedoseewa03@gmail.com

Ключевые слова: катализ, ННС-комплексы, каликс[4]арены.

Актуальной темой исследования остается переход в экологичные условия для проведения реакций органического синтеза: в водной среде, с минимальными побочными продуктами и др. Создание и исследование новых каталитических систем становится ключевым звеном в этом «поиске». N-гетероциклические карбеновые комплексы обладают высокой стабильностью на воздухе, в водной среде и при нагревании по сравнению с их аналогами.

В нашей группе впервые были получены палладиевые комплексы на основе тиакаликс[4]аренов в конформации конус с различными объемными заместителями (рисунок 1). Данные комплексы показали высокую эффективность в реакциях кросс-сочетания Хека и в восстановлении нитроароматических соединений в водно-органической среде (рисунок 1).

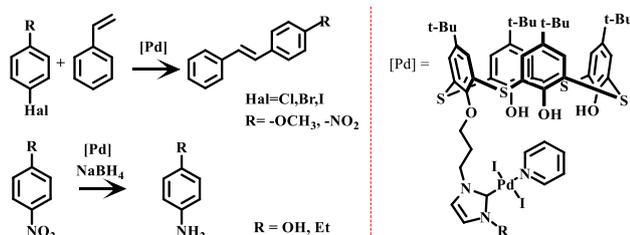


Рис. 1. Катализируемые реакции и структура палладиевого комплекса

Таблица 1

		Восстановление нитрофенола		Кросс-сочетания Хека	
		k, s^{-1}	$n, \times 10^5$	Конверсия	Соотношение
TCA	Pd-Met-	0,0012	2.4	22	1:5
TCA	Pd-iPr-	0,0035	7	83	1:2

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ 22-13-00304

УДК 544.77+541.18

СИЛИКАТНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСОВ $Mn(II)$ КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ КОНТРАСТНЫЕ АГЕНТЫ ДЛЯ МРТ

Чернышева С.Д.¹, Федоренко С.В.², Бочкова О.Д.¹

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

²Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН

Russia, Kazan, A.E. Arbuzov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences

E-mail: gjsctyuvz@gmail.com

Ключевые слова: силикатные наночастицы, контрастный агент, марганец.

Использование магнитных контрастных агентов в магнитно-резонансной томографии (МРТ) позволило существенно усилить контраст между больной и здоровой тканью, тем самым предопределив качественный скачок в развитии метода МРТ. Всё большее внимание привлекают контрастные агенты на основе соединений $Mn(II)$, токсичность которых на полпорядка ниже по сравнению с широко используемыми комплексами $Gd(III)$.

Введение соединений, обладающих контрастирующей способностью, в полимерную силикатную матрицу позволяет уменьшить их токсичность и повысить релаксивность. Были получены силикатные наночастицы, проявляющие одновременно люминесцентные (за счёт содержания комплекса трис-дипиридил рутения) и магнитно-релаксационные свойства (за счёт комплекса марганца (II) с *para*-сульфонатогиакаликс[4]ареном). Для таких частиц было выявлено их распределение в органах мыши как *in vivo* с помощью МРТ, так и *ex vivo* с помощью метода конфокальной микроскопии. Было показано, что частицы накапливаются в мозге, печени и почках мыши после внутривенной инъекции водной дисперсией силикатных наночастиц.

Полученные наночастицы были охарактеризованы методами ПЭМ, АЭС, УФ- и люминесцентной спектроскопии, динамического рассеяния света, релаксометрии. Кроме того, были проведены исследования по цитотоксичности, гемолитической активности и гемагглютинации.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (грант № 20-53-7802 Итал_т).

УДК 547.022+543.429.23+547.639.5

НОВЫЕ АЗОПРОИЗВОДНЫЕ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНА И ИХ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ С РОДАМИНОВЫМИ КРАСИТЕЛЯМИ

Чурбанова Е.С.¹, Габдрахманова Ф.Б.², Халифа М.А.М.¹, Клешина С.Р.², Соловьева С.Е.^{1,2}, Антипин И.С.^{1,2}

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan Federal University

²Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
Russia, Kazan, A.E. Arbuzov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences
E-mail: alyaska169@gmail.com

Ключевые слова: тиакаликс[4]арен, красители, комплексы «гость-хозяин».

Гипоксия является важным параметром агрессивности опухоли, поэтому необходимо создание зондов для ее обнаружения. При ней увеличивается активность восстановительных ферментов. На основе восстановления связи азоредуктазой разработаны (тия)каликс[4]арены, содержащие азосвязь и анионные группы, которые образуют комплексы с красителями [1]. В данной работе представлен круг лигандов на основе тиакаликс[4]арена, функционализированного азофрагментами по нижнему ободу в конформации *1,3-альтернат* [2] (рис. 1). Структура полученных соединений была охарактеризована физико-химическими методами, полученные азопроизводные образуют комплексы гость-хозяин с родаминами 6G, B и 123.

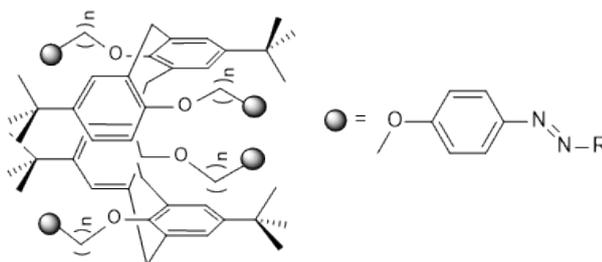


Рис. 1. Структура азотиакаликс[4]аренов в конформации *1,3-альтернат*

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 22-73-00138.

Список литературы

1. Mironova D., Burilov V., Galieva F., Khalifa M.A.M., Kleshnina S., Gazalieva A., Nugmanov R., Solovieva S., Antipin I. Azocalix[4]arene-Rhodamine Supramolecular Hypoxia-Sensitive Systems: A Search for the Best Calixarene Hosts and Rhodamine Guests // *Molecules*. - 2021. - №26(18). - С. 5451.
2. Gabdrakhmanova F.B., Churbanova E.S., Khalifa M.A., Kleshnina S.R., Solovieva S.E., Antipin I.S. Synthesis and Characterization of New Potential Hypoxia-Sensitive Azothiacalix[4]arenes Derivatives // *Molbank*. - 2023. - №1. - С. 1570.

УДК 615

ПОЛИМЕРСОМЫ С ИНКАПСУЛИРОВАННОЙ ФОСФОТРИЭСТЕРАЗОЙ-ТЕРАПЕВТИЧЕСКИЕ НАНОРЕАКТОРЫ ДЛЯ ДЕТОКСИКАЦИИ *IN VIVO*

Шайхутдинова З.М., Паширова Т.Н., Мансурова М.Н., Казакова Р.Р., Богданов А.В.,
Татаринов Д.А., Массон П.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: shajhutdinova.z@mail.ru

Ключевые слова: детоксикация, фосфотриэстераза, полимерсомы, нанореакторы.

В настоящее время нанотехнологические подходы активно внедряются в медицину. Например, полимерсомы, получаемые в ходе самоассоциации амфифильных блок-сополимеров, применяются в качестве нанореакторов (nR) и систем доставки лекарств. В полости ферментсодержащих нанореакторов в отличие от систем доставки протекают реакции между реагентами, что позволяет использовать инъекционные nR для нейтрализации ксенобиотиков в кровотоке организма [1].

Целью работы является создание nR, нейтрализующих параоксон (POX), токсический метаболит пестицида паратиона, и их исследование *in vitro* и *in vivo*. В ходе работы фермент фосфотриэстераза термофильных архей *Sulfolobus solfataricus* (PTE) (12.5 μM), обладающий высокой эффективностью в отношении POX [3], был инкапсулирован в полимерсомы на основе блок-сополимеров PEG₂₀₀₀-PPS (0.1-0.5% масс). Размеры полученных наночастиц составили 100 нм с PDI не превышающим 0.2. Исследования *in vitro* показали, что полный гидролиз POX (5 μM), происходил менее чем за 10 секунд. В ходе исследований *in vivo* при в/в введении nR сдвиги LD₅₀ составили 23.5×LD₅₀ (профилактика) и 7.9×LD₅₀ (лечение) для мышей зараженных POX п/к, что показывает эффективность полученных nR для нейтрализации параоксона.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РФФ № 20-14-00155-П.

Список литературы

1. Pashirova, T.N. Enzyme nanoreactor for in vivo detoxification of organophosphates / T.N. Pashirova et. al. // ACS Appl. Mater. Interfaces. - 2022. - №14. - P. 19241-19252.
2. Poirier, L. Organophosphorus poisoning in animals and enzymatic antidotes / L. Poirier et. al. // Environ. Sci. Pollut. Res. - 2021. - №28. - P. 25081-25106.

УДК 547.639.5

ПРОИЗВОДНЫЕ *n*-ТРЕТ-БУТИЛТИАКАЛИКС[4]АРЕНА С α -АМИНОФОСФОНАТНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ НА НИЖНЕМ ОБОДЕ: СИНТЕЗ И СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СВОЙСТВА

Шибеева К.С., Стойков И.И.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: alleoks@mail.ru

Ключевые слова: синтез, тиакаликс[4]арен, 1-аминофосфонат.

α -Аминофосфонаты и α -аминофосфоновые кислоты уже давно пристально привлекают к себе внимание ученых благодаря своим примечательным свойствам: противокоррозионным, комплексообразующим, биологическим. Такие разнообразные полезные свойства 1-аминофосфонатов связаны с наличием в их составе двух различных по донорно-акцепторной способности групп – фосфорильной и аминогруппы (протоноакцепторные) и гидроксильных (протонодонорные). Значимое влияние на связывающие свойства этих соединений также оказывают и заместители при альфа-атоме углерода. Наличие в молекуле нескольких 1-аминофосфонатных фрагментов способствует усилению взаимодействия таких «полиаминофосфонатов» с различными субстратами.

Для создания полифункциональных соединений на основе 1-аминофосфонатов представляется интересным использовать макроциклические платформы, такие как тиакаликс[4]арены, которые позволяют разметить полифункциональные группы в пространстве определенным образом. Они имеют преимущество в виде возможности создания трех устойчивых конфигураций (*конус, частичный конус, 1,3-альтернат*) наряду с нетоксичностью и относительной лёгкостью функционализации платформы.

В этой работе мы сообщаем о синтезе производных *n*-трет-бутилтиакаликс[4]арена, содержащих по два α -аминофосфонатных фрагмента на нижнем ободе макроцикла. Структура полученных соединений охарактеризована ЯМР ^1H , ^{13}C , ИК спектроскопией, а состав – элементным анализом. Также с помощью метода ДСР была оценена способность к самосборке полученных макроциклов.

Работа была выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда № 18-73-10094-П

УДК 547.639.5

СИНТЕЗ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНОВ, СОДЕРЖАЩИХ АМИДНЫЕ, ПЕРВИЧНЫЕ АМИНОГРУППЫ И СЛОЖНОЭФИРНЫЕ ФРАГМЕНТЫ

Шилова И.В., Стойков И.И.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: y100xy@mail.ru

Ключевые слова: синтез, тиакаликс[4]арен, макроцикл

Транспорт ионов через биологические мембраны является важным процессом, регулируемым встроенными в мембрану насосами, каналами и переносчиками, который поддерживает гомеостаз ионов и рН в клетках. Создание синтетических переносчиков и трансмембранных каналов было обусловлено потенциалом применения этих супрамолекулярных структур в лечении заболеваний, вызванных нарушением транспорта ионов.

Для создания эффективных и селективных трансмембранных переносчиков биологически значимых субстратов могут быть использованы производные тиакаликс[4]арена, благодаря их уникальной трехмерной структуре и возможности существования различных стереоизомеров. Тиакаликс[4]арен является уникальной макроциклической платформой, которая может сочетать в своей структуре как гидрофобную часть, необходимую для встраивания в фосфолипидную мембрану, так и участки, необходимые для связывания ионов, и полярные фрагменты, необходимые для изучения взаимодействия в биологических средах (вода, буферные растворы), выступая в качестве мультивалентного лиганда.

В данной работе синтезированы производные тиакаликс[4]арена, содержащие амидные и первичные аминогруппы, а также сложноэфирные фрагменты в конфигурациях *конус*, *частичный конус* и *1,3-альтернат*, которые могут быть использованы для разработки трансмембранных переносчиков различных субстратов. Структура полученных соединений установлена комплексом физических методов.

Работа выполнена при финансовой поддержке Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

УДК 547.562.4+547.6+547.542+541.49

**ЛИГАНДЫ САЛЕНОВОГО ТИПА НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ
(ТИА)КАЛИКС[4]АРЕНОВ С О-ВАНИЛИНОВЫМИ ФРАГМЕНТАМИ В
КАЧЕСТВЕ СТОИТЕЛЬНЫХ БЛОКОВ ДЛЯ КОНСТРУИРОВАНИ
МАГНИТОАКТИВНЫХ КОМПЛЕКСОВ**

Шутилов И.Д.², Стрельникова Ю.В.^{1,2}, Овсянников А.С.¹, Исламов Д.Р.¹, Пятаев А.В.², Дороватовский П.В.³, Лазаренко В.А.³, Литвинов И.А.¹, Губайдуллин А.Т.¹, Соловьева С.Е.¹, Антипин И.С.^{1,2}

¹ Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
Russia, Kazan, A.E. Arbuzov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences

² Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan Federal University

³ Россия, Москва, Национальный Исследовательский центр «Курчатовский институт»
Russia, Moscow, National Research Center «Kurchatov Institute»

Ключевые слова: (тия)каликс[4]арены, основания Шиффа, лиганды саленового типа, координационные соединения.

Макроциклические основания Шиффа в процессе комплексообразования способны хелатировать ионы *d*-/*f*-металлов, образуя гомо-, гетеро-полиядерные комплексы [1]. При координации с парамагнитными катионами *d*- и *f*-элементов могут быть получены новые полифункциональные комплексы [2-4].

В настоящей работе представлен синтез серии новых, а также ранее известных оснований Шиффа на основе дизамещённых иминопроводных *трет*-бутилкаликс[4]арена, содержащих *о*-ванилиновый фрагмент в заместителе при иминном атоме азота, и их комплексов с катионами переходных металлов.

Работа выполнена при финансовой поддержке РФФ № 22-73-10139.

Список литературы

1. Chaabane L., Chahdoura H., Moslah W., Snoussi M., Beyou E., Lahcini M., Srairi-Abid N., Baouab M. H. V. *Appl. Organomet. Chem.* **2019**, 33(5), 4860.
2. Y. Lu, *Appl. Organomet. Chem.* **2022**, 37(1),
3. W. Zoubi, *International Journal of Organic Chemistry.* **2013**, 3, 73-95.
4. M. More, P. Joshi, Y. Mishra, P. Khanna, *Materials Today Chemistry.* **2019**, 14, 2468-5194.

СЕКЦИЯ 5

*Фармацевтическая и медицинская химия. Химия
природных соединений.*

УДК 547.823+547.787.1

СИНТЕЗ СОЕДИНЕНИЙ ОКСАЗОЛИДИНОВОГО РЯДА, СОДЕРЖАЩИХ ФРАГМЕНТЫ ПИРИДОКСИНА

Акчурин А.С., Азметов Т.Р., Сапожников С.В., Штырлин Н.В., Штырлин Ю.Г.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: ASakchurin@stud.kpfu.ru

Ключевые слова: пиридоксин, оксазолидиноны.

Оксазолидиноны являются одним из наиболее эффективных в отношении резистентных штаммов грамположительных бактерий классов антибактериальных препаратов. Несмотря на высокую эффективность им присущ ряд недостатков, в частности, отсутствие действия в отношении грамотрицательных бактерий, а также большое количество побочных эффектов. В продолжение систематических исследований по разработке противомикробных средств на основе пиридоксина (витамина В₆), проводимых в нашей исследовательской группе [1], в настоящей работе в 9 стадий были синтезированы соединения оксазолидинонового ряда, содержащие в составе фрагмент пиридоксина (схема 1).

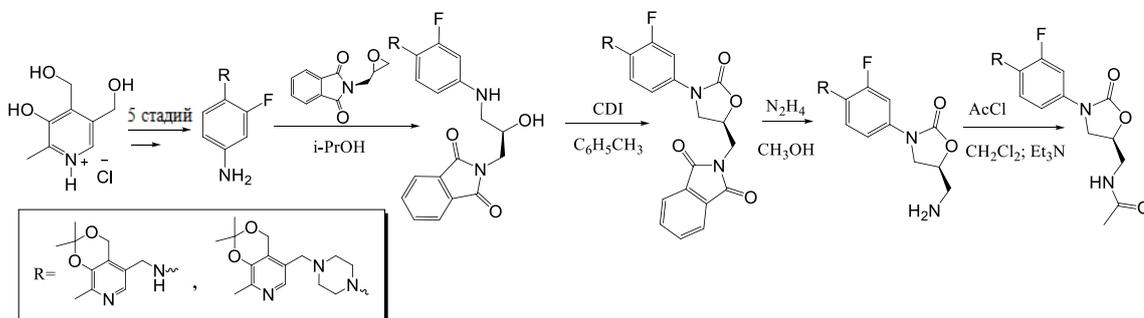


Схема 1. Синтез соединений оксазолидинонового ряда, содержащих фрагменты пиридоксина

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности №FZSM-2022-0018.

Список литературы

1. Химия пиридоксина в разработке лекарственных средств / Ю.Г. Штырлин, М.Н. Агафонова, О.В. Бондарь и др. – Казань: Издательство Казанского университета, 2022. – 164 с.

УДК 547.823

СИНТЕЗ И АНТИГЛИКИРУЮЩИЕ СВОЙСТВА АЗОПРОИЗВОДНЫХ ПИРИДОКСИНА

Белова М.А., Стрельник А.Д., Фафанова Е.М., Штырлин Ю.Г.

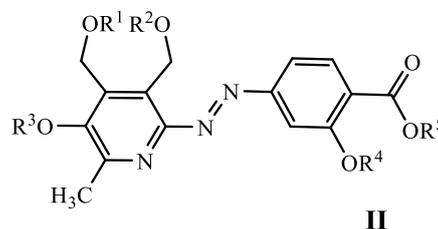
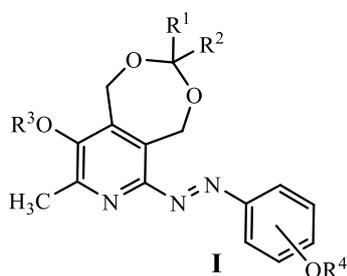
Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: MarABelova@stud.kpfu.ru

Ключевые слова: антигликирующие свойства, производные пиридоксина, конечные продукты гликирования.

Образование конечных продуктов гликирования (КПГ) является одной из основных причин развития осложнений при сахарном диабете II типа. В мире ведутся активные поиски соединений, ингибирующих образование КПГ, но внедренных в клиническую практику препаратов с таким видом активности нет. В настоящей работе 6-стадийным синтезом получен ряд азопроизводных пиридоксина с мета- и пара-аминофенольными фрагментами (I), а также с фрагментами 4-аминосалициловой кислоты (II) и исследована их антигликирующая активность *in vitro*.



$R^1 = \text{H, CH}_3; R^2 = \text{H, CH}_3, \text{C}_2\text{H}_5, \text{C}_3\text{H}_7, \text{C}_5\text{H}_{11}, \text{C}_8\text{H}_{17}; R^3 = \text{H, Na}; R^4 = \text{SO}_2\text{CH}_3, \text{H}$

$R^1, R^2 = \text{H}; R^1 + R^2 = \text{CH}_2, \text{C}(\text{CH}_3)_2, \text{C}(\text{C}_2\text{H}_5), \text{C}(\text{C}_3\text{H}_7); R^3 = \text{H, Na}; R^4 = \text{Allyl, H}; R^5 = \text{Allyl, Na}$

Все полученные соединения значительно активнее реперного соединения амингуанидина ($\text{IC}_{50} = 527$ ммоль), при этом IC_{50} соединений-лидеров в 20-50 раз меньше ($\text{IC}_{50} = 11-23$ ммоль).

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности №FZSM-2023-0010.

УДК 547.481+546.183.548.737

СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОТИВОМИКРОБНЫХ СОЛЕЙ МЕТИЛТРИФЕНИЛФОСФОНИЯ

Бызов М.А., Романов С.Р., Бахтиярова Ю.В.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

E-mail: maksim.byzov2004@gmail.com

Ключевые слова: трифенилфосфин, соль фосфония, галогенкарбоновая кислота, противомикробная активность.

Четвертичные фосфониевые соли давно зарекомендовали себя как соединения, обладающие широким спектром биологической активностью. На их основе разрабатываются противопаразитарные, противомикробные лекарственные препараты. Также известна противораковая и антиоксидантная активность данных структур.

В настоящей работе были изучены подходы к синтезу солей метилтрифенилфосфония с различными анионами. На первом этапе были получены бромид и хлорид (схема 1).

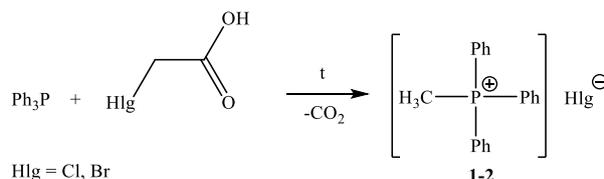


Схема 1

Для синтеза иодида и трииодида в реакцию с трифенилфосфином вовлекали иодистый метил (схема 2). Кроме того, был синтезирован нитрат метилтрифенилфосфония **5**, по реакции ионного обмена.

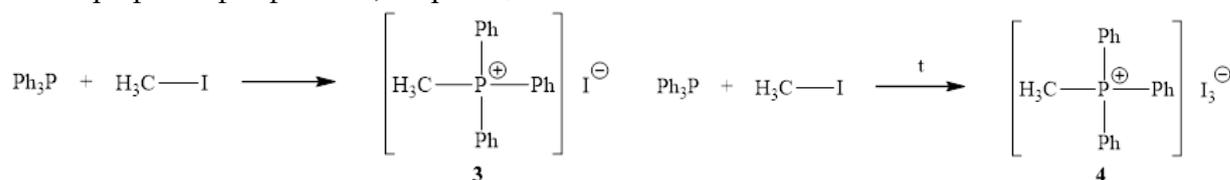


Схема 2

Таким образом, был синтезирован и охарактеризован ряд фосфониевых солей с различными анионами и изучены их противомикробная и антимикотическая активности. По результатам исследований можно сделать вывод, что наиболее удачными кандидатами для дальнейшего изучения стали хлорид и нитрат метилтрифенилфосфония.

УДК 615

ИССЛЕДОВАНИЕ АНАЛЬГЕТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ И ТОКСИЧНОСТИ *IN VIVO* ТРИС-ЭФИРНОГО ПРОИЗВОДНОГО ПИРИДОКСИНА И КЕТОРОЛАКА

Васильева О.С., Маланьева А.Г., Пугачев М.В., Агафонова М.Н., Штырлин Ю.Г.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: OISVasileva@kpfu.ru

Ключевые слова: производные пиридоксина, нестероидные противовоспалительные лекарственные средства, кеторолак, анальгетическая активность.

Нестероидные противовоспалительные средства (НПВС) относятся к одной из наиболее широко применяемых в мире группе лекарственных препаратов. При такой широкой распространенности хорошо известные побочные эффекты НПВС (поражение сердечно-сосудистой системы, желудочно-кишечного тракта и т.д.) оказывают значительное влияние на здоровье людей в масштабах всей популяции. По этой причине актуальным является создание НПВС нового поколения, которые обладали бы более высокой эффективностью, переносимостью и безопасностью.

В продолжение систематических исследований производных пиридоксина в настоящей работе осуществлен синтез *трис*-эфирного производного по реакции этерификации (по Стеглиху) из пиридоксина и известного НПВС - кеторолака. Исследования острой токсичности *in vivo* на крысах показали, что полученное соединение является значительно более безопасным ($LD_{50} > 1200$ мг/кг) на фоне кеторолака (значение LD_{50} по литературным данным составляет 89 мг/кг). При этом, в тесте «горячая пластина» на крысах линии Wistar трис-эфир пиридоксина обладает и более высокой анальгетической активностью по сравнению с кеторолаком, который признан наиболее мощным из всех известных НПВС анальгетиком короткого действия. Совокупность полученных данных указывает на целесообразность проведения в дальнейшем углубленных доклинических исследований.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности № FZSM-2023-0010.

УДК 544.165

МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНГИБИРОВАНИЯ P-ГЛИКОПРОТЕИНА

Вендин М. В.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan federal university

E-mail: mv.vendin@gmail.com

Ключевые слова: P-гликопротеин, P-gp, множественная лекарственная устойчивость, QSAR-моделирование, машинное обучение

P-гликопротеин (P-gp) - трансмембранный белок, транспортирующий молекулы через различные барьерные ткани, включая ткани кишечника, почек, печени и мозга [1]. P-gp защищает организм от нежелательных веществ, но его высокая экспрессия снижает эффективность лекарств и способствует развитию множественной лекарственной устойчивости, в том числе, при противоопухолевой терапии [2].

Из базы данных ChEMBL [3], на основе информации о концентрации полумаксимального ингибирования (IC₅₀) и разработанной классификации биологических экспериментов, был отобран набор из 1878 молекул. Подобраны оптимальные пороги разделения классов (≤ 1 мкМ и ≥ 10 мкМ IC₅₀), распределение которых: 787/613/478 (ингибитор/малоактивный ингибитор/неингибитор). Для разработки моделей ингибирования P-gp были применены различные методы машинного обучения. Лучшими алгоритмами по результатам тернарных и бинарных классификационных экспериментов оказались метод опорных векторов и метод случайного леса с 5-кратной скользящей валидацией. Сбалансированная точность моделей составила 79,5 % и 95,5 %, при размерах тестовых выборок 253 и 155 молекул, соответственно. Регрессионная модель, полученная на основе метода случайного леса, на тестовой выборке размером 253 молекулы показала коэффициент детерминации (R^2) равный 0,725, при среднеквадратичной ошибке (RMSE) 0,494. Разработанные модели могут быть использованы при виртуальном скрининге больших баз данных для ускорения процесса поиска новых лекарственных соединений.

Список литературы

1. Thomas, C. Structural and Mechanistic Principles of ABC Transporters / R. Tampé // Annual Review of Biochemistry. - 2020. - 89(1). - С. 605-636.
2. Zhang, H. Chemical molecular-based approach to overcome multidrug resistance in cancer by targeting P-glycoprotein (P-gp) / H. Xu, C.R. Ashby, Y.G. Assaraf, Z.S. Chen, H.M. Liu // Medicinal Research Reviews. - 2021. - 41(1). - С. 525-555.
3. ChEMBL : сайт. – URL: <https://www.ebi.ac.uk/chembl/> (дата обращения: 16.04.2023)

УДК 544.13

ПРИМЕНЕНИЕ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В МОДЕЛИРОВАНИИ ИНГИБИРУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ МАЛЫХ МОЛЕКУЛ ПО ОТНОШЕНИЮ К ЦИТОХРОМАМ P450

Едиге А. Е.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: edeegeridoo@gmail.com

Ключевые слова: искусственные нейронные сети, ингибирование ферментов.

Предсказание поведения малых молекул в процессе метаболизма в организме человека является важной задачей в разработке лекарств. Приблизительно 70 % современных лекарственных средств метаболизируется ферментами CYP450 в печени человека. Ингибирование этих ферментов приводит к нежелательным эффектам, поэтому важны оценка и прогноз ингибирующей способности молекул. Для оценки ингибирующей способности используется концентрация половинчатого эффекта IC50, основываясь на которой можно классифицировать вещества на ингибиторы и неингибиторы. Однако значение IC50 не позволяет оценить ингибирующую способность молекул при произвольной концентрации.

Целью данной работы является построение моделей, способных предсказывать ингибирующую способность малых молекул по отношению к CYP450 при определенной концентрации.

Для построения моделей использовались данные высокопроизводительного скрининга из PubChem BioAssay AID 1851 [2]. Данные были проанализированы путем построения кривых ингибирования. Для построения кривых использовалась устойчивая к выбросам в данных нелинейная регрессия, лежащая в основе метода обнаружения выбросов в данных ROUT [3]. Для предсказания ингибирующей способности молекул были построены модели на основе искусственных нейронных сетей, а также классических методов машинного обучения, таких как метод k-ближайших соседей, метод опорных векторов (SVM) и случайный лес (Random Forest).

Список литературы

1. AID 1851 - Cytochrome panel assay with activity outcomes – PubChem [Электронный ресурс] // URL: <https://pubchem.ncbi.nlm.nih.gov/bioassay/1851> (Дата обращения: 05.03.2022).
2. Motulsky H. J. Detecting outliers when fitting data with nonlinear regression – a new method based on robust nonlinear regression and the false discovery rate / H. J. Motulsky, R. E. Brown // BMC Bioinformatics. – 2006. – Т. 7. – № 1. – С. 123.

УДК 547.6

30-АЗИДОБЕТУЛИН В РЕАКЦИИ Cu-КАТАЛИЗИРУЕМОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ

Ерашов И.А., Идрисова Л.Р., Немтарев А.В., Миронов В.Ф.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

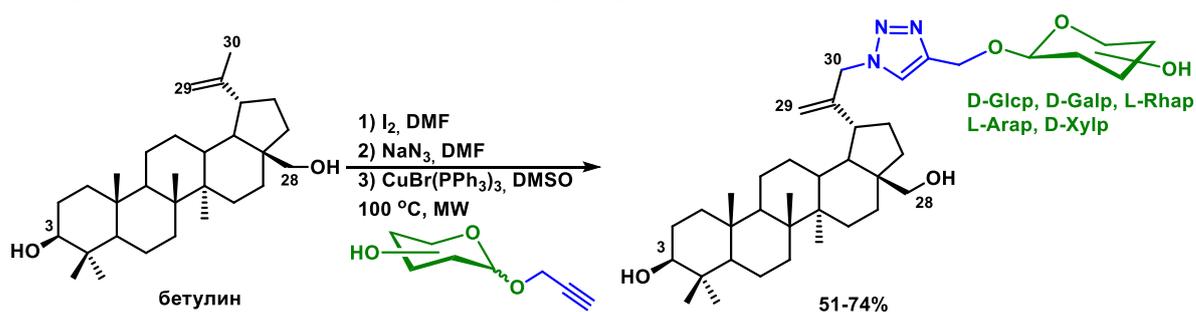
E-mail: ilaya-007@yandex.ru

Ключевые слова: бетулин, пропаргилгликозиды, гликоконъюгаты, CuAAC, MW, 1,2,3-триазолы.

Лупановые пентациклические тритерпеноиды - доступные природные соединения с широким спектром биологической активности. В частности, бетулин - удобный скаффолд для направленной химической модификации [1].

Введение фрагментов сахаров в структуру биологически активных молекул - хорошо зарекомендовавший себя подход, позволяющий не только понижать logP, варьировать показатели ADME, но и увеличивать селективность воздействия на конкретные биомишени.

В работе представлены экспериментальные данные по синтезу гликоконъюгатов на основе функционализированных производных бетулина и пропаргилгликозидов в условиях реакции CuAAC. Пропаргилгликозиды были получены с использованием серной кислоты, иммобилизированной на силикагеле [2]. Найдено, что 30-азидобетулин эффективно вступает в реакцию медь-катализируемого азид-алкинового циклоприсоединения с незащищенными пропаргилгликозидами.



Список литературы

1. Г.А. Толстикова, О.Б. Флехтер, Э.Э. Шульц, Л.А. Балтина, А.Г. Толстикова // Химия в интересах устойчивого развития. 2005. Т. 13. С. 1-30.
2. Roy, B. Sulfuric acid immobilized on silica: an excellent catalyst for Fischer type glycosylation / B. Roy, B. Mukhopadhyay // Tetrahedron Lett. 2007. V. 48. № 22. P. 3783-3787.

УДК 544.165+615.22

НОВЫЕ ИНГИБИТОРЫ ИЗОФОРМ ЦИКЛООКСИГЕНАЗ НА ОСНОВЕ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРАЗОЛА

Исламов Д.И., Хайруллина В.Р., Мартынова Ю.З., Максимов Л.С.

Россия, Уфа, Уфимский университет науки и технологии

Russia, Ufa, Ufa University of Science and Technology

E-mail: Veronika1979@yandex.ru

Ключевые слова: докинг, ингибиторы изомерных форм циклооксигеназ, Autodock 4.2.6, AutoDock Vina.

Целью настоящей работы был виртуальный скрининг 10 производных пиразола (ChEMBL1235806, ChEMBL27733, ChEMBL29620, ChEMBL29899, ChEMBL1652453, ChEMBL3601277, ChEMBL1766285, ChEMBL29766, ChEMBL29840, ChEMBL129021) и поиск среди них потенциальных ингибиторов изоформ циклооксигеназ (ЦОГ-1/ЦОГ-2).

Исследования проводились методом молекулярного докинга с помощью программ: Autodock 4.2.6 и AutoDock Vina 1.2.0. Коды макромолекул белков – 3N8X и 1PXX для ЦОГ-1 и ЦОГ-2, соответственно. Расчёты проводились параметрами по умолчанию. В ходе расчетов молекулы белков были жесткими в то время как молекулы лигандов были подвижными. Размер трехмерного бокса в который проводили позиционирование лигандов, составлял 22 Å. За центр бокса принимали положения нативных лигандов: нимесулида для ЦОГ-1 и диклофенака для ЦОГ-2. Установлено что 9 из 10 изученных лигандов, за исключением соединения ChEMBL1652453 могут быть эффективными, но неселективными ингибиторами обеих изоформ циклооксигеназ.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

Список литературы

1. Хайруллина, В.Р. Стерическая комплементарность конъюгатов некоторых производных 5-амино- и 5-гидрокси-6-метилурацила с бензойной кислотой с тимидилаткиназой вируса простого герпеса человека первого типа / В.Р. Хайруллина, Ю.З. Мартынова [и др.] // Вестник Баш-го ун-та. – 2021. – Т. 26. – С. 975–981.
2. Хазимуллина Ю.З., Синтез и исследование противовоспалительной активности новых производных пиримидина – ингибиторов изоформ циклооксигеназ / Ю.З. Хазимуллина, А.Р. Гимадиева, В.Р. Хайруллина [и др.] // Биоорганическая химия. – 2022. – Т. 48. – С. 569–579.

УДК 547.96+577.112.7

ВЛИЯНИЕ КАТИОНОВ МЕТАЛЛОВ НА ФИБРИЛЛООБРАЗОВАНИЕ α -ЛАКТАЛЬБУМИНА

Кузиванова П.Р., Богданова Л.Р., Седов И.А.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: chemli@mail.ru

Ключевые слова: α -лактальбумин, амилоидные фибриллы, цинк, полиморфизм.

α -Лактальбумин – небольшой глобулярный белок молочной сыворотки, участвующий в регуляции биосинтеза лактозы. *In vivo* он всегда связан с ионом кальция, но способен связывать и другие катионы, что приводит к изменению его структуры и стабильности. В мягких денатурирующих условиях α -лактальбумин может переходить в конформацию «расплавленной глобулы», что делает его удобным модельным белком для изучения денатурации и агрегации.

Цель работы заключалась в изучении механизмов влияния ряда катионов металлов на амилоидную агрегацию (фибриллообразование) α -лактальбумина. В качестве потенциальных эффекторов использовались хлориды магния, кальция, марганца, меди, цинка и стронция. Для наблюдения за кинетикой процесса использовались тиофлавин Т и конго красный. Установлено, что на процесс фибриллообразования значительно влияет хлорид цинка: наблюдается усиление флуоресценции тиофлавина Т. Для остальных катионов достоверно значимых изменений не обнаружено.

Получены температурные зависимости спектров кругового дихроизма для лактальбумина в воде и при добавлении хлорида цинка. Установлено, что добавление хлорида цинка не приводит к существенным изменениям структуры и стабильности белка. Методом атомно-силовой микроскопии показано, что при этом происходит изменение структуры фибрилл: уменьшается доля сферических агрегатов, что и является причиной наблюдаемых изменений флуоресценции.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («ПРИОРИТЕТ-2030»).

УДК 577.322.7

ФИБРИЛЛООБРАЗОВАНИЕ АЛЬБУМИНА В ПРИСУТСТВИИ ЛИГАНДОВ С РАЗЛИЧНОЙ АФФИННОСТЬЮ

Ли Ц., Хайбрахманова Д.Р., Седов И.А.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: lzy9946@gmail.com

Ключевые слова: амилоидные фибриллы, альбумин, кинетика фибриллообразования, дифференциальная сканирующая калориметрия.

Из-за неправильного сворачивания белков в организме человека возможно образование упорядоченных агрегатов, состоящих из сшитых между собой бета-листов, называемые фибриллами. Их отложение в виде нерастворимых амилоидных бляшек приводит к возникновению нейродегенеративных заболеваний. В настоящее время не найдено эффективных лекарств, которые бы замедляли образование фибрилл и разрушали в организме уже имеющиеся агрегаты. Большое значение имеет изучение механизмов фибриллообразования белков, в том числе в присутствии потенциальных ингибиторов.

В настоящей работе проведено исследование влияния связывания лигандов с разной аффинностью, таких как флурбипрофен, ибупрофен, напроксен, варфарин, ранитидин и изониазид, на фибриллообразование человеческого сывороточного альбумина (ЧСА). С использованием дифференциальной сканирующей калориметрии получены кривые денатурации ЧСА без и в присутствии лигандов. По полученным кривым определены доли денатурированной формы при температуре получения фибрилл. С помощью метода спектрофлуориметрии с использованием красителя тиофлавина Т изучена кинетика фибриллообразования ЧСА при различных концентрациях белка при 73°C без и в присутствии лигандов. Полученные результаты позволяют сделать вывод, что прочно связывающиеся с белком лиганды подавляют процесс образования фибрилл, в отличие от со слабо связывающихся. Показано, что вещества, которые прочно связываются с белком и уменьшают равновесную долю его денатурированной формы, существенно снижают количество образующихся фибрилл за счет смещения равновесия между мономерным белком и фибриллами, не влияя при этом на кинетику стадий нуклеации и роста фибрилл.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («ПРИОРИТЕТ-2030»).

УДК 547.448

НОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ СУЛЬФАНИЛАМИДА С ПОТЕНЦИАЛЬНЫМ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫМ И АНТИМИКРОБНЫМ ДЕЙСТВИЕМ

Малянова А.В., Цепяева О.В., Немтарев А.В., Миронов В.Ф.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

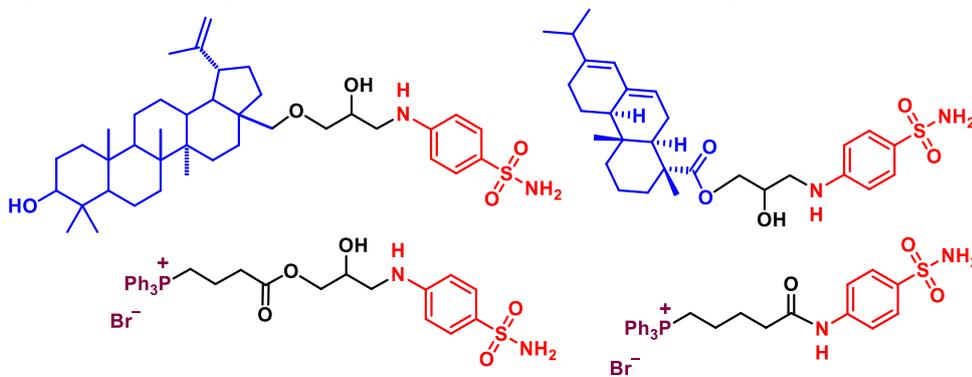
Russia, Kazan, Kazan federal university

E-mail: malyanovaalina01@gmail.com

Ключевые слова: сульфониламид, стрептоцид, фосфониевая соль, глицидиловый эфир, терпеноиды.

В настоящее время исследования в области синтеза соединений, содержащих сульфониламидный фрагмент получили “второе дыхание”, что обусловлено обнаружением у последних новых видов биологической активности. Сочетание в структуре одного соединения сульфаниламидного и иного фармакофорного фрагментов позволяет придать конъюгату свойство мультитаргетности и корректировать побочные эффекты.

В данной работе обсуждаются вопросы синтеза сульфаниламидных соединений нового поколения, представляющих собой вещества, сочетающие фармакофорные и векторные функции: сульфаниламидные, терпеноидные и фосфониевые.



Работа выполнена при поддержке Программы стратегического академического лидерства КФУ («Приоритет-2030»).

УДК 544.13

ПРЕДСКАЗАНИЕ ПРОДУКТОВ РЕАКЦИЙ НА ОСНОВЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО ГРАФА РЕАКЦИЙ С ПОМОЩЬЮ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ

Муканов А.Р.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: nostro32@mail.ru

Ключевые слова: КИПС, граф реакций.

В органической химии, особенно в поиске новых лекарственных препаратов, основной задачей является синтез сложных молекул из простых строительных блоков. Компьютерные инструменты планирования синтеза (КИПС) могут помочь исследователям в поисках наиболее сложных и необычных синтезов. Долгое время в КИПС для генерации продуктов в реакциях использовались вручную или автоматически извлеченные правила ретросинтетической трансформации, которые применялись к исходным продуктам. Однако задание правил трансформации вручную - сложная и времязатратная задача, а заданные правила могут не покрывать все множество областей органического синтеза.

Описанные проблемы могут быть решены с использованием нейронных сетей и глубокого обучения. Их использование позволяет избежать упомянутых проблем поскольку не требует задания правил и потенциально может понимать общие правила реагирования молекул. Сама модель может быть обучена на большом количестве разнообразных реакций, протекающих в широком диапазоне условий. Один из наиболее успешных подходов данного типа использовал для предсказания продуктов химических реакций языковые модели на основе нейронных сетей. Недостатком данного подхода является то, что в отдельных случаях предсказанные продукты могут совершенно не соответствовать реагентам. Для устранения данного недостатка нами был разработан подход предсказания продуктов реакций на основе конденсированного графа, особенностью которого является кодирование не только структур реагентов и продуктов, но и реакционной трансформации (типа реакции). Сгенерированный конденсированный граф реакции может быть развернут в исходную реакцию, что позволяет сопоставить предсказанные реагенты с истинными и валидировать предсказания.

В работе был разработан подход генерации конденсированного графа реакции генеративной языковой моделью на основе структур реагентов. Была изучена применимость и создаваемые преимущества данного подхода в задаче предсказания продуктов химических реакций.

УДК 547.8

СИНТЕЗ ГИБРИДНЫХ МОЛЕКУЛ НА ОСНОВЕ ПИРИДОКСИНА И АДЕНОЗИНА

Платонова Е.А., Хазиев Р.М., Агафонова М.Н., Казакова Р.Р., Штырлин Ю.Г.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: ElAPlatonova@stud.kpfu.ru

Ключевые слова: пиридоксин, аденозин, цитотоксичность.

В нашей исследовательской группе ранее было показано, что выступающий в качестве кофермента более 140 ферментативных реакций пиридоксин (витамин В₆), представляет собой перспективную медицинско-химическую платформу для разработки социально значимых лекарственных средств, в том числе и противовирусных.

В настоящей работе 10-стадийным синтезом получен ряд производных пиридоксина, содержащих в четвертом, пятом или шестом положениях фрагмент природного соединения - аденозина. Исследования биологической активности синтезированных соединений *in vitro* показали, что эти гибридные соединения, содержащие в своем составе два природных фрагмента, представляют интерес для дальнейших исследований. Так, некоторые производные пиридоксина обладают достаточно высокой антиоксидантной активностью (40-70 мкМ) и низкой цитотоксичностью в отношении трех условно-нормальных типов клеток: клеток печени Ch.L, мезенхимальных стволовых клеток MSC и фибробластов HSF.

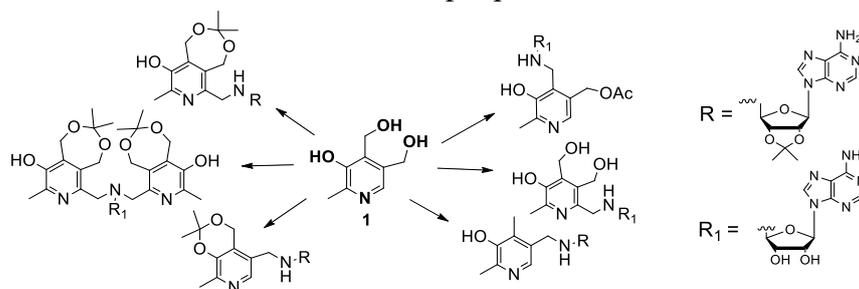


Рис. 1. Производные пиридоксина, содержащие фрагмент аденозина

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности №FZSM-2022-0018.

УДК 542.97+546.98

КИНЕТИКА И МЕХАНИЗМ РЕАКЦИИ ТРИФЕНИЛФОСФИНА С МЕТИЛВИНИЛКЕТОНОМ

Салахетдинова А.Р., Салин А.В.

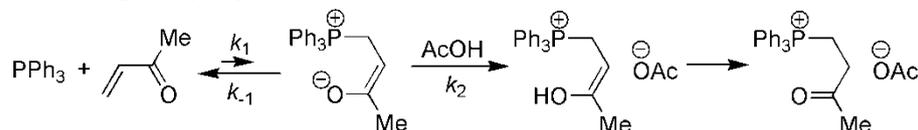
Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: salakhetdinova0100@mail.ru

Ключевые слова: кинетика, третичные фосфины, фосфониевые еноляты.

Метилвинилкетон (МВК) является высокоактивным акцептором Михаэля в фосфин-катализируемых реакциях [1]. Методом остановленной струи изучена кинетика реакции МВК с PPh_3 в среде уксусной кислоты:



Ранее было показано, что для реакций третичных фосфинов с активированными алкенами характерен общий кислотный катализ, и скорость присоединения зависит от природы кислоты и ее концентрации [2]:

$$\text{Скорость} = \frac{k_1}{k_{-1}} k_2 [\text{PPh}_3] [\text{алкен}] [\text{AcOH}] = k_{\text{III}} [\text{PPh}_3] [\text{алкен}] [\text{AcOH}]$$

Экспериментально найденное значение константы скорости третьего порядка k_{III} , не зависящее от концентрации уксусной кислоты, составляет $0.454 \pm 0.007 \text{ М}^{-2} \cdot \text{с}^{-1}$. Рассчитаны активационные параметры реакции: $\Delta H^\ddagger = 27 \text{ кДж} \cdot \text{моль}^{-1}$; $\Delta S^\ddagger = -163 \text{ Дж} \cdot \text{моль}^{-1} \cdot \text{К}^{-1}$. Показано, что электрофильность кратной связи не является фактором, определяющим реакцию способность алкена. Высокая скорость реакции связана со способностью кетонной группы эффективно участвовать в стабилизации фосфониевого енолята.

Работа выполнена при финансовой поддержке гранта РНФ (проект № 23-23-00029).

Список литературы

1. Guo H. Phosphine Organocatalysis / Guo H., Fan Y. C., Sun Z., Wu Y., Kwon O. // *Chem. Rev.* 2018. – 118. – P. 10049-10293.
2. Salin A.V. Addition of triphenylphosphine to electron-deficient alkenes in mixed binary solvents: Overcoming the problem of preferential solvation to determine the reaction order with respect to protic solvent / Salin A.V., Khisamova D.R. // *J. Mol. Liq.*, 2020. – 318. – P. 113911.

УДК 548.6

СПОСОБ ВОСПРОИЗВОДИМОГО ПРИГОТОВЛЕНИЯ МЕТАСТАБИЛЬНОГО ПОЛИМОРФА ФЕНИЛБУТАЗОНА ТВЕРДОФАЗНЫМ ЗАМЕЩЕНИЕМ

Симдянова А.В.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: kemovaanastasia565@gmail.com

Ключевые слова: скрининг полиморфов, приготовление полиморфов, последовательное насыщение, метастабильные полиморфы.

Скрининг полиморфов лекарственных веществ с целью выявления способа воспроизводимого приготовления метастабильных полиморфов является актуальной задачей фармацевтики. Это обусловлено тем, что метастабильные полиморфы обладают большей биодоступностью и проявляют большую биологическую активность из-за их повышенной кинетики растворимости. При этом воспроизводимое приготовление метастабильных полиморфов требует применения сложных процедур с перебором большого числа вариантов. Наиболее оптимальным решением данной проблемы, позволяющим исключить так называемую проблему «исчезающих полиморфов», может являться использование твердофазных процессов в системах «парообразный гость + твердый хозяин» и «парообразный гость + сольват» в равновесных условиях [1].

В настоящей работе показана возможность воспроизводимого приготовления метастабильных α и β полиморфов фенилбутазона (PBZ), рисунок 1. Для этого твердый PBZ, а также его сольваты были насыщены парами различных растворителей при комнатной температуре. Были подобраны вещества, пары которых при последовательном насыщении приводят к изменению упаковки PBZ с образованием метастабильного полиморфа.

Предложенный способ воспроизводимого приготовления метастабильных полиморфных модификаций может быть использован для эффективного скрининга полиморфов лекарственных веществ.

Список литературы

1. Gabdul Khaev M. N., Ziganshin M. A., Buzyurov A. V., Schick C, Solovieva S. E., Popova E. V., Gubaidullin A. T., Gorbachuk V. V. / Smart control of calixarene polymorphic states // CrystEngComm. 2020. V. 22. P. 7002-7015.

УДК 542.9+547.85

СИНТЕЗ И АНТИХОЛИНЭСТЕРАЗНЫЕ СВОЙСТВА НОВЫХ МЕТИЛИРОВАННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ УРАЦИЛА

Сулейманов Э.Г.^{1,2}, Шулаева М.М.², Зуева И.В.², Петров К.А.^{1,2}, Семёнов В.Э.²

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan federal university

²Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН

Russia, Kazan, A.E. Arbuzov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences

E-mail: eduard20001101929@gmail.com

Ключевые слова: ацетилхолинэстераза, урацил, ингибиторы, болезнь Альцгеймера.

Ингибиторы холинэстераз используются в терапии заболеваний, связанных с нарушениями холинэргической передачи, в частности, миастении гравис и болезни Альцгеймера. Нами синтезированы конъюгаты 6-метилурацила, 1,6-диметилурацила и 3,6-диметилурацила с аминобензильными фрагментами, соединенными с гетероциклом посредством полиметиленовых цепочек и содержащих при бензольных кольцах в *meta*- и *para*-положениях метоксикарбонильные группировки. Сложноэфирные группировки в составе полученных соединений гидролизуются до динатриевых и натриевых солей соответствующих двухосновных или одноосновных кислот, в свою очередь солевые формы переводились в кислоты. Соединения с карбоксильными заместителями обладают растворимостью в воде. Структура соединений подтверждена данными ЯМР ¹H и ¹³C-спектроскопии и масс-спектрометрии.

У синтезированных соединений определялись среднеэффективные концентрации IC₅₀ в отношении холинэстераз – ацетилхолинэстеразы (АХЭ) и бутирилхолинэстеразы (БуХЭ), а также индекс селективности SI. Соединения-лидеры ингибируют фермент в наномолярных концентрациях, и проявляют селективность к АХЭ с индексом селективности, достигающим 7 порядков, они умеренно токсичны или малотоксичны, способны проходить через гематоэнцефалический барьер и эффективно ингибировать АХЭ мозга мышей. Биологические эксперименты *in vivo* продемонстрировали способность соединения-лидера уменьшать количества β-амилоидных бляшек в мозгу и восстанавливать когнитивные функции в модели болезни Альцгеймера.

Работа поддержана грантом РНФ № 19-15-00344П.

УДК 615

АЛКИЛАММОНИЕВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ПИРОКАТЕХИНА - ОБРАТИМЫЕ ИНГИБИТОРЫ БУТИРИЛХОЛИНЭСТЕРАЗЫ

Султанова Ж.Н., Паширова Т.Н., Шайхутдинова З.М., Арсеньев М.В., Бухаров С.В.,
Юсупов А.Н., Богданов А.В., Массон П.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: zhsultanova2905@mail.ru

Ключевые слова: бутирилхолинэстераза, пирокатехин, медленно-связывающие ингибиторы.

Известно, что ингибиторы бутирилхолинэстеразы (БХЭ) или двойные ингибиторы ацетилхолинэстеразы и БХЭ обладают улучшенной терапией в отношении болезни Альцгеймера [1]. Целью работы является исследование влияния амфифильных алкиламмониевых ацилгидразонов на основе стерически-загруженных пирокатехинов (*t*-Bu-Pyr-*n*, где *n*=1, 8, 10, 12, 14, 16, 18) на активность БХЭ *in vitro*. Известно, что *t*-Bu-Pyr обладают биологической активностью [2]. Исследование ингибирующей способности *t*-Bu-Pyr проводилось методом спектрофотометрии по методу Элмана. Тип ингибитора и кинетические параметры (K_i , K'_i) были определены при помощи графиков Диксона и Корниш-Боудена. Установлено, что *t*-Bu-Pyr-1 является классическим ингибитором смешанного типа ($K_i=0.04$ мМ; $K'_i=0.28$ мМ; степень диссоциации $\alpha = 6.53$). *t*-Bu-PyrAB-18 является бесконкурентным ($K'_i=0.012$ мМ) и медленно-связывающим (время задержки 8.5 min) ингибитором БХЭ [3]. Методом тензиометрии показано, что *t*-Bu-Pyr-*n* с *n*=16, 18 являются ПАВ с ККМ = 0.04 мМ и 0.03 мМ (фосфатный буфер, 0.1 М, pH=7), соответственно. Таким образом, октадецильное аммониевое производное на основе пирокатехина представляет потенциальный медицинский интерес.

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной в рамках государственной поддержки Казанского (Приволжского) федерального университета в целях повышения его конкурентоспособности среди ведущих мировых научно-образовательных центров.

Список литературы

1. Zhou, S. The biological activities of butyrylcholinesterase inhibitors / S, Zhou, G. Huang // Bio. & Pharmacotherapy. – 2022. – Т. 146. – С. 112556.
2. Bogdanov, A. V. Synthesis and Antimicrobial Activity Evaluation of Ammonium Acylhydrazones Based on 4, 6-Di-tert-butyl-2, 3-dihydroxybenzaldehyde / A. V. Bogdanov et al. // Russ. J. Gen. Chem. - 2022. – V. 92(10). – P. 1875-1886.
3. Masson, P. Slow-binding inhibition of cholinesterases, pharmacological and toxicological relevance / P. Masson, S. V. Lushchekina // Arch Biochem Biophys. – 2016. – V. 593. – P. 60-68.

УДК 54.055

ВЛИЯНИЕ ГИДРАТАЦИИ НАТИВНЫХ ЦИКЛОДЕКСТРИНОВ НА ИНКАПСУЛЯЦИЮ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ

Талашманова С. М., Осельская В.Ю., Гатиатулин А. К.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: ms.talashmanova@gmail.com

Ключевые слова: циклодекстрин, шаровая мельница, механохимия, индометацин, ритонавир

Вода играет важную роль при приготовлении соединений включения циклодекстринов (ЦД) с лекарственными веществами, применяющихся в фармацевтике для повышения биодоступности. Соотношение активирующей и конкурирующей роли воды в связывании «гостя» твёрдым ЦД существенно влияет на эффективность его связывания в твердофазных системах.

В настоящей работе методами совмещённого ТГ/ДСК анализа, порошковой рентгеновской дифрактометрии и ИК-спектromетрии изучалось влияние гидратации на рецепторные свойства натуральных ЦД по отношению к твёрдым лекарственным веществам – индометацину и ритонавиру. Определено соотношение конкурирующей и активирующей роли воды в зависимости от размера макроцикла натурального ЦД и от молекулярной структуры «гостя».

Исследование включения лекарственных соединений – индометацина и ритонавира – позволило выявить влияние гидратации натуральных ЦД при приготовлении соединений включения методом твердофазного перетирания. Показано, что эффективность включения индометацина с бета- и гамма-ЦД в этих условиях существенно зависит от их гидратации. Полученные результаты могут быть полезны при разработке технологических процессов инкапсуляции лекарственных препаратов.

УДК 547.37

ЭФФЕКТИВНЫЙ СИНТЕЗ ТЕРПЕНИЛГЛИЦИДИЛОВЫХ ЭФИРОВ

Титов Е.А.^{1,2}, Немтарев А.В.^{1,2}, Миронов В.Ф.^{1,2}

¹Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan federal university

²Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН

Russia, Kazan, Russia, Kazan, A.E. Arbuzov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian

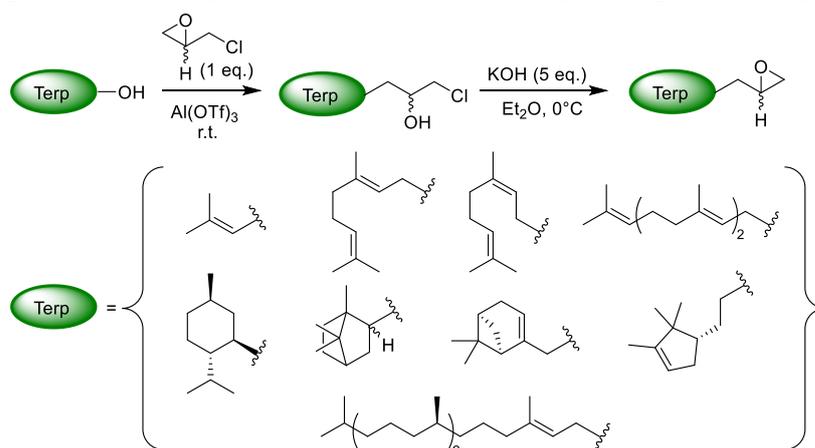
Academy of Sciences

E-mail: EvATitov@kpfu.ru

Ключевые слова: глицидиловые эфиры, терпеновые спирты, эпоксиды, направленная функционализация.

Глицидиловые эфиры, как и все эпоксисоединения обладают широкими синтетическими возможностями по отношению к многим нуклеофильным агентам за счёт наличия напряжённого трёхчленного цикла.

Разработка оптимальных методик введения новых фрагментов в уже функционализированное соединение всё ещё является актуальной задачей на сегодняшний день. Так функционализация глицидиловым остатком в таких химически лабильных структур, как терпеноиды, оказывается нетривиальной задачей. В данной работе предложен двустадийный метод введения глицидильного фрагмента в молекулы терпеновых спиртов в мягких условиях с участием доступных реагентов [1].



Работа выполнена при поддержке МинОбрНауки РФ в рамках субсидии, выделенной КФУ на выполнение государственного задания (FZSM-2023-0018)

Список литературы

1. Mironov V.F.; Nemtarev A.V.; Tsepaeva O.V.; Dimukhametov M.N.; Litvinov I.A.; Voloshina A.D.; Pashirova T.N.; Titov E.A.; Lyubina A.P.; Amerhanova S.K.; Gubaidullin A.T.; Islamov D.R. // *Molecules* 2021, V. 26, N 21, P 6350.

УДК 547.8

СИНТЕЗ ПИРИДОКСИНСОДЕРЖАЩЕЙ АМИНОКИСЛОТЫ

Уразманова К.Р., Хазиев Р.М., Штырлин Ю.Г.
 Россия, Казань, Казанский федеральный университет
 Russia, Kazan, Kazan Federal University
 E-mail: karinaurazmanova@yandex.ru

Ключевые слова: пиридоксин, аминокислота.

В литературе достаточно давно известны производные пиридоксина, содержащие в четвертом и пятом положениях фрагменты аминокислот. Однако, неизвестными до наших работ оставались модифицированные по шестому положению пиридоксинсодержащие аминокислоты. Между тем, в нашей исследовательской группе накопился большой материал в пользу перспектив модификации именно этого положения пиридоксина [1]. По этой причине нами была разработана методика синтеза пиридоксинсодержащей аминокислоты **6**, ключевой стадией которой является генерация *n*-пиридинометида **3**. В дальнейшем соединение **6** представляет интерес в качестве C-концевой аминокислоты при синтезе биоактивных олигопептидов, в равной мере, как и соединение **7** для поиска различных видов биологической активности.

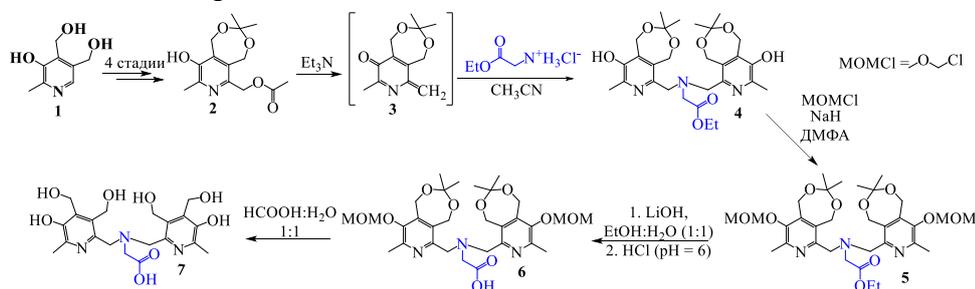


Рис. 1. Методика синтеза пиридоксинсодержащей аминокислоты

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности №FZSM-2022-0018.

Список литературы

1. Штырлин Ю.Г. Химия пиридоксина в разработке лекарственных средств/ Ю.Г. Штырлин, М.Н. Агафонова, О.В. Бондарь и др. - Казань: Издательство Казанского университета, 2022. – 164с.

УДК 547.448

АЦИКЛИЧЕСКИЕ ФОСФОРСОДЕРЖАЩИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ β -ИОНОНА

Урубкова У.П., Шемахина М.Э., Немтарев А.В., Миронов В.Ф.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan federal university

E-mail: urubkovau@inbox.ru

Ключевые слова: β -ионон, фосфорсодержащие производные, фосфонат, фосфоновая кислота, фосфониевая соль.

Терпеноиды представляют собой многообещающий класс биологически активных агентов. Один из представителей циклических монотерпеноидов – β -ионон привлек значительное внимание благодаря своей антимикробной, противовоспалительной и противоопухолевой активности [1], что сделало его прекрасным прекурсором для получения новых биологически активных соединений [2].

В данной работе описываются новые фосфорсодержащие производные β -ионона, а именно фосфонаты **1**, **2** и фосфониевая соль **3** (Рис. 1) с потенциальным антимикробным и противоопухолевым действием [3,4].

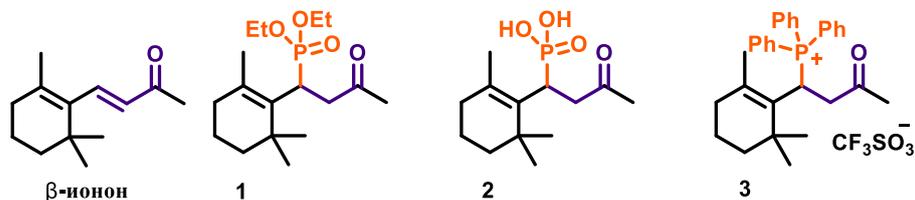


Рис. 1. Структуры β -ионона и его фосфорсодержащих производных

Работа выполнена при поддержке МинОбрНауки РФ в рамках субсидии, выделенной КФУ на выполнение государственного задания (FZSM-2023-0018).

Список литературы

1. Yin, M. Mechanism of antifungal activity and therapeutic action of β -ionone on *Aspergillus fumigatus* keratitis via suppressing LOX1 and JNK/p38 MAPK activation / M. Yin, C. Li, L. Zhang, L. Zhang, J. Lin, N. Jiang, Q. Wang, Q. Xu, H. Zheng, L. Gu, Y. Jia, B. Yu, G. Zhao // *International Immunopharmacology*. – 2022. – Vol. 110. – P. 108992.
2. Grabarczyk, M. Synthesis, biotransformation and biological activity of halolactones obtained from β -ionone / M. Grabarczyk, Katarzyna Wińska, Wanda Mączka, B. Żarowska, G. Maciejewska, K. Dancewicz, B. Gabryś, M. Anioł // *Tetrahedron*. – 2016. – Vol. 72. – P. 637-644.
3. Millard, M. Preclinical Evaluation of Novel Triphenylphosphonium Salts with Broad-Spectrum Activity / M. Millard, D. Pathania, Y. Shabaik, L. Taheri, J. Deng, N. Neamati // *PLoS ONE*. – 2010. – Vol. 5. – N. 10. – P. e13131.4. Horsman, G.P. Phosphonate Biochemistry / G.P. Horsman, D.L. Zechel // *Chemical Reviews*. – 2017. – Vol. 117. – P. 5704–5783.

УДК 544.165:615.22

QSAR-МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНГИБИТОРОВ ЗС-ПОДОБНОЙ ПРОТЕАЗЫ SARS-COV-2 В РЯДУ НЕКОТОРЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ

Федоров Д.А., Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р., Насретдинова Р.Н.

Россия, Уфа, Уфимский университет науки и технологии

Russia, Ufa, Ufa University of Science and Technology

E-mail: Veronika1979@yandex.ru

Ключевые слова: QSAR, GUSAR2019, дескриптор, SARS-CoV-2.

Цель данного исследования заключается в изучении количественной связи между структурой и активностью ингибиторов ЗС-подобной протеазы SARS-CoV-2 на основе параметра pIC_{50} . Для расчетов использовалась программа GUSAR 2019, сокращенно для «General Unrestricted Structure Activity Relationships». [1-2]. Построение QSAR-моделей проводили по методике, описанные авторами в работе [2]. Для описания структур соединений в исследовании применяли два типа дескрипторов: подструктурные и электро-топологические. Для определения наиболее значимых дескрипторов был использован метод самосогласованной регрессии.

Таблица 1

Статистические параметры моделей QSAR M1-M6

OB _i	Дескриптор	N _i	R ² _{OB_i}	F	SD	Q ² _{OB_i}	V	R ² _{ТВ_i}
OB1	QNA	145	0.849	33.209	0.450	0.810	17	0.9431
	MNA		0.879	36.665	0.407	0.845	19	0.9584
	QNA+MNA		0.874	36.659	0.417	0.840	18	0.9602
OB5	QNA	121	0.827	27.831	0.486	0.785	14	0.7303
	MNA		0.843	28.159	0.467	0.804	15	0.8121
	QNA+MNA		0.861	31.303	0.442	0.824	15	0.7799

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

Список литературы

1. Мартынова, Ю.З. Определение констант скорости обрыва цепи радикально-цепного окисления органических соединений на молекулах антиоксидантов методом QSPR / Ю.З. Мартынова, В.Р. Хайруллина, Р.Н. Насретдинова [и др.] // Изв. АН, Сер. хим. – 2020. – №9. – С. 1679-1691.
2. Хайруллина, В.Р. QSAR-моделирование некоторых производных урацила с выраженной ингибиторной активностью в отношении дезоксиуридинфосфоорилазы / В.Р. Хайруллина, Ю.З. Акбашева [и др.] // Вестник Баш-го ун-та. – 2018, – Т.23. – С. 987-993.

УДК 547.9

ФРИДЕЛИН ИЗ ЛИСТЬЕВ КЛЕНА ЯСЕНЕЛИСТНОГО (*Acer negundo* L.)

Шалина А.А., Немтарев А.В., Миронов В.Ф.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: albina.aaf@yandex.ru

Ключевые слова: тритерпеноиды, фриделин, липофильные фракции, клен ясенелистный, природные соединения

Ввиду широкого применения тритерпеноидов в лечебной и медицинской практике, поиск природных источников пентациклических соединений и их направленная химическая модификация являются актуальными задачами современной химии.

Анализ литературных данных показывает, что представители рода Клен (*Acer*) являются ценными источниками физиологически активных веществ: флавоноидов, дубильных веществ, диарилгептаноидов, фенилпропаноидов, терпеноидов и фитостеролов и др. Различные части (корни, листья, кора, ветки и плоды) этих растений используются в качестве пищевых добавок и в составе фармацевтических препаратов в странах Юго-восточной Азии.

Различные части (корни, листья, кора, ветки и плоды) этих растений используются в качестве пищевых добавок и в составе фармацевтических препаратов в странах Юго-восточной Азии.

В докладе обсуждаются экспериментальные данные по выделению и компонентному составу липофильной фракции экстрактивных веществ листьев Клена ясенелистного (*Acer negundo* L.). Показано, что в составе липофильной фракции присутствует тритерпеноид фриделанового ряда – фриделин (фриделан-3-он) (Рис. 1), структура которого подтверждена данными физико-химических методов анализа.

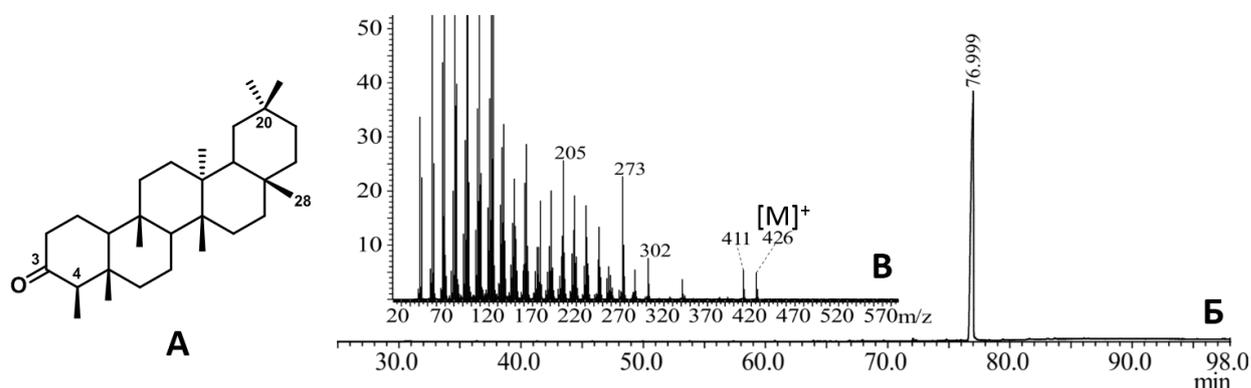


Рис. 1. Структура (А), хроматограмма (Б) и масс-спектр ЭУ (В) фриделина

Работа выполнена при поддержке МинобрНауки РФ в рамках субсидии, выделенной КФУ на выполнение государственного задания (FZSM-2023-0018).

УДК 544.165:615.22

МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ ПРОИЗВОДНЫХ 3,4-ДИГИДРОПИРИМИДИН-2-ТИОНА В АКТИВНЫЙ ЦЕНТР ТИМИДИЛАТКИНАЗЫ

Шарафитдинова Л.И., Хайруллина В.Р., Мартынова Ю.З.

Россия, Уфа, Уфимский университет науки и технологии

Russia, Ufa, Ufa University of Science and Technology

E-mail: sharafitdinova00@mail.ru

Ключевые слова: докинг, ингибиторы тимидилаткиназы, AutoDock Vina, макромолекула 2xx3.

Целью данной работы было изучение стерической комплементарности 40 серосодержащих производных производных 3,4-дигидропиримидин-2-тиона в активный центр тимидилаткиназы (ТМФК). ТМФК играют ключевую роль в синтезе ДНК. ТМФК хорошо известна как потенциальная мишень при разработке противовирусных лекарственных средств.

В качестве модели ТМФК выбрали из PDB макромолекулу с кодом 2xx3. Подготовку структур лигандов и белка проводили в программе AutoDockTools с учетом стереоизомерии. Оптимальное положение лигандов в активном центре ТМФК, а также свободную энергию их взаимодействия с активным центром данного фермента (E_{bind}) определяли методом молекулярного докинга с использованием программы AutoDock Vina. Активный центр макромолекулы помещали в трехмерный бокс размером 22\AA , за центр которого принимали положение нативного лиганда N1-[(E)-4-дигидроксифосфонил-бут-2-этил]-тимина. Результаты исследований позволяют предположить, что все 40 соединений являются эффективными ингибиторами ТМФК. Численные значения свободной энергии связывания, рассчитанные с использованием скоринг-функции в программе AutoDock Vina, для всех 40 соединений практически сопоставимы с аналогичной величиной для естественного субстрата ТМФК – дезокситимидин монофосфата ($E_{\text{bind}} = -7.25$ ккал/моль) и находятся в интервале -4.80 – 8.7 ккал/моль.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда № 19-73-20073, <https://rscf.ru/project/19-73-20073/>.

Список литературы

1. Хайруллина, В.Р. Стерическая комплементарность конъюгатов некоторых производных 5-амино- и 5-гидрокси-6-метилурацила с бензойной кислотой с тимидилаткиназой вируса простого герпеса человека первого типа / В.Р. Хайруллина, Ю.З. Мартынова [и др.] // Вестник Баш-го ун-та. – 2021. – Т. 26. – С. 975–981.

УДК 547.655.6

ЧЕТВЕРТИЧНЫЕ ФОСФОНИЕВЫЕ И АРСОНИЕВЫЕ СОЛИ НА ОСНОВЕ 5-ГИДРОКСИ-1,4-НАФТОХИНОНА

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

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: amshinkarjova@stud.kpfu.ru

Ключевые слова: фосфониевые соли, арсониевые соли, *para*-нафтохиноны, оксинафтохиноны, юглон.

Хиноны широко распространены в природе и на данный момент активно применяются при разработке противоопухолевых, антибактериальных, противогрибковых, противовирусных и противомаларийных средств [1].

Ранее нами был предложен эффективный подход к синтезу полифункциональных четвертичных фосфониевых солей на основе производных *орто*- и *пара*-хинонов [2]. По данному методу был успешно получен ряд фосфониевых и арсониевых солей на основе 5-гидрокси-1,4-нафтохинона и его алкилированного производного (Рис. 1). Несмотря на возможность образования двух региоизомерных солей, что и наблюдалась в реакциях с трифенилфосфином, в реакции с трифениларсином фиксировалось образование единственного продукта.

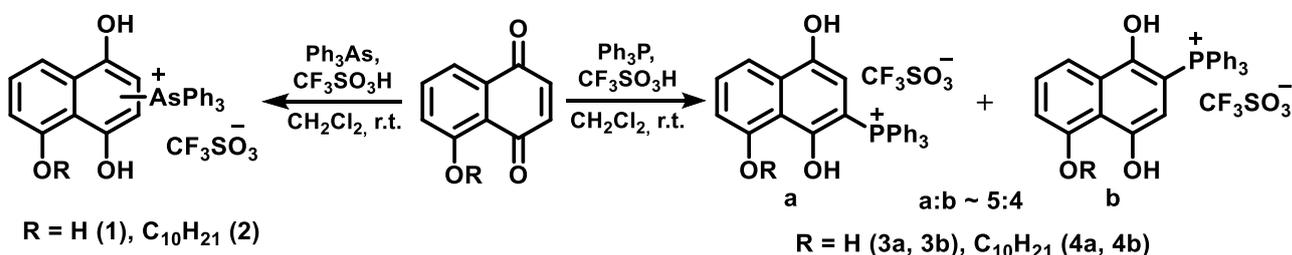


Рис. 1. Схема синтеза соединений 1-4

Для полученных арсониевых солей (1, 2) была оценена цитотоксичность в отношении нормальных и опухолевых клеточных линий человека *in vitro*. Протестированные соединения проявили умеренную цитотоксичность в отношении всех клеточных линий, более активным оказалось соединение 2.

Работа выполнена при поддержке МинОбрНауки РФ в рамках субсидии, выделенной КФУ на выполнение государственного задания (FZSM-2023-0018).

Список литературы

- Zhang, L. Recent advances of quinones as a privileged structure in drug discovery / L. Zhang, G. Zhang, S. Xu, Y. Song // Eur. J. Med. Chem. – 2021. – I. 223. – 113632.
- Khasiyatullina, N.R. Phosphonium salts with a dihydroxynaphthyl substituent: versatile synthesis and evaluation of antimicrobial activity / N.R. Khasiyatullina, A.M. Vazykhova, V.F. Mironov, D.B. Krivolapov, Y.K. Voronina, A.D. Voloshina, N.V. Kulik, A.S. Strobukina // Mendeleev Commun. – 2017. – I. 27(2). – p. 134–136.

УДК 547.458

ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЕКТИНА ВЫДЕЛЕННОГО ИЗ ПРОМЫШЛЕННЫХ ОТХОДОВ

Шукурова М. Ф.

Туркменистан, город Туркменабад, Туркменский государственный педагогический институт имени Сейитназара Сейди

E-mail: matajanshukurova@mail.ru

Ключевые слова: виноград, пектин, экстракция, комплексы пектина.

Основная цель научной работы базируется на принципах экологической чистоты, экономичности производства, а также на научном обосновании важного химического свойства природного пектина, выделенного из отходов винодельческого завода экстракционным методом в кислой среде. Согласно литературным данным, способность пектина к образованию комплексов с тяжелыми металлами мало изучена [1, с. 110].

Пектин обладает способностью образовывать комплексы с ионами тяжелых металлов, и выводить из организма вредные вещества, попадающие в с пищей и водой. Это позволяет использовать его в качестве сорбента в фармацевтике [1, с. 44-46].

В ходе работы методом кислотного экстрагирования нами был извлечен пектин из виноградных выжимок. Способность полученного пектина образовывать комплекс с катионами серебра, мы определили с помощью 0,1 н. раствора азотнокислого серебра. При добавлении раствора нитрата серебра к раствору пектина получен коллоидный раствор. При охлаждении раствора образовывался белый осадок. Путем фильтрации и высушивания осадка был выделен комплекс пектина с катионами серебра.

В ходе исследования нами было определено содержание свободных карбоксильных групп в пектине методом кислотно-основного титрования.

В итоге показана возможность использования выжимки винограда для получения пектина в производственных масштабах.

Список литературы

1. Şükürowa M. Üzümden çakyr öndüryän zawodyň taşlandysyndan pektiniň alnyşy // Türkmenistanda ylym we tehnika – 2019. - №5. – s.110-113.
2. Василенко Ю. К., Кайшева Н. Ш., Компанцев В. А. Сорбционные свойства пектиновых препаратов // Физико-фармацевтический журнал. – 1993. - №3. – С. 44-46.

УДК 547.823 + 579.61

СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЧЕТВЕРТИЧНЫХ АММОНИЕВЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ЭФИРОВ ПЕНТАЭРИТРИТА И ПИРИДОКСИНА

Яндимирова А.С., Сапожников С.В., Штырлин Н.В., Булатова Е.С., Агафонова М.Н.,
Вафина Р.М., Клинова Е.Н., Штырлин Ю.Г.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: ASYandimirova@stud.kpfu.ru

Ключевые слова: пиридоксин, пентаэритрит, биологические свойства.

Одной из основных проблем современного здравоохранения является выработка резистентности микроорганизмов к широко используемым антисептикам, в большинстве своем относящимся к классу четвертичных аммониевых соединений (ЧАС). В продолжение проводимых в НОЦ фармацевтики систематических исследований в области ЧАС на основе пиридоксина [1], была получена серия новых поликатионных бис-, трис- и тетра-ЧАС на основе эфиров пентаэритрита с производными пиридоксина (рис. 1). Некоторые из полученных соединений *in vitro* обладают сопоставимой с препаратами сравнения (мирамистин, бензалкония хлорид) антибактериальной активностью (МИК=2-16 мкг/мл) и более низкой цитотоксичностью в отношении условно-нормальных клеток.

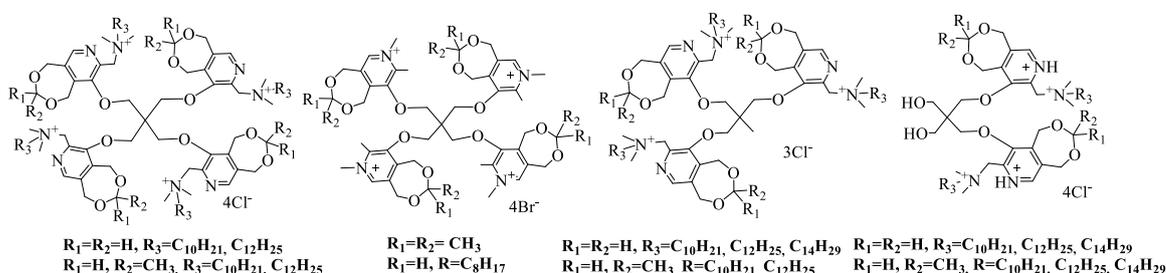


Рис. 1. Структуры ЧАС на основе эфиров пентаэритрита с производными пиридоксина

Работа выполнена за счет средств субсидии, выделенной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности №FZSM- 2022-0018.

Список литературы

1. Штырлин, Ю.Г. Химия пиридоксина в разработке лекарственных средств / Ю.Г. Штырлин, М.Н. Агафонова, О.В. Бондарь и др. – Казань: Издательство Казанского университета, 2022. – 164 с.

СЕКЦИЯ 6

Физико-химические аспекты исследования строения и свойств веществ и материалов

УДК 544.43

ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА И КИНЕТИКИ НЕКАТАЛИТИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ АЗИД-АЛКИНОВОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ

Алешин Р.П.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: msizhir-kniga@mail.ru

Ключевые слова: реакция Хьюзена, азид-алкиновое циклоприсоединение, дифференциальная сканирующая калориметрия, кинетический анализ.

Реакция азид-алкинового циклоприсоединения (ААЦ) в растворах широко изучается для нужд медицинской химии. ААЦ, проводимое вне растворителей, используется для получения полимерных витримеров и адгезивов.

Для ААЦ известны два механизма: согласованный, предполагающий наличие циклического переходного состояния, и пошаговый, заключающийся в образовании ациклического интермедиата. Впрочем, механизм и кинетика промышленно значимых реакций ААЦ вне растворителей ранее изучены не были.

Исследованный вариант ААЦ протекает с образованием двух региоизомеров. Детальный анализ кинетики реакции с помощью дифференциальной сканирующей калориметрии (ДСК) показал равенство значений энергии активации для обоих параллельных процессов ($E_1 = E_2 = 82 \pm 1$ кДж моль⁻¹) (Рис. 1). Кинетика ААЦ была описана в рамках реакционной модели 2-го порядка. Рассчитанные значения энтропии активации для конкурирующих процессов ($\Delta S_1^\ddagger = -115 \pm 1$ Дж моль⁻¹ К⁻¹, $\Delta S_2^\ddagger = -119 \pm 1$ Дж моль⁻¹ К⁻¹) соответствуют согласованному механизму некаталитической ААЦ вне растворителей.

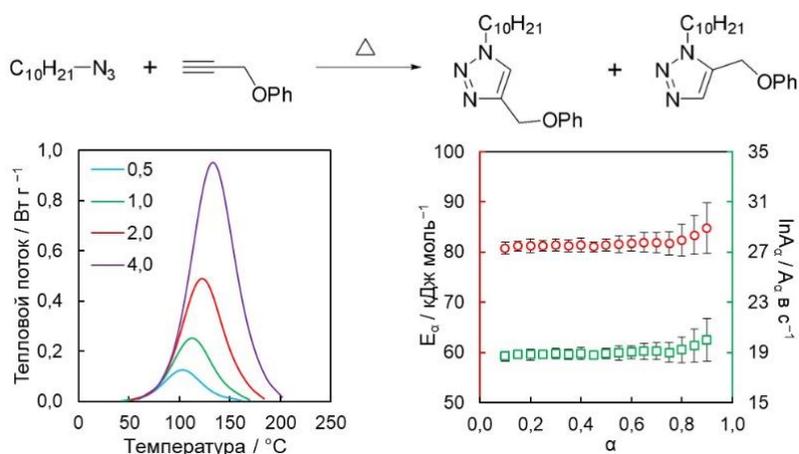


Рис. 1. Кривые ДСК (подписи соответствуют скоростям нагрева) и зависимости эффективных кинетических параметров от конверсии для изученной реакции ААЦ

УДК 547

СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ ЦИАНУРОВОЙ КИСЛОТЫ СПЕЦИАЛЬНОГО НАЗНАЧЕНИЯ И ИЗУЧЕНИЕ ИХ СВОЙСТВ

Аслонова Ф.С., Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М., Холикова Г.К.

Узбекистан, Бухара, Бухарский государственный университет

Uzbekistan, Bukhara, Bukhara State University

Email: b.sh.ganiyev@buxdu.uz

Ключевые слова: циануровая кислота, мочевины, тиомочевина, антипирен, хлопчатобумажные материалы.

В настоящее время в целях реализации стратегии развития легкой промышленности Узбекистана, обеспечивающей развитие инновационной и научной деятельности, одним из направлений является создание прогрессивных технологий по получению новых текстильных материалов с повышенными эксплуатационными свойствами. Создание материалов пониженной горючести достигается путем поверхностной и глубокой пропитки материалов специальными составами, введения антипиренов в состав исходных композиций, использования различных минеральных наполнителей, а также путем использования разнообразных технологических приемов.

На основе циануровой кислоты и ее производных с мочевиной и тиомочевинной получены соединения специального назначения. Изучены составы, физико-химические и антипиреновые свойства [1,2]. По результатам проведенных исследований установлено, что синтезированные соединения проявляют огнезащитные свойства при обработке ими различных целлюлозных материалов (бумага, картонные изделия, хлопчатобумажные материалы, древесина).

По результатам проводимых исследований становится возможным создание новых импортозамещающих материалов специального назначения, используемые в текстильной, строительной промышленности и картонно-упаковочном производстве.

Список литературы

1. B.Sh. Ganiyev, F.S. Aslonova, U.M. Mardonov, J.M. Ashurov. Synthesis and IR-spectroscopy of cyanuric acid urea and thiourea exchange products. 1st Uzbekistan-Japan International Symposium on Green Chemistry and Sustainable Development, Tashkent. November 29-30, 2021. P. 51.
2. Ганиев Б.Ш., Аслонова Ф.С. Лабораторный анализ антипиреновых свойств производных циануровой кислоты. Сборник материалов научно-практической конференции: Беларусь-Узбекистан: формирование рынка инновационной продукции. Минск. 14–15 марта. 2023 г. С.306-308.

УДК 544.31.031

**ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА КАЛОРИМЕТРИИ РАСТВОРЕНИЯ ДЛЯ
ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНТАЛЬПИЙ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ТЕРПЕНОИДОВ ПРИ
298 К**

Бабкин Р.А., Саматов А.А., Нагриманов Р.Н.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: romanbabkin691@gmail.com

Ключевые слова: терпеноиды, энтальпии фазовых переходов, давления насыщенного пара.

Терпеноиды – широко распространенный класс органических природных соединений, которые находят применение в парфюмерной, пищевой промышленности и медицинской индустрии. Для оптимизации процессов очистки терпеноидов, полученных из природных материалов, необходимо знание термодинамических параметров фазовых переходов. Ранее нами было показано, что метод калориметрии растворения обладает очевидными преимуществами по сравнению с конвекционными методами исследования фазовых переходов и позволяет непосредственно определять энтальпии испарения и сублимации при 298 К. Этот метод основан на следующей соотношении [1]:

$$\Delta_{\text{исп/суб}} H^{Ai} = \Delta_{\text{раств}} H^{Ai/S} - \Delta_{\text{сольв}} H^{Ai/S} \quad (1)$$

Так в работе [1] была разработана аддитивная схема расчета энтальпии сольватации в *n*-гептане. Эта схема применялась для расчета энтальпий сольватации исследуемых терпеноидов.

Используя уравнение (1) нами были получены энтальпии испарения 8 терпеноидов при 298К. Было показано, что для миртеналя, цитраля, бисаболола, линалоола, неролидола, полученные в настоящей работе величины хорошо согласуются с литературными данными. Для карвона, пулегона и эвкалиптола наблюдается согласованность между величинами, полученными в настоящей работе и некоторыми литературными данными.

Работа выполнена при поддержке программы стратегического академического лидерства Казанского Федерального Университета («ПРИОРИТЕТ – 2030»).

Список литературы

1. Nagrimanov, R. N. Additive scheme of solvation enthalpy for linear, cyclic and branched-chain aliphatic compounds at 298.15 K / R. N. Nagrimanov, A. A. Samatov, B. N. Solomonov // J. Mol. Liq. - 2019. – V. 292. - 111365.

УДК 544.332

РАСЧЕТ ЭНТАЛЬПИЙ СУБЛИМАЦИИ АРОМАТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, НЕ СПОСОБНЫХ К МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОМУ ВОДОРОДНОМУ СВЯЗЫВАНИЮ, В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУР

Балахонцев И.С.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: jsyoutube@gmail.com

Ключевые слова: термохимия, температурная зависимость энтальпии сублимации, ароматические соединения, расчетная модель.

Данные о термохимии сублимации в широком диапазоне температур представляют интерес при расчёте давления паров и тепловых балансов. Измерение энтальпии сублимации тяжелолетучих органических соединений является нетривиальной процедурой. В зависимости от объекта и доступного оборудования, эксперимент проводится при различных температурах, что осложняет сравнительный и критический анализ литературных величин.

В этой работе была разработана альтернативная модель расчета энтальпии сублимации для ароматических соединений, не образующих межмолекулярные водородные связи и позволяющая проводить сравнительный анализ данных. Она основывается на объединении ранее разработанных в нашей лаборатории моделей, которые предсказывают температурную зависимость энтальпии испарения [1] и плавления [2]. Для проверки модели были собраны данные об энтальпиях сублимации для 38 ароматических соединений, и сравнение с литературными данными показало среднеквадратичное отклонение на уровне 1,4 кДж/моль.

Разработанная модель позволяет получать надежные данные о температурной зависимости энтальпии сублимации при использовании только легко определяемых характеристик соединения, таких как энтальпия растворения, энтальпия плавления при температуре плавления и молекулярная структура.

Список литературы

1. Yagofarov, M.I., Bolmatenkov, D.N., Solomonov, B.N. Relationship between the vaporization enthalpies of aromatic compounds and the difference between liquid and ideal gas heat capacities // J.Chem.Thermodyn. – 2021. – Т. 158. – С. 106443.
2. Yagofarov, M.I., Solomonov, B.N. Interpolation of the Temperature Dependence of the Fusion Enthalpy of Aromatic Compounds Between 298.15 K and the Melting Temperature. // Int J Thermophys – 2022. – Т. 43 – №. 6. – С. 90.

УДК 577.322.7

ФИБРИЛЛООБРАЗОВАНИЕ ЛИЗОЦИМА В ПРИСУТСТВИИ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ

Гайнутдинов Б.Р. , Хайбрахманова Д.Р., Седов И.А.
Россия, Казань, Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan Federal University
E-mail: astronom2412@mail.ru

Ключевые слова: амилоидные фибриллы, лизоцим, агрегация.

Формирование амилоидных фибрилл в организме связано с развитием нейродегенеративных заболеваний. Для изучения процессов фибриллообразования удобно использовать модельные белки, в том числе лизоцим из куриного яйца. В настоящей работе была изучена кинетика фибриллообразования лизоцима в присутствии гидрохлорида гуанидиния в качестве денатуранта – промотора фибриллообразования, а также влияние альгината натрия на процесс роста фибрилл.

Эксперименты проводились в термостате при температуре 60°C и постоянном перемешивании. В ходе экспериментов через определенные промежутки времени отбирались аликвоты исследуемого раствора, которые в дальнейшем исследовались на содержание фибрилл методом флуоресцентной спектроскопии. Для проведения анализа к каждой пробе добавлялся флуоресцентный краситель тиофлавин Т, способный связываться с образовавшимися фибриллами. При связывании интенсивность флуоресценции тиофлавина Т многократно увеличивается, что позволяет определить концентрацию фибрилл в исследуемом образце и построить графики зависимости концентрации от времени инкубирования. На основе изучения влияния концентрации лизоцима на вид этих графиков предложена оригинальная кинетическая схема процесса.

С целью изучения влияния потенциальных ингибиторов на процесс фибриллообразования были проведены в присутствии альгината натрия. Обнаружено замедление процесса при его добавлении и обсужден возможный механизм ингибирования.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («ПРИОРИТЕТ-2030»).

УДК 546+ 54.03

ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИИ ЛИСТОВ ОКСИДА ГРАФЕНА В ЭПОКСИДНОМ ПОЛИМЕРЕ НА ЕГО ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ

Гатауллина Р.М., Спиридонова М.И., Солодов А.Н.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan federal university

E-mail: ramigataullina1999@gmail.com

Ключевые слова: оксид графена (ОГ), наночастицы оксидов железа (НЧОЖ), эпоксидный полимер, трибологические свойства.

На основе эпоксидной смолы ЭД-20 и композитных частиц ОГ/НЧОЖ получены образцы полимерных композитов, отвержденные при разном направлении магнитного поля по отношению к испытываемой поверхности, что привело к разной ориентации флейков ОГ/НЧОЖ в объеме композита (рис. 1а). Для полученных образцов определены коэффициент трения и износ. Характер изнашивания полимерного композита зависит от ориентации флейков ОГ/НЧОЖ. Наиболее высокой степени изнашивания подвержены композиты с N-ориентацией. Это связано с тем, что верхние пределы прочности флейков (при одинаковом усилении внешней нагрузки) достигаются внутри композита раньше при N- ориентация по сравнению с P-ориентацией (рис. 1 б,в). Полученные данные объясняются хрупким разрушением флейков ОГ/НЧОЖ, являющихся концентраторами напряжений, что также приводит к различию профиля изнашивания. Хаотичное расположение флейков ОГ/НЧОЖ приводит, скорее всего, к тому, что в материале происходит распространение трещин в разных направлениях (рис. 1 г). Полученные результаты позволяют использовать нанодобавки ОГ/НЧОЖ для создания износостойких изделий на основе различных полимерных матриц.

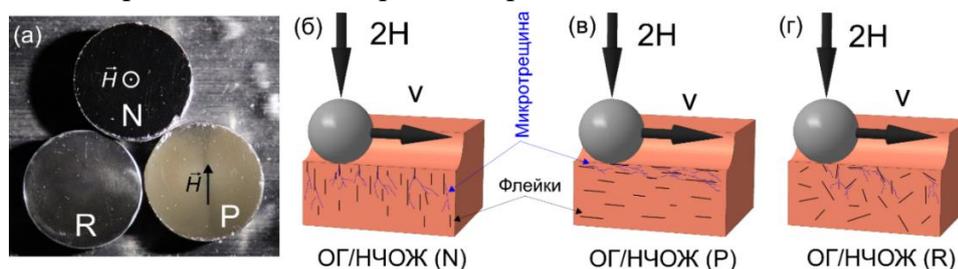


Рис. 1. (а) Фотография образцов полученных эпоксидных композитов с разной ориентацией флейков ОГ/НЧОЖ. (б) Иллюстрация предполагаемого механизма износа.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда, грант № 22-23-00348.

УДК 546.03

3D-ПЕЧАТЬ ВЫСОКОСТАБИЛЬНОЙ ПОЛИМЕРНОЙ КОМПОЗИЦИИ С ПЕРОВСКИТНЫМИ КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ

Зимин К.С., Солодов А.Н., Елисеева Т.Н., Амирова Л.М.

Россия Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: kostzim@list.ru

Ключевые слова: 3D-печать, полипропилен, перовскитные точки.

Люминесцентные наноматериалы находят все большее применение в производстве сцинтилляционных экранов, мощных светодиодов и в производстве жидкокристаллических дисплеев с расширенной цветопередачей. Чаще всего для этого применяются квантовые точки на основе сульфидов или селенидов кадмия или неорганические перовскитные квантовые точки. Последние демонстрируют более высокий квантовый выход люминесценции, высокую термическую устойчивость, а также легкую настройку длины волны люминесценции. Однако они малоустойчивы к влаге и окислению на воздухе.

В работе представлены перовскитные квантовые точки, включенные в полипропиленовую матрицу (PP/PQDs). Полимер выступает в качестве барьера от воздействия окружающей среды на квантовые точки и повышает их стабильность. Устойчивость композиции (PP/PQDs) позволяет перерабатывать ее в различные изделия литьем под давлением, прессованием, 3D печатью методом послойного наплавления (рис. 1). Изделия, полученные методом 3D-печати демонстрируют высокую стабильность и высокие люминесцентные характеристики (квантовый выход люминесценции более 60%). После печати моделей полимер с перовскитными квантовыми точками показал такие же высокие люминесцентные характеристики, а также продемонстрировал высокую стабильность при нахождении в воде (30 дней). Полученный материал может применяться в производстве дисплеев и светодиодов для оптоэлектронной техники.



Рис. 1. Фотография моделей, изготовленных методом 3D-печати из полученной полимерной нити (филамента) с включенными перовскитными квантовыми точками

УДК 546.03

3D-ПЕЧАТЬ СТЕКЛОПОЛНЕННЫМ ПОЛИПРОПИЛЕНОМ НА ТЕРМОПЛАСТИЧНОМ ЛИСТЕ

Ларионов И.С., Балькаев Д.А., Зайнулин Р.Р., Амирова Л.М.

Россия Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: larionov_igor1999@mail.ru

Ключевые слова: 3D-печать, полипропилен, стекловолокно, адгезия.

Среди термопластов особое место в трёхмерной печати занимает полипропилен, обладающий низкой плотностью, высокой химической стойкостью, умеренной жесткостью и очень низкой стоимостью. Добавление в него стекловолокон значительно увеличивает физико-механические свойства полипропилена.

Однако при печати полипропиленом приходится столкнуться со слабой адгезией к другим материалам, из-за чего деталь непрочно закрепляется на поверхности печатного стола и может оторваться во время печати [1]. Решить проблему плохой адгезии полипропилена можно добавлением промежуточной прослойки в виде полипропиленового листа, к которому печатаемый материал будет приплавляться, обеспечивая прочное соединение между деталью и печатным столом [1]. Кроме того, можно получить большую выгоду, если сделать полимерную подложку конструкционной частью детали, что одновременно упростит процесс печати и избавит производителя от некоторых технологических этапов получения готового изделия.

В работе использовался гомополимер полипропилена с массовым содержанием стекловолокон 40% длиной 1-3 мм. В качестве полимерной подложки использовался листовой полипропилен. Печать происходила на принтере Designer XL Pro Series 2. В результате работы было напечатано изделие на полипропиленовой подложке, которая впоследствии стала частью данной детали. Был проведен расчет прочности детали в NX Nastran с испытанием физико-механических характеристик материала, а также была дана оценка возможности применения данной технологии печати в промышленности.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

Список литературы

1. Carneiro O.S., Silva A., Gomes R. Fused deposition modeling with polypropylene / O.S. Carneiro, A. Silva, R. Gomes // Materials & Design. – 2015. – V. 83. – P. 768-776.

УДК 54-161.6

КИНЕТИКА СТЕКЛОВАНИЯ И ФИЗИЧЕСКОЕ СТАРЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ

Зайцева В.Е., Лапук С.Е., Герасимов А.В.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: veronica.zayceva@mail.ru

Ключевые слова: ионные жидкости, температура стеклования, релаксация, сверхбыстрая дифференциальная сканирующая калориметрия.

В настоящее время одним из важных и перспективных направлений исследований остается развитие зеленой химии, целью которой является сокращение производства и утилизации вредных токсичных химических веществ. Это привело к разработке более эффективных, усовершенствованных и экологически чистых продуктов – ионных жидкостей. Их уникальные свойства, такие как химическая и термическая устойчивость, высокая растворимость и подвижность, низкое парциальное давление, высокая ионная проводимость и широкие электрохимические окна, позволяют использовать данные соединения в качестве органических растворителей во многих технологических процессах.

Помимо перечисленных свойств, одной из ключевых характеристик ионных жидкостей является хорошая стеклообразующая способность. Для исследования кинетики стеклования и физического старения наиболее подходящим методом является сверхбыстрая сканирующая калориметрия, обеспечивающая получение стеклообразного состояния благодаря высоким скоростям охлаждения. В данной работе по зависимости фиктивной температуры стеклования от скорости охлаждения были определены кинетические параметры процесса стеклования некоторых ионных жидкостей. Кроме того, изучено физическое старение рассматриваемых образцов путем отслеживания изменений в восстановлении энтальпии релаксации при изотермическом выдерживании. По зависимости характерного времени релаксации от обратной температуры выдерживания была определена энергия активации физического старения. Полученные результаты могут быть использованы для классификации ионных жидкостей с точки зрения их стеклообразующей способности, а также разработки прогностических моделей для определения параметров стеклования родственных соединений.

Работа выполнена за счет средств субсидии, предоставленной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности, №FZSM-2023-0020.

УДК 544.31.031

РАЗРАБОТКА АДДИТИВНОЙ СХЕМЫ РАСЧЕТА ЭНТАЛЬПИИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ СУЛЬФАНИЛАМИДОВ ПРИ 298 К

Италмасов А.Р., Нагриманов Р.Н.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: italmasov_almaz@mail.ru

Ключевые слова: сульфаниламиды, энтальпия сублимации, аддитивная схема, фазовые переходы, сольватация, энтальпия растворения.

Сульфаниламиды применяются в качестве активного компонента в лекарственных препаратах для лечения бактериальных инфекций. Очень важно получать сульфаниламиды в аморфном состоянии, которое, в отличие от кристаллической формы, характеризуется лучшей растворимостью. Это позволяет снизить используемые концентрации этих соединений в препаратах и увеличить их биодоступность. Выбор метода получения аморфных сульфаниламидов определяется термодимическими параметрами фазовых переходов, которые также необходимы для расчета материально-теплового баланса и оценки безопасности производств и летучести соединений.

В литературе существует ограниченное число термодимических величин и информации о термической стабильности и летучести этих соединений. Имеющиеся данные часто не согласуются между собой. Поэтому актуальной задачей является получение надежных термодимических параметров фазовых переходов сульфаниламидов. В настоящей работе для определения энтальпии сублимации исследуемых соединений были использованы методы сверхбыстрой калориметрии, транспирации и калориметрии растворения [1].

В этом исследовании были впервые измерены давления насыщенного пара и энтальпии сублимации сульфациридина и сульфаметазина. ИК-спектроскопия собранных образцов в опытах по транспирации показала, что сульфаниламид, сульфаметоксазол и сульфациридин разлагаются при температуре эксперимента. Была разработана аддитивная схема расчета энтальпии сублимации сульфаниламидов при 298К.

Работа выполнена при поддержке программы РНФ No 22-73-00253.

Список литературы

1. Ahrenberg M. Determination of volatility of ionic liquids at the nanoscale by means of ultra-fast scanning calorimetry/ Ahrenberg M., Brinckmann M., Schmelzer J.W.P., Beck M., Schmidt C., Kebler O., Kragl U., Verevkin S.P., Schick C.// Phys. Chem. Chem. Phys. – 2014. – 16. - 2971-2980.

УДК 544.77.051

СВЕРХРАЗВЕТВЛЕННЫЕ ПОЛИЭФИРЫ И НЕИОНОГЕННЫЕ ПАВ НА ОСНОВЕ ИХ ДЕНДРОНОВ ДЛЯ ИНКАПСУЛЯЦИИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ

Кадиров А.Ф., Ердякова А.В., Ханнанов А.А., Кутырева М.П.

Казанский (Приволжский) федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

Email: *aigizkadirov@gmail.com*

Ключевые слова: скпромелекулярные системы, самоорганизация, сверхразветвленные полимеры.

Эффективные лекарственные препараты помимо воздействия на очаг заболевания могут оказывать токсическое воздействие на весь организм. Инкапсуляция субстратов за счёт ковалентного связывания, гидрофобных или ионных взаимодействий позволяет увеличить их эффективность, понизив токсичность.

Системы адресной доставки на основе мономолекулярных мицелл сверхразветвлённых полимеров (СРП), являются переходным этапом между системами доставки с динамическим и постоянным составом. Однако их растворимость, коллоидная устойчивость и дисперсность недостаточна для их активного применения. Выходом из данной ситуации является создание гибридных мицелл, которые могут сочетать преимущества СРП и ПАВ. Однако использование классических неионогенных ПАВ может ухудшить коллоидные свойства и токсичность конечного материала. По этому хорошим вариантом является получение нового неионогенного ПАВ, структура которого будет представлять собой ветвь сверхразветвлённого полимера (СРП), обладающего собственными практически полезными свойствами. В последние годы применение СРП в поверхностно-активных веществах постепенно привлекает внимание многих исследователей. СРП-ПАВ имеет много преимуществ, таких как трехмерная структура, многоконцевые функциональные группы и высокая реакционная активность.

Создание гибридных систем на основе СРП-ПАВ и молекул СРП позволит сочетать функциональные свойства СРП и ПАВ. Использование в качестве второго компонента гибридных мицелл дедроподобного ПАВ. позволит точнее контролировать свойства системы, за счет структурного сходства полимерной платформы и ПАВ и добиться синергетического эффекта.

УДК 544.233

АМОРФНЫЕ ТВЕРДЫЕ ДИСПЕРСИИ ФЛУТАМИДА С ПОЛИВИНИЛПИРРОЛИДОМ

Красильникова Я.О., Герасимов А.В., Зубайдуллина Л.С.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: vfcz206@mail.ru

Ключевые слова: аморфные твердые дисперсии, распылительная сушка, поливинилпирролидон, флутамид.

Одной из проблем современной фармацевтики является низкая растворимость лекарственных препаратов, что сказывается на их биодоступности.

Перспективным подходом для решения этого вопроса является перевод активного фармацевтического ингредиента в аморфное состояние. Однако такое состояние термодинамически нестабильно и при хранении может переходить в свою менее растворимую, но более стабильную кристаллическую фазу. Одним из способов стабилизации аморфной фазы является создания аморфных твердых дисперсий с полимерами. Широко используемым полимерным носителем при создании твердых дисперсий является поливинилпирролидон (ПВП), за счет его высокой биосовместимости, быстрой растворимости и низкой системной токсичности.

В настоящей работе с помощью методов дифференциальной сканирующей калориметрии, рентгеновской порошковой дифрактометрии и вискозиметрии были оптимизированы параметры проведения распылительной сушки для получения микросферических частиц твердых дисперсий гидрофобного активного фармацевтического ингредиента – флутамида с поливинилпирролидоном.

Полученные микрочастицы были охарактеризованы набором физических и физико-химических методов, включающих в себя дифференциальную сканирующую калориметрию, термогравиметрию, рентгеновскую порошковую дифрактометрию, УФ-спектрофотометрию и сканирующую электронную микроскопию. Было показано, что использование в качестве эксципиента ПВП позволяет увеличить скорость растворения флутамида.

Работа выполнена за счет средств субсидии, предоставленной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности, №FZSM-2023-0020.

УДК 544.234.22

КИНЕТИКА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ И СТЕКЛООБРАЗУЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ БЫСТРО КРИСТАЛЛИЗУЮЩИХСЯ СУЛЬФАНИЛАМИДОВ

Лапук С.Е., Герасимов А.В.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: lapuksemen@gmail.com

Ключевые слова: сульфаниламиды, кинетическая устойчивость, стеклообразующая способность, сверхбыстрая сканирующая калориметрия.

Увеличение биодоступности плохо растворимых в воде лекарственных препаратов является актуальной задачей современной фармацевтики. Одним из методов ее повышения является использование аморфной формы активного фармацевтического ингредиента. Известно, что аморфные вещества имеют низкую кинетическую и термодинамическую стабильности. Для определения кинетической устойчивости аморфного состояния быстро кристаллизующихся веществ применяют метод сверхбыстрой сканирующей калориметрии. Используя подходы неизотермической кинетики, возможно рассчитать кинетические параметры процесса холодной кристаллизации и предсказать поведение аморфного состояния при температурах вблизи температуры стеклования. Применение находят подходы по определению стеклообразующей способности вещества: критическая скорость охлаждения и кинетическая хрупкость.

В настоящей работе с привлечением подходов неизотермической кинетики с помощью метода сверхбыстрой сканирующей калориметрии были определены кинетические параметры холодной кристаллизации сульфамеразина, сульфаметоксазола и сульфадиазина. На основании данных изоконверсионных и модельных подходов были предсказаны времена кристаллизации при температурах близких к комнатной. Полученные значения были подтверждены данными изотермической кинетики. Критические скорости охлаждения составили 350 К/с для сульфамеразина, 3 К/с для сульфаметоксазола и 2000 К/с для сульфадиазина. Кинетическая хрупкость составила 38 для сульфамеразина, 40 для сульфаметоксазола и 44 для сульфадиазина. Все изученные вещества показали низкую стабильность аморфного состояния, что коррелирует с низкой стеклообразующей способностью.

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда №22-23-00312, <https://rscf.ru/project/22-23-00312/>.

УДК 544.18, 535.51, 54-126

МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПММА С НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИМИ ДИПОЛЬНЫМИ ХРОМОФОРАМИ

Лебедева П.В.,^{1,2} Фоминых О.Д.,¹ Балакина М.Ю.^{1,2}

¹ Россия, Казань, ИОФХ им. А.Е. Арбузова ФИЦ КазНЦ РАН
Russia, Kazan, A.E. Arbutov IOPC, FRC Kazan Scientific Center, Russian Academy of Sciences
² Россия, Казань, ²Казанский федеральный университет
Russia, Kazan, Kazan Federal University
E-mail: p.lebedeva@yandex.ru

Ключевые слова: нелинейно-оптические хромофоры, молекулярное моделирование, композиционный материал.

Молекулярное моделирование находит широкое применение в предсказании свойств композиционных материалов. Рассмотрены системы «гость-хозяин», где в качестве «хозяина» выступает полиметилметакрилат (ПММА), а в качестве «гостей» нелинейно-оптические (НЛО) хромофоры линейного (Д-π-А) строения: Chr-An, Chr-An2, Chr-An3, Chr-Car (Рис. 1). Были исследованы 8 систем, состоящих из 10 цепей ПММА с разным весовым содержанием хромофоров (25 и 40 масс.%).

Молекулярное моделирование было выполнено в силовом поле OPLS4 с использованием программного пакета Desmond [1], позволяющего проводить молекулярную динамику в приложенном электрическом поле, что необходимо при исследовании квадратичных НЛО характеристик материала. Важной особенностью таких систем являются невалентные взаимодействия (π-π-стекинг), благодаря которым увеличивается релаксационная стабильность НЛО свойств материала. Введение объемных заместителей в состав хромофоров предотвращает нежелательные диполь-дипольные взаимодействия (ДДВ) между ними, понижающие НЛО характеристики. Исследовалось влияние модификации донорного фрагмента хромофора на структуру материала. Показано, что наличие двух кремнийсодержащих заместителей в доноре вместо одного позволяет эффективнее изолировать хромофоры, понижая вероятность нежелательных ДДВ. При возрастании массового содержания хромофоров в системе возрастает и количество невалентных взаимодействий между ними; наиболее эффективным является материал 10ПММА/Chr-Car (40 масс.%).

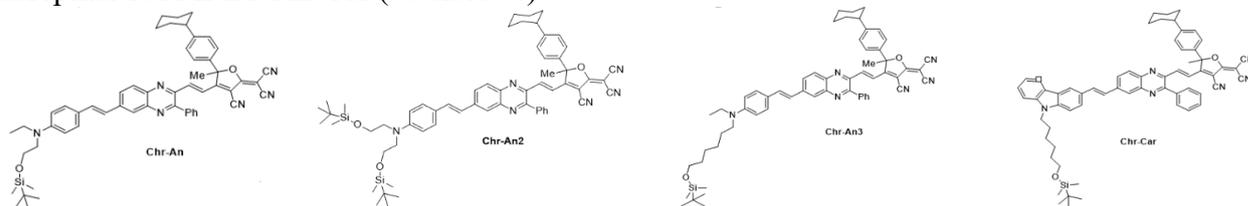


Рис. 1. Структуры хромофоров Д-π-А типа

1. Desmond Molecular Dynamics System, D.E. Shaw Research, New York, NY, 2021

УДК 621.792.4+532.614.2

ПРОГНОЗИРОВАНИЕ КИСЛОТНОГО И ОСНОВНОГО ПАРАМЕТРОВ СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТНОЙ ЭНЕРГИИ ПОЛИМЕРОВ

Лифанов А.Д.^{1,2}, Улитин Н.В.², Шадрина Г.Р.²

¹Россия, Казань, Казанский Федеральный Университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

²Россия, Казань, Казанский Национальный Исследовательский Технологический
Университет

Russia, Kazan, Kazan National Research Technological University

E-mail: lifanov84@mail.ru

Ключевые слова: свободная поверхностная энергия, адгезия, полимеры.

В настоящее время особую актуальность приобретают исследования, посвященные возможности прогнозирования поверхностно-энергетических характеристик полимеров, обуславливающих прочность адгезионных соединений в контакте с металлами [1]. На практике, определение параметров свободной поверхностной энергии (СПЭ) полимеров определяется путем измерения краевых углов смачивания поверхности тестовыми жидкостями и дальнейшим решением переопределенной системы уравнений. В настоящее время накоплен массив экспериментальных данных о поверхностно-энергетических характеристиках полимеров [1, С. 356]. Поэтому необходима их систематизации с использованием методов машинного обучения.

Для определения СПЭ твердых поверхностей использовался метод Ван Осса-Чодери-Гуда. Исходный набор данных (108 полимеров) случайным образом разделяли на тестовую (90%) и обучающую (10%) выборки.

Результаты моделирования $R^2=0.91$, $RMSE=1.53$ методом опорных векторов SVR (параметры ядра $C=100$, $\gamma=0.1$, функция ядра $kernel='poly'$).

Таким образом, в работе предложен теоретический подход к прогнозированию СПЭ полимеров.

Список литературы

1. Starostina, I.A. Current state of the problem of adhesion-interaction estimation using thermodynamic characteristics / I.A. Starostina, N.V. Ulitin, O.V. Stoyanov // Polymer Science, Series D. – 2022. – V. 15, №3. – P. 354-358. DOI: 10.1134/S199542122203

УДК 544.461

ОСОБЕННОСТИ ЦИКЛИЗАЦИИ ДИПЕПТИДОВ L-АЛАНИЛ-L-ЛЕЙЦИН И L-ЛЕЙЦИЛ-L-АЛАНИН В УСЛОВИЯХ ОГРАНИЧЕНИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

Миргазиева Э.Р.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: mirgazieva02@mail.ru

Ключевые слова: дипептиды, неизотермическая кинетика, твердофазные реакции, самосборка.

В настоящее время установлено, что в результате самоорганизации линейные дипептиды могут формировать разнообразные наноструктуры, обладающие низкой токсичностью и биосовместимостью. Популярным методом получения наноструктур на основе олигопептидов является их термическая обработка. Вместе с тем следует отметить, что при нагревании дипептидов возможно протекание химических реакций с образованием других соединений, обладающих иными свойствами. Поэтому для корректного применения термической обработки в таких системах необходима информация о критических температурах, выше которых процессы самоорганизации дипептидов переходят в химическую реакцию и самоорганизацию ее продуктов. Интерес к изучению таких реакций обусловлен тем фактом, что продуктами могут быть циклические дипептиды, представляющие интерес для медицины, пищевой промышленности и различных технологий. Таким образом, изучение термических свойств дипептидов позволит разработать новые, экономически выгодные методы синтеза производных дикетопиперазинов, обладающих важными прикладными свойствами.

В настоящей работе впервые были изучены реакции циклизации дипептидов L-аланил-L-лейцин и L-лейцил-L-аланин в твердой фазе при нагревании. Были определены критические температуры начала реакций. В рамках неизотермической кинетики был проведен расчет кинетических параметров данных реакций, включая энергию активации, множитель Аррениуса, определены кинетические модели, описывающие эти реакции.

Структуры продуктов твердофазных реакций были доказаны рядом физических и физико-химических методов: ИК- и ЯМР- спектроскопии, МАЛДИ-масс-спектрометрии и кругового дихроизма.

Различия способности к самосборке линейных и циклических дипептидов были показаны методом АСМ.

Работа выполнена за счет средств субсидии, предоставленной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности, №FZSM-2023-0020.

УДК 547.313+661.7+678.6+66.094.18

ИЗМЕНЕНИЕ ТЕКСТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК КОРУНДА ОТ ФАЗОВОГО СОСТАВА ИСХОДНОГО ГИДРОКСИДА АЛЮМИНИЯ

Одебердиева А., Борецкая А.В., Ламберов А.А.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: aodeberdiyewa2001@gmail.com

Ключевые слова: оксид алюминия, корунд, катализатор, носитель.

Целью данной работы являлось исследование влияния фазового состава исходного гидроксида алюминия (ГОА) на текстурные характеристики корунда. Образцы корунда были получены путем формования пасты гидроксида алюминия с последующей сушкой и прокалкой экструдатов при 1200 °С. Текстурные характеристики (Таблица 1) были определены методом низкотемпературной адсорбции азота.

Таблица 1

Фазовый состав исходных гидроксидов алюминия и текстурные характеристики образцов корунда на их основе

№	Содержание кристалл-х фаз в исходном ГОА, % масс. *		Текстурные характеристики корунда		
	Псевдобемит	Байерит	S, м ² /г	V, см ³ /г	D _{ср} , нм
1	85	10	10	0,03	13,4
2	80	0	11	0,02	9,8
3	58	0	13	0,02	8,6

где S – площадь удельной поверхности, V – объем пор, D_{ср} – средний диаметр пор.

В рамках данного исследования отмечено, что изменения фазового состава исходного ГОА не несут значительного влияния в текстурные характеристики корунда. Однако, вероятно, более высокая степень кристалличности исходного ГОА в образце №1 способствует большему размеру пор в корунде. Также стоит отметить, что столь низкие показатели V обусловлены недостаточной степенью пригодности метода низкотемпературной адсорбции азота для широкопористых систем.

Работа выполнена за счет средств Программы стратегического академического лидерства Казанского (Приволжского) федерального университета («Приоритет-2030»).

УДК 547.1

**РЕАКЦИЯ БИС(2,2,3,3-ПЕНТАФТОРПРОПИЛОВОГО) ЭФИРА
ПЕНТАФТОРБЕНЗИЛИДЕНМАЛОНОВОЙ КИСЛОТЫ С 2,3-ФЕНИЛ-БЕНЗО[d]-
1,3,2-ОКСАЗАФОСФОРИН-4-ОНОМ**

Сафарова Л.И., Ивкова Г.А.

Россия, Казань, Казанский Федеральный Университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

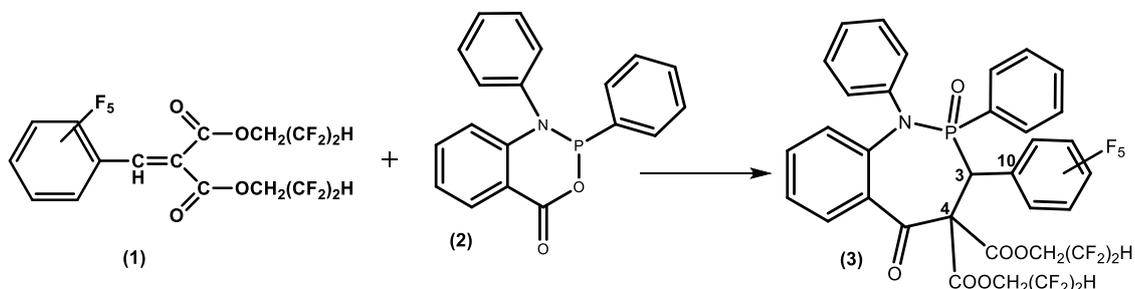
E-mail: safarlenova102@mail.ru

Ключевые слова: циклический фосфит, гидроксикарбоновая кислота, бензилиденмалоновая кислота, ЯМР ^{31}P спектроскопия.

К настоящему времени накоплен обширный материал по изучению свойств циклических фосфитов на основе гидроксикарбоновых кислот [1].

Цель работы – исследование особенностей реакций циклических фосфорилированных производных гидрокси-ароматических кислот с производным эфира бензилиденмалоновой кислоты.

Нами была проведена реакция эфира бензилиденмалоновой кислоты (1), с фенилантранилфосфонитом (2). Ход реакции контролируется методом ЯМР ^{31}P спектроскопии. Реакция протекает достаточно медленно, но стерео- и региоселективно.



Работа выполнена за счет средств субсидии, предоставленной Казанскому федеральному университету для выполнения государственного задания в сфере научной деятельности, №FZSM-2023-0020.

Список литературы

1. Mironov, V.F. Cycloexpansion reactions in benzo[e]-1,3,2-diheterophosphorin-4-ones and 4-oxo-1,3,2-dioxaphosphanes / V.F. Mironov, L. M. Abdrakhmanova, M. N. Dimukhametov, L.M. Burnaeva, G.A. Ivkova, I.V. Konovalova. // Phosphorus, Sulfur and Silicon and the Related Elements.-2011.- V. 186, № 4.- P. 742-753.

УДК 547.1'+541.67

***N*-АЛКИЛ-*N*-(ДИФЕНИЛФОСФОРИЛМЕТИЛ)ДИФЕНИЛ- ФОСФОРИЛАЦЕТАМИДЫ: ИК СПЕКТРОСКОПИЯ И DFT РАСЧЕТЫ**

Серебрякова Е.Д., Кузнецова А.А., Верещагина Я.А.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

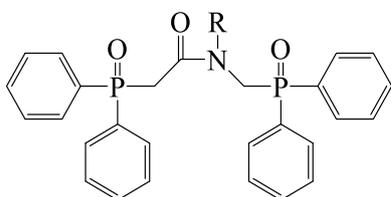
Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: edserebryakova@gmail.com

Ключевые слова: фосфорилированные ацетамиды, карбамоилфосфиноксиды, конформационный анализ, дипольные моменты, DFT расчеты.

N,N-диалкил(дифенилфосфорил)ацетамиды применяются в переработке отработавшего ядерного топлива в качестве экстрагентов для извлечения и концентрирования редкоземельных элементов [1].

Осуществлён экспериментальный и теоретический конформационный анализ *N*-этил-*N*-(дифенилфосфорилметил)дифенилфосфорилацетамида **1**, *N*-изопропил-*N*-(дифенилфосфорилметил)дифенилфосфорилацетамида **2** и *N*-октил-*N*-(дифенилфосфорилметил)дифенилфосфорилацетамида **3** методами дипольных моментов, ИК спектроскопии и квантовой химии DFT B3PW91/6-311++G(df,p). Определена полярность *N*-октил-*N*-(дифенилфосфорилметил)дифенилфосфорилацетамида **3** в бензоле (4.34 Д).



R = Et **1**, *i*-Pr **2**, Oct **3**

Анализ полученных данных показал, что фосфорилированные ацетамиды **1-3** в растворе существуют в виде конформационного равновесия нескольких форм, в которых атомы фосфора пирамидальны, амидный фрагмент плоский, фенильные заместители у атомов фосфора преимущественно

cis ориентированы относительно связей P=O, а фрагменты C_{sp2}-C_{sp3} и N-C_{sp3} *gauche* ориентированы относительно связей P=O. В предпочтительных конформерах возможны слабые внутримолекулярные водородные контакты между атомами кислорода карбонильной и фосфорильных групп и атомами водорода метильных мостиков, алкильного и фенильных заместителей.

Список литературы

1. Артюшин О.И. Дифенил(*N*-алкил-*N*-дифенилфосфинилметил)карбамоилметилфосфиноксиды: синтез и данные спектроскопии ЯМР ¹H, ¹³C и ³¹P / О.И. Артюшин, К.В. Царькова, А.С. Перегудов, Н.А. Бондаренко // Журн. общ. химии. – 2022. – №12(92). – С. 1868–1877.

УДК 544.31.031

СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ СООТНОШЕНИЯ ТИПА «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО» ДЛЯ ОЦЕНКИ ЭНТАЛЬПИЙ СОЛЬВАТАЦИИ

Сибгатуллина Р.Л., Ибрагимова А.Р., Нагриманов Р.Н.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: rezedasibgatullina2003@gmail.com

Ключевые слова: энтальпия растворения, энтальпия сольватации, 2-метилтетрагидрофуран, аддитивная схема.

Экологичной альтернативой для большинства растворителей, используемых в реакциях алкилирования и амидирования, является 2-метилтетрагидрофуран (2-МеТГФ) [1]. Благодаря таким свойствам 2-МеТГФ, как высокая точка кипения, возможность разделения органической и водной фаз, снижение энергозатрат на регенерацию, можно существенно повысить безопасность производства.

Термохимические свойства и энергия взаимодействий с учетом способности 2-метилтетрагидрофурана образовывать различные комплексы с реагентами за счет межмолекулярных водородных связей могут быть полезны для технологических расчетов и моделирования процессов с участием изучаемых систем.

В связи с этим в нашей работе были рассчитаны энтальпии специфических взаимодействий в системе «спирт-2-МеТГФ», а также разработана аддитивная схема для расчета энтальпии сольватации. Полученные параметры и зависимости углубляют понимание свойств межмолекулярных взаимодействий в растворах 2-метилтетрагидрофурана и позволяют облегчить переход к более экологичным средам.

Мы показали, что энтальпии специфических взаимодействий *n*-спиртов с 2-МеТГФ не зависят от длины алкильной цепи спирта. Этот факт был использован при разработке подхода к расчету энтальпии сольватации алифатических углеводов и спиртов в 2-МеТГФ по аддитивной методике. Предложенную схему расчета можно использовать для быстрой оценки энтальпий сольватации в различных условиях.

Список литературы

1. J.F. Bunnett, G.T. Davis The Mechanism of Aminolysis of Esters^{1,2} // J. Am. Chem. Soc. 82. – 1960. – С. 665-674.

УДК 544.47

КАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ НОВЫХ ПАЛЛАДИЕВЫХ ННС-КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНОВ В РЕАКЦИЯХ КРОСС-СОЧЕТАНИЯ И ВОССТАНОВЛЕНИЯ

Федосеева А.А., Султанова Э.Д., Гафиатуллин Б.Х., Бурилов В.А., Антипин И.С.
 Россия, Казань, Казанский федеральный университет
 Russia, Kazan, Kazan Federal University
 E-mail: *afedoseewa03@gmail.com*

Ключевые слова: катализ, ННС-комплексы, каликс[4]арены.

Актуальной темой исследования остается переход в экологичные условия для проведения реакций органического синтеза: в водной среде, с минимальными побочными продуктами и др. Создание и исследование новых каталитических систем становится ключевым звеном в этом «поиске». N-гетероциклические карбеновые комплексы обладают высокой стабильностью на воздухе, в водной среде и при нагревании по сравнению с их аналогами.

В нашей группе впервые были получены палладиевые комплексы на основе тиакаликс[4]аренов в конформации конус с различными объемными заместителями (рисунок 1). Данные комплексы показали высокую эффективность в реакциях кросс-сочетания Хека и в восстановлении нитроароматических соединений в водно-органической среде (рисунок 1).

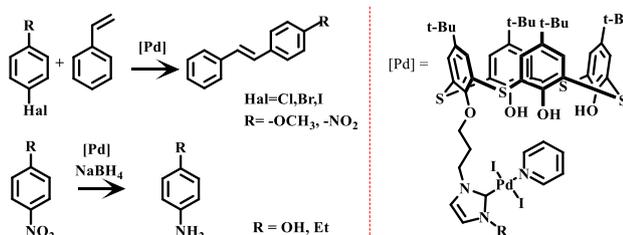


Рис. 1. Катализируемые реакции и структура палладиевого комплекса

Таблица 1

		Восстановление нитрофенола		Кросс-сочетания Хека	
		k, s^{-1}	$n \cdot k, \text{mole}^{-1} \cdot s^{-1} \cdot 10^5$	Конверсия	Соотношение
TCA	Pd-Met-	0,0012	2.4	22	1:5
TCA	Pd-iPr-	0,0035	7	83	1:2

Работа выполнена при финансовой поддержке РНФ 22-13-00304

УДК 544.31.031

ТЕРМОХИМИЯ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ АЛИФАТИЧЕСКИХ СПИРТОВ В 2-МЕТИЛТЕТРАГИДРОФУРАНЕ

Хабибуллина Д.С., Ибрагимова А.Р., Нагриманов Р.Н.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: habibullina_diana03@mail.ru

Ключевые слова: энтальпия растворения, энтальпия специфических взаимодействий, 2-метилтетрагидрофуран, спирты.

Многие растворители, используемые в промышленных масштабах, оказывают негативное воздействие на живые организмы и биосферу. В качестве «зелёной» альтернативы таким растворителям, как дихлорметан, тетрагидрофуран и 1,4-диоксан был предложен 2-метилтетрагидрофуран (2-МеТГФ).

2-МеТГФ способен образовывать различные комплексы с реагентами за счет межмолекулярных водородных связей. Энтальпия растворения при бесконечном разбавлении является важным параметром при определении термодинамических свойств межмолекулярных взаимодействий, реализующихся между растворяемым веществом и растворителем.

В настоящей работе были исследованы экспериментальные зависимости теплот растворения различных классов органических соединений в 2-МеТГФ. Рассчитаны энтальпии специфических взаимодействий в системах «спирт–2-МеТГФ» для исследования межмолекулярных взаимодействий. Энтальпии растворения, полученные из теплот смешения в работах [1, 2], дополнены новыми экспериментальными данными при бесконечных разбавлениях.

Было установлено, что энтальпии специфических взаимодействий *n*-спирта с 2-МеТГФ близки к таковым с тетрагидрофураном, но значительно выше, чем с 1,4-диоксаном и дихлорметаном. Такое более сильное межмолекулярное взаимодействие в системе «*n*-спирты-2-МеТГФ» позволяет получать более стабильные растворы различных концентраций, что имеет решающее значение при выделении компонентов из реакционной среды 2-МеТГФ.

Список литературы

1. Vallés C. et al. Excess enthalpy, density, speed of sound, and viscosity for 2-methyltetrahydrofuran+ 1-butanol at (283.15, 298.15, and, 313.15) K //Journal of Chemical & Engineering Data. – 2006. – Т. 51. – №. 3. – С. 1105-1109.
2. Giner B. et al. Excess thermodynamic properties of isomeric butanols with 2-methyltetrahydrofuran //Journal of molecular liquids. – 2003. – Т. 108. – №. 1-3. – С. 303-311.

УДК 54-386

СИНТЕЗ И ЛЮМИНИСЦЕНЦИЯ КОМПЛЕКСОВ ЛАНТАНОИДОВ С ФОСФОСОДЕРЖАЩИМИ ЛИГАНДАМИ

Хафизова А.И., Галкина И.В.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: AliHafizova@mail.ru

Ключевые слова: лабораторные синтезы, люминисценция, комплексы лантаноидов.

Изучение комплексов лантаноидов получило большое признание в последнее десятилетие благодаря их захватывающим топологическим структурам, а также различным свойствам и потенциальному применению в качестве функциональных твердых материалов в люминесценции, катализе и магнитных материалах [1].

Был синтезирован и охарактеризован 1,3-бис(4-бромфенил)-2-фенил-1,3,2-диазафосфетидин и комплексы европия(III), тербия(III) на его основе. Результаты люминисцентного исследования демонстрируют умеренно эффективную передачу энергии лиганд-металл в комплексах европия(III) и тербия(III) (рис.1 а, б).

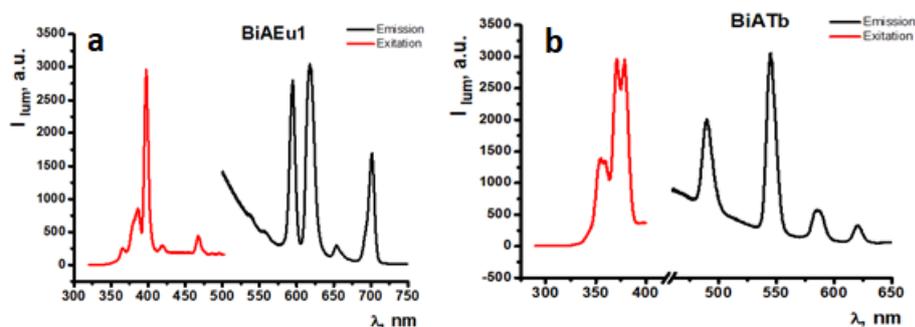


Рис.1. а) Спектр возбуждения и эмиссии комплекса европия(III) с 1,3-бис(4-бромфенил)-2-фенил-1,3,2-диазафосфетидином б) Спектр возбуждения и эмиссии комплекса тербия(III) с 1,3-бис(4-бромфенил)-2-фенил-1,3,2-диазафосфетидином

Список литературы

1. Иванова Т. А. и др. Особенности магнитных свойств в цепочечной структуре $[\text{Fe}(\text{salen})(2\text{-Me-Nim})]_n$ // Журнал неорганической химии. – 2019. – Т. 64. – №. 4. – С. 414-420.

УДК 546.85

ИЗУЧЕНИЕ МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НЕОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ФОСФОРИТА

Шарипова Г.Ш.¹, Мардонов У.М.¹, Муратова М.Н.², Турсунова И.Н.², Ганиев Б.Ш.¹,
Авезов К.Г.¹, Аслонова Ф.С.¹

¹Узбекистан, Бухара, Бухарский государственный университет
Uzbekistan, Bukhara, Bukhara State University

²Узбекистан, Навои, Навоийский государственный горно-технологический университет
Uzbekistan, Navoi, Navoi State Mining and Technological University
Email: b.sh.ganiyev@buxdu.uz

Ключевые слова: Кызылкумских фосфорит, кислотно-щелочная переработка, антипирен, фосфат, силикат, алюминат.

Для исследования в качестве фоссырья использовали различные виды фосфоритов Центрального Кызылкума. Кызылкумские фосфориты относятся к широко распространенному зернистому карбонатному типу и по рациональному составу являются аналогами крупнейших месторождений фосфоритов Африкано-Аравийской фосфоритовой провинции, но отличаются от них относительно низким содержанием полезного компонента.

Изучены и разработаны способы кислотно-щелочной переработки низкосортных фосфоритов, т.е. некондиционных забалансовых руд (10-17% P₂O₅) Кызылкумского Фосфоритного комплекса (НСФ КФК) [1,2]. В кислотной переработке использованы растворы соляной, фосфорной, азотной кислот и выбросные нитрозные газы (NO₂+NO) производства азотной кислоты ОАО «НАВОИЙАЗОТ» и получены многофункциональные неорганические материалы, таких как N,P-ные удобрения, закрепители суглинистых песков Кызылкума, фосфат, силикат, алюминат и азотсодержащие антипиреновые составы для огнезащиты древесных, текстильных материалов, картонных изделий и бумаги.

Список литературы

1. Эркаев А.У., Турсунова И.Н., Мардонов У.М. Применение расчетно-графических и спектрофотометрических методов для исследования системы “NO₂-H₂O – X” // Химия и химическая технология научно - технический журнал. №2, 2009. - С. 6-8.

2. Турсунова И.Н., Эркаев А.У., Мардонов У.М., Умиров А.У., Муратова М.Н. Изучение составно-структурных особенностей низкосортных фосфоритов методом электронной микроскопии и некоторые вытекающие из него прикладные аспекты// журн. Доклады академии наук Республики Узбекистан. – Ташкент, 2013 -№1. – С.56 – 60.

УДК 620.92

ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА НЕФТЯНЫХ ШЛАМОВ

Эминов А.А., Зверева Э.Р.

Россия, Казань, Казанский государственный энергетический университет

Russia, Kazan, Kazan State Energy University

E-mail: balkanabat12@mail.ru

Ключевые слова: нефтешлам, нефтепродукты, масла, органические осадки, нефтехранилище.

В данном исследовании используется образец нефтешлама, образующегося на нефтеперерабатывающих заводах. Он представлен сложной системой, состоящей из нефтепродуктов, воды, минералов. Соотношение этих компонентов в нефти шламах может быть различной, в зависимости от схем переработки, типа сырья, реагентов и оборудования, которые используются для очистки сточных вод. Чаще всего нефтешламы представляют собой тяжелые нефтяные остатки, содержащие в среднем: нефтепродукты 10-60%, воды 30-85%, твердые примеси 15-48%. Органическая часть представляет собой смесь неокисленных углеводородов.

Для определения способов утилизации или переработки нефтешламов скапливающихся на складах необходимо в первую очередь их состав. Нами предлагается система анализа нефтешламов, представленная на рисунке 1. Метод для определения содержания летучих компонентов в нефтешламах отсутствует, поэтому количество влаги и летучих компонентов определяли по ГОСТ 21119.1–75.

Был проведен анализ нефтешлама образца из казахстанского М.Р. По результатам анализа были определены прежде всего такие характеристики, как содержание летучих компонентов, воды, минерального остатка и тяжелой органики.

Список литературы

1. Крапивский Е.: Нефтешламы: уничтожение, утилизация, дезактивация. Монография, 2021.
2. Основы аналитической химии. В 2 т. Т. 1 : учеб. для студ. учреждений высш. проф. образования / центр «Академия», 2012.
3. И.В. Александрова, Методические указания к лабораторным занятиям для лаборантов химического анализа третьего и четвертого разрядов, 2017.

СЕКЦИЯ 7

Актуальные проблемы химического образования

УДК 378

ОСОБЕННОСТЬ ТЕХНОЛОГИИ СПИРАЛЬНОГО ОБУЧЕНИЯ БУДУЩИХ УЧИТЕЛЕЙ ХИМИИ

Агзамова И.И., Фазылова С.Р.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: Agzamovain01@mail.ru

Ключевые слова: технология спирального обучения, обучение химии, подготовка учителей химии.

Технология спирального обучения играет важную роль, как для их духовно-нравственного и культурного развития [3] обучающихся, так и для успешного внедрения цифровых технологий обучения химии [1, 2], что прописано в соответствующих нормативно-правовых документах общего и высшего образования.

Цель исследования – выявление особенности технологии спирального обучения для формирования компетенций у будущих учителей химии.

Задачами исследования являются изучение психолого-педагогических и организационных основ применения технологии спирального обучения в подготовке будущих учителей химии; анализ отечественного и зарубежного опыта применения технологии спирального обучения для формирования профессиональных компетенций учителя; разработка профессионально ориентированных задач для подготовки учителей химии в условиях цифровизации образования.

Список литературы

1. Гильманшина, С.И. Авторские цифровые ресурсы как элементы образовательной среды подготовки учителей химии / С.И. Гильманшина, Г.Д. Каримова, Р.Н. Шакирова // Современные проблемы науки и образования. – 2022. – № 1. – URL: <https://science-education.ru/article/view?id=31435> (дата обращения: 01.02.2022).
2. Гильманшина, С.И. Разработка и внедрение цифровых видеоматериалов методического сопровождения химического практикума / С.И. Гильманшина, А.Р. Рахманова, В.А. Миннахметова // Современные наукоемкие технологии. – 2022. – № 4. С. 151-155.
3. Мельникова, Г.Ф. Музеи университета как фактор поликультурного воспитания молодежи / Г.Ф. Мельникова, С.И. Гильманшина // Современные проблемы науки и образования. – 2015. – № 4. – С. 225.

УДК 372.8

МЕТОДИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ЭКСКУРСИЙ В ПРОФОРИЕНТАЦИОННОЙ РАБОТЕ УЧИТЕЛЯ ХИМИИ

Аллабердиев О., Космодемьянская С.С.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: allaberdievoraz@gmail.com, svetlanakos@mail.ru

Ключевые слова: методика химии, экскурсия, обучающиеся, профориентационная работа, химическое образование.

Актуальность темы нашего исследования определяется тем, что для верного выбора учащегося в области профессионального самоопределения необходима определенная поддержка и наставничество со стороны учителя химии и родителей. Здесь важно учитывать интересы, способности, потребности, здоровье учащегося, востребованность профессий на рынке труда в перспективе, возможность прохождения обучения по выбранной специальности. Чем правильнее будет самоопределение школьника, тем больше вероятность, что общество получит высококвалифицированного специалиста.

Профориентационная деятельность учителя дает возможность ученику ориентироваться в мире профессий, определить жизненную перспективу. Спланированная профессиональная траектория поможет ученику избежать девиантного поведения, сформировать необходимые личностные качества для успешного саморазвития и активного взаимодействия с обществом.

Проведя сравнительный анализ организации экскурсии в Российской Федерации и Республике Туркменистан мы отмечаем особую роль экскурсионной работы учителя химии в развитии профориентационной деятельности учащихся. отмечаем определенное сходство в методике организации методического сопровождения экскурсий: углубление и укрепление интереса обучающихся к принятию химических знаний, выбор профессии учениками 10-11 классов, установление различных междисциплинарных связи, развитие навыков в области химии, творческая самодетельность и выбор будущей профессии.

Во время экскурсионных занятий учителя химии указывают на важность химической науки и химического производства в национальной экономике страны.

УДК 372.854

АНАЛИЗ РЕАЛИЗАЦИИ МЕЖПРЕДМЕТНЫХ СВЯЗЕЙ В ПРЕПОДАВАНИИ ХИМИИ В КАЧЕСТВЕ СРЕДСТВА ПОВЫШЕНИЯ КАЧЕСТВА ЗНАНИЙ ОБУЧАЮЩИХСЯ

Байрамназарова А., Гайфуллина А.З.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: bayramnazarowaa@gmail.com

Ключевые слова: межпредметные связи, качество знаний, преподавание химии.

Многочисленные исследования в области педагогики [1, 2] позволили обозначить одну из ключевых модернизаций в процессе образования – интеграцию образования, с помощью осуществления в процессе обучения межпредметных связей. Межпредметные связи – это дидактические возможности усиления теоретического и практического показателя знаний, умений и навыков обучающихся, значения образовательного процесса и формирования их мышления, творческих способностей, становление их когнитивной деятельности, а также познавательных интересов [1, с. 39].

Для подтверждения выдвинутой гипотезы о том, что систематическое использование межпредметных связей в химическом образовании способствует повышению качества знаний обучающихся нами была организована экспериментальная работа, которая проходила в четыре этапа. Завершающим этапом экспериментальной работы является обоснование результативности их использования в процессе обучения химии опытным путем в ходе прохождения педагогической практики в МБОУ «СОШ № 91» г. Казани. В завершении было проведено контрольное тестирование, которое показало, что результаты итогового контроля знаний в экспериментальной группе стали выше по показателю, результаты вводного контроля знаний и итогового у контрольной группы остались приблизительно одинаковыми по показателю.

Список литературы

1. Игамбердиева, А.А. Специфика выстраивания межпредметных связей химии и биологии / А.А. Игамбердиева // Молодой ученый. – 2022. – № 20 (415). – С. 581–583. – URL: <https://moluch.ru/archive/415/91634/> / (дата обращения: 01.04.2023).
2. Мельникова, Г.Ф. Музеи университета как фактор поликультурного воспитания молодежи / Г.Ф. Мельникова, С.И. Гильманшина // Современные проблемы науки и образования. – 2015. – № 4. – С. 225.

УДК 372.8

ОПОРНЫЙ КОНСПЕКТ КАК СРЕДСТВО ОЦЕНИВАНИЯ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ ПРЕДМЕТНЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ПО ХИМИИ

Валова А.А., Космодемьянская С.С.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: ang-valova@yandex.ru, svetlanakos@mail.ru

Ключевые слова: методика химии, опорный конспект, учитель химии, обучающиеся, среднее общее образование, химическое образование.

Опорный конспект – это один из форматов графической наглядности, который подразумевает схематическое изображение, представляющее основное содержание учебного материала [2, с.24-27]. В период работы в МБОУ «Гимназия №102 им. М.С. Устиновой» осуществлен мониторинг качества обучения учащихся 8 «Б» класса (34 ученика). В исследовании определена гипотеза: регулярное применение на уроках химии опорных конспектов способствует повышению качества обученности учеников. На начальном этапе был проведен вводный контроль знаний с результатами: отметку «5» получило 15% обучающихся, «4» – 41%, «удовлетворительно» – 29%, «неудовлетворительно» – 15%. В ходе 3 месяцев (3-я учебная четверть) велась плодотворная работа с 8 «Б» классом: уроки химии осуществлялись при помощи опорных конспектов [1] по темам: «Классификация сложных веществ», «Физические и химические явления» и др. Преимущество уроков химии с опорными конспектами в дифференцированном характере заданий. В завершении деятельности был проведен итоговый контроль знаний с результатами: отметку «5» получило 24% обучающихся, «4» – 47%, «удовлетворительно» – 20%, «неудовлетворительно» – 9%. Сравнение вводного и итогового контроля знаний свидетельствует, что результаты качества обучения стали заметно выше. Экспериментально подтверждена гипотеза исследования: регулярное применение на уроках химии опорных конспектов способствует повышению качества обученности.

Список литературы

1. Космодемьянская, С.С. Фасилитация: теория и методика применения в обучении химии: учебное пособие по методическим дисциплинам для педагогических специальностей и направлений / С.С. Космодемьянская, А.А. Валова, А.И. Казакова. – Казань: К(П)ФУ, 2023. – 105 с.
2. Хусаенова, А.А., Мониторинг – показатель эффективной деятельности образовательной организации / А.А. Хусаенова, Л.М. Насретдинова, Р.Р. Богданов // Педагогика высшей школы. – 2015. – № 2.

УДК 372.85

ПРОЕКТНАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ КАК ЭФФЕКТИВНАЯ ФОРМА ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА

Гарягдыев Ш.А., Гайфуллина А.З.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: sohratgaryagdyew04@gmail.com, agajfullina@ya.ru

Ключевые слова: проектная деятельность, виды проектов, методы обучения.

Первоначально метод проектов зародился в период перестройки системы общего образования. Одной из причин возникновения метода проектов можно считать зародившийся интерес к индивидуальности личности каждого ученика. Особенностью считается его деятельностный характер, ориентированный на развитие личности обучающегося. Методу проектов сегодня отведено ведущее место среди множества методов обучения, так как соответствует требованиям обновленных ФГОС.

Для подтверждения выдвинутой гипотезы о том, что целенаправленная и систематическая организация проектной деятельности на уроках химии и во внеурочной деятельности будет способствовать повышению качества знаний по данному предмету и способствовать формированию УУД, нами была организована экспериментальная работа. Завершающим этапом экспериментальной работы является обоснование результативности их использования в процессе обучения химии опытным путем в ходе прохождения педагогической практики в МБОУ «МБОУ Гимназия №122 им. Ж.А. Зайцевой» г. Казани. Были разработаны и применены в различных классах краткосрочные и долгосрочные проекты межпредметного характера. Результаты показали, что качественные проекты получаются у обучающихся, которые заинтересованы и высоко мотивированы. С разработанными проектами обучающиеся успешно приняли участие в конференциях и конкурсах различного уровня. Также школьники отметили, что обучение химии с применением краткосрочных проектов им понравилось больше, чем традиционное. Таким образом, можно сделать вывод о том, что выдвинутая нами в начале исследовательской работы гипотеза подтверждена экспериментальным путем. К основным достоинствам проектного метода можно отнести высокую самостоятельную деятельность обучающихся, развитие навыков группового и социального общения и опыта познавательной деятельности.

УДК 372.8

МЕТОДИКА ОРГАНИЗАЦИИ ЛАБОРАТОРНОГО ХИМИЧЕСКОГО ПРАКТИКУМА В УЧЕБНОЙ РАБОТЕ

Дангатарова У., Космодемьянская С.С.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: danatarowauzuk5@gmail.com , svetlanakos@mail.ru

Ключевые слова: методика химии, лабораторный практикум, обучающиеся, практикум, химическое образование.

По требованиям образовательного стандарта особое внимание в образовательных учреждениях Российской Федерации и Республики Туркменистан уделяется химическому эксперименту. Лабораторный химический практикум, в нашем понимании, позволяет формировать системный комплекс исследовательских компетенций. Учитель химии любого образовательного учреждения может применить характерные особенности проблемного обучения для подтверждения исследовательского характера лабораторного практикума. Так, например, выдвигать гипотезу, определять ее возможные пути решения, подтверждать решение и др. Если очерчивать определенные границы социальных компетенций в процессе российского образования, то необходимо отметить его значение для функциональной грамотности школьника

В школах Республики Туркменистан мы отмечаем наличие неких трудностей с организацией реального эксперимента, хотя химия – это экспериментальная и теоретическая наука. Моделируя и структурируя химический практикум, молодые учителя химии должны обратить внимание на методический характер сопровождения химического эксперимента для обучающихся любого уровня обученности (89-е классы) или любого профиля обучения (10-11-е классы). Мы предлагаем в таком случае использование в лабораторных практикумах по химии различных информационных технологий (iOS, мультимедиа, гипертекст) обеспечивает значительное образовательное преимущество в подаче материалов по сравнению с традиционными методами. Но необходимо помнить о том, что только виртуальный химический эксперимент (в рамках учебного практикума или занимательного химического эксперимента в ходе внеучебной работы) не может полностью решить учебные задачи и достичь запланированных результатов обучения без оптимального сочетания с реальным экспериментом.

УДК 372.8

ОСОБЕННОСТИ СОВРЕМЕННОЙ МЕТОДИКИ ПРИМЕНЕНИЯ КОМПЬЮТЕРА В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ ХИМИИ В СРЕДНЕЙ ШКОЛЕ

Джумаева Х., Камалеева А.Р.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: kamaleyeva_kazan@mail.ru

Ключевые слова: компьютерное обучение, компьютерные технологии, обучение химии.

В настоящее время в образовательный процесс все наиболее активно вводятся и используются компьютерные технологии [3, 4], а сама система образования и химического в том числе претерпевает процесс цифровизации [1, 2].

В ходе проведения опытно-экспериментального исследования, нам удалось выявить особенности применения компьютера в процессе обучения химии, и установить, что эффективное использование компьютерных технологий при обучении химии в средней школе можно несколькими вариантами, например, на основе использования интеллект-карт и интерактивных кроссвордов и сканвордов. В процессе работы с компьютерными технологиями у обучающихся совершенствуются навыки работы с извлечением, переработкой и усвоением информации, а также это положительно сказывается на оперативности, наглядности и емкости обрабатывания информации.

Список литературы

1. Гильманшина, С.И. Авторские цифровые ресурсы как элементы образовательной среды подготовки учителей химии / С.И. Гильманшина, Г.Д. Каримова, Р.Н. Шакирова // Современные проблемы науки и образования. – 2022. – № 1. – URL: <https://science-education.ru/article/view?id=31435> (дата обращения: 01.02.2022).
2. Гильманшина, С.И. Разработка и внедрение цифровых видеоматериалов методического сопровождения химического практикума / С.И. Гильманшина, А.Р. Рахманова, В.А. Миннахметова // Современные наукоемкие технологии. – 2022. – № 4. С. 151-155.
3. Мещерякова, Е.В. Использование компьютеров в обучении химии / Е.В. Мещерякова, В.И. Махонина // Химия: методика преподавания в школе. – 2002. – №4. – С.55-60.
4. Чернобельская, Г.М. Методика обучения химии в средней школе: Учеб. для студ. вузов / Г.М. Чернобельская. – М.: Гуманит. изд. центр ВЛАДОС, 2000. – 336 с. – (Учебник для вузов).

УДК 373.51

ВЛИЯНИЕ ЦИФРОВОЙ СРЕДЫ НА ФОРМИРОВАНИЕ НАВЫКОВ И КОМПЕТЕНЦИЙ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ХИМИИ

Комеков А.Н., Гайфуллина А.З.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

Email: komekowabdyresul@gmail.com, agajfullina@ya.ru

Ключевые слова: цифровая среда, цифровая грамотность, цифровые средства обучения, базовые компетенции.

Цифровая образовательная среда включает в себя цифровые средства и ресурсы образовательных платформ и средств обучения. Для подтверждения выдвинутой гипотезы о том, что в эпоху модернизации и глобализации цифровая среда способствует формированию навыков и компетенций обучающихся по химии и является наиболее эффективным и важным средством, нами была организована экспериментальная работа. Итогом экспериментальной работы является обоснование результативности их использования в процессе обучения химии опытным путем в ходе прохождения педагогической практики в МБОУ «Гимназия № 183» г. Казани. В рамках данной практики нами были проведены уроки на основе традиционной формы обучения. В ходе исследовательской деятельности был проведен вводный тест. Далее в ходе практики мы провели учебные занятия с использованием цифровых средств обучения. На уроках активно использовались цифровые ресурсы образовательных платформ, цифровые графики и видеоролики, ссылки на сайты и программы. Акцент был сделан на развитие коммуникативных, информационных, регулятивных компетенций обучающихся. По окончании эксперимента обучающиеся показали более высокий уровень знаний по химии, чем до начала использования цифровой образовательной среды. Большинство обучающихся также стали считать химию более интересным учебным предметом.

Таким образом, можно сделать вывод о том, что выдвинутая нами в начале исследовательской работы гипотеза подтверждена экспериментальным путем: действительно, цифровая среда способствует формированию навыков и компетенций обучающихся по химии и является эффективным и важным средством обучения.

УДК 374.1

ФОРМИРОВАНИЕ САМООБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ УМЕНИЙ И НАВЫКОВ ОБУЧАЮЩИХСЯ НА УРОКАХ ХИМИИ

Кузекенова А.А., Камалеева А.Р.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan federal university

E-mail: finakuzekenova09@gmail.com

Ключевые слова: самообразование, формирование умений и навыков, обучение химии.

Формирование самообразовательных умений и навыков у обучающихся путем организации самообразовательной деятельности на уроках химии решает проблему нехватки времени на решение расчетных задач, отработки навыков химических формул и уравнений реакций.

В ходе работы были определены такие задачи как: разработка и теоретическое обоснование методических приемов по формированию самообразовательных умений и навыков у обучающихся на уроках химии; изучение возможности организации самообразовательной деятельности с помощью информационных технологий; подбор диагностического материала для планирования работы по самообразованию обучающихся на уроках химии.

Были рассмотрены сущность направления, мотивы и потребность самообразования в современных условиях, существующие формы самообразовательной деятельности на уроках химии, а также зарубежный опыт формирования самообразовательных умений и навыков. В ходе работы организации самообразовательной деятельности у обучающихся в школе особое внимание уделяется информационным технологиям, в процессе которой с помощью диагностики выявилось повышение уровня развития самообразовательных умений и навыков.

Список литературы

1. Сударчикова, Л. Г. Педагогическая психология : учебное пособие/ Л. Г. Сударчикова. - 3-е изд., стер. — Москва : ФЛИНТА, 2020. - 320 с. - ISBN 978-5-9765-1930-5. - Текст : электронный. - URL: <https://znanium.com/catalog/product/1140628> (дата обращения: 21.11.2022)
2. Трухин А.В. Становление и развитие проблемы самообразования в историческом аспекте // Наука и перспективы. 2018. №4. URL: <https://cyberleninka.ru/article/n/stanovlenie-i-razvitie-problemy-samoobrazovaniya-v-istoricheskom-aspekte> (дата обращения: 18.11.2022)

УДК 372.8

ОРГАНИЗАЦИЯ ЭКОЛОГИЧЕСКИ НАПРАВЛЕННОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ СОВРЕМЕННОГО УЧИТЕЛЯ ХИМИИ

Лебедева К.В., Космодемьянская С. С.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: Kseniaarh466@gmail.com, svetlanakos@mail.ru

Ключевые слова: методика химии, экология, практикум, обучающиеся, экологическая самостоятельность, химическое образование.

Значимость темы в том, что при нарастающих экологических проблемах необходимо менять мировоззрение и понимание роли людей в этом процессе [1, 2, 3].

Исследование по данной тематике мы начали на 1 курсе в 2019/2020 уч. г. Вначале провели дефиницию основных понятий и подтвердили острую актуальность тематике, несмотря на кажущуюся ее изученность. Методические особенности заданий формирования экологической грамотности обучающихся мы применили в ходе разработки и реализации сценария внеклассного мероприятия в рамках XXV Конкурса методических разработок – Фестиваля химии. На 2 этапе был разработан, проведен и рефлексивно оценен мастер-класс «Исследование влияния кислотных осадков на экологию планеты» для слушателей курсов повышения квалификации учителей химии. Экспериментальный материал [4] был проанализирован на базе ГАОУ «Полилингвальный комплекс «Адымнар – путь к знаниям и согласию» и МАОУ «Средняя общеобразовательная школа №39 с углубленным изучением английского языка» г. Казани. Почти 90 % обучающихся получают экологическую информацию из интернет источников. Исследование будет продолжено.

Список литературы

1. Афанасьева, О.Г. Экологическая деятельность как основа формирования гармоничных отношений в системе «человек – общество – природа» / О.Г. Афанасьева // Вестник Башкирского университета – 2008. – №2. – С. 100.
2. Гильманшина, С.И. Пути интеграции химических и валеологических знаний / С.И. Гильманшина, Р.М. Мухаметшина // Химия в школе. – 2003. – №9. – С. 30.
3. Гильманшина, С.И. Формирование эколого-химической культуры в условиях новой информационно-образовательной среды / С.И. Гильманшина, Р.К. Ямалтдинов // Образование и саморазвитие. – 2014. – №1(39). – С. 161-164.
4. Космодемьянская, С.С. Психолого-педагогические технологии формирования эколого-химической самостоятельности обучающихся / С.С. Космодемьянская, К.В. Лебедева // Социально педагогические технологии личностного развития. – Казань: Отечество, 2022. – 133 с.

УДК 372.8

МЕТОДИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ХАРАКТЕРА ХИМИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Мельничук О.А., Космодемьянская С.С.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: lesjakuralesja@mail.ru, svetlanakos@mail.ru

Ключевые слова: методика химии, лабораторный практикум, обучающиеся, исследование, химическое образование.

Процесс реконструирования образовательной системы в России выявил необходимость внедрения новых методов и методик обучения [1], с помощью которых качество образования будет возрастать. Наиболее обширной областью для исследования новых способов повышения качества образования является исследовательская деятельность учащихся [2]. В последний период времени стало появляться все больше публикаций и статей, посвященных изучению данной области образования. В век информационных технологий, где каждый учащийся имеет доступ в интернет, в котором представлено огромное количество разнообразной информации, необходимо заинтересовать учеников. Именно поэтому наиболее распространенной формой получения и обобщения новых, и ранее полученных знаний, является эксперимент, показывающий яркие краски мира химии.

Полученные нами результаты 4-хлетнего исследования (с 2019 г.) с помощью опросов, тестов, устных бесед, показывают, что химический эксперимент в рамках проведения исследовательской деятельности выступает основным средством достижения поставленной цели. Визуальная интерпретация полученных результатов не только подтверждает успешность выполнения работы, но и является средством получения навыков практической деятельности [3].

Список литературы

1. Гильманшина, С.И. Профессиональное мышление учителя: научно-педагогический аспект / С.И. Гильманшина, Д.В. Вилькеев // Психологическая наука и образование. – 2004. – № 2. – С. 67-75.
2. Жилин, Д.М. Химический эксперимент в российских школах / Д.М. Жилин // Естественнонаучное образование: тенденции развития в России и в мире. – М.: Изд-во МГУ, 2011. – С. 125-149.
3. Мельничук, О.А. Психолого-педагогические технологии формирования навыков экспериментальной работы по химии / О.А. Мельничук, С.С. Космодемьянская // Социально педагогические технологии личностного развития. – Казань: Отечество, 2022. – С. 125-128.

УДК 372.8

ЦИФРОВИЗАЦИЯ СРЕДСТВ УЧЕТА, КОНТРОЛЯ И ОЦЕНКИ ЗНАНИЙ ПО ХИМИИ

Овезова С.Ш., Ямбушев Ф.Д.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: servijanovezova@mail.ru

Ключевые слова: оценка знаний, контроль знаний, цифровые оценочные средства, обучение химии.

Одним из актуальных вопросов в обучении химии наряду с поликультурным воспитанием обучающихся [3] является организация адекватного и эффективного процесса оценки, контроля и учета их знаний в условиях цифровизации образования [1, 2].

Целью работы стало изучение возможностей совершенствования средств учета, контроля и оценки знаний по химии посредством использования цифровых технологий. В ходе исследования определены возможности использования цифровых ресурсов; выявлены проблемы, возникающие при использовании традиционных методов оценивания, а также перспективы и трудности внедрения цифровых оценочных средств; составлены методические рекомендации по их внедрению. Эффективность разработанной методики и ее педагогическая целесообразность проявляются в повышении мотивации учения, качества знаний, познавательной самостоятельности и познавательного интереса школьников.

Список литературы

1. Гильманшина, С.И. Авторские цифровые ресурсы как элементы образовательной среды подготовки учителей химии / С.И. Гильманшина, Г.Д. Каримова, Р.Н. Шакирова // Современные проблемы науки и образования. – 2022. – № 1. – URL: <https://science-education.ru/article/view?id=31435> (дата обращения: 01.02.2022).
2. Гильманшина, С.И. Разработка и внедрение цифровых видеоматериалов методического сопровождения химического практикума / С.И. Гильманшина, А.Р. Рахманова, В.А. Миннахметова // Современные наукоемкие технологии. – 2022. – № 4. С. 151-155.
3. Мельникова, Г.Ф. Музеи университета как фактор поликультурного воспитания молодежи / Г.Ф. Мельникова, С.И. Гильманшина // Современные проблемы науки и образования. – 2015. – № 4. – С. 225.

УДК 372.8

МОТИВАЦИЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ КАК РЕЗУЛЬТАТ ПРИМЕНЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ ИГРОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В ХИМИЧЕСКОМ ОБРАЗОВАНИИ

Оразгурбанова А.Д., Космодемьянская С.С.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: akgulorazgurbanoaa@gmail.co, svetlanakos@mail.ru

Ключевые слова: методика химии, мотивация, обучающиеся, игровые технологии, химическое образование.

Одним из самых важных и востребованных в современной системе образования является предмет «Химия» в силу своей специфики. Особое значение для оптимального ведения уроков химии в Республике Туркменистан является мотивация обучающихся к изучению данного предмета. В ходе анализа [1, 2] организации учебно-воспитательного процесса на уроках и во внеурочной работе по химии в школах Туркменистана и Российской Федерации мы отмечаем различные варианты решения данной проблемы проблему повышения мотивации учащихся. Наиболее часто учителя химии применяют элементы игровых технологий в учебную программу, а это способствует сосредоточению внимания учеников 8-11-х классов (а в Туркменистане – 7-11-х классов) на самостоятельном преодолении трудностей, быстром принятии решений, развитии воображения, внимания, речи и памяти, способности полного усвоения химических понятий.

В целом, использование элементов игровых навыков в химическом образовании разных стран направлено на развитие творческих способностей учащихся. Игровые навыки помогут успешному решению соответствующих образовательных задач, дополняя их и не отменяя использования других методов.

Список литературы

1. Качалова, Г.С. Формирование естественно-научной грамотности на уроках химии и биологии: учебно-методическое пособие / Г.С. Качалова. – Новосибирск: Изд-во НГПУ, 2021. – 60с.
2. Качалова, Г.С. Методика формирования базисной компетентности учащихся по органической химии: монография / Г.С. Качалова. – Новосибирск: Изд. НГПУ, 2020. – 206 с.

УДК 372.8

АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ РАБОТЫ ПО ПРИМЕНЕНИЮ МУЗЕЙНОЙ ПЕДАГОГИКИ В ОБУЧЕНИИ ХИМИИ

Оразова О, Халикова Ф.Д.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: jahan.ozarova01@gmail.ru

Ключевые слова: музейная педагогика, обучение химии, экспериментальная работа, обучающийся, патриотическое воспитание.

Сегодня в сфере образования наиболее значимой проблемой становится проблема патриотического воспитания обучающихся. Современная музейная педагогика продолжает развиваться и совершенствоваться через проблемы музейного взаимодействия [1], она нацелена на активизацию творческих и креативных способностей личности.

Основным направлением музейной педагогики выступает трансформация от одиночного контакта с посетителями до разработки многостадийного инновационного комплекса музейного образования.

Исследовательская деятельность нашей работы состояла из нескольких этапов, ключевым моментом стал последний этап работы, который заключался в проведении эксперимента для подтверждения выдвинутой гипотезы о том, что при систематическом применении технологии музейной педагогики в организации образовательно-воспитательной деятельности, в процессе обучения химии будет наблюдаться повышение мотивации и интереса к изучению предмета естественнонаучного цикла, повышение качества обученности, а также формирование у обучающихся целостной картины мира. При систематическом применении технологии музейной педагогики в организации образовательно-воспитательной деятельности в обучения химии наблюдается повышение мотивации и интереса к изучению предмета естественнонаучного цикла [2].

Список литературы

1. Мельникова, Г.Ф. Музеи университета как фактор поликультурного воспитания молодежи / Г.Ф. Мельникова, С.И. Гильманшина // Современные проблемы науки и образования. – 2015. – № 4. – С. 225.
2. Халикова, Ф.Д. Музейная образовательная среда как средство обучения и воспитания одаренных школьников / Ф.Д. Халикова, О. Оразова // Тенденции развития науки и образования. – 2023. – №95. – С. 19-21.

УДК 372.8

ИНТЕРАКТИВНЫЕ МЕТОДЫ ДИСТАНЦИОННОГО ОБУЧЕНИЯ ХИМИИ

Рейимбаева Д., Космодемьянская С.С.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: moonshine1908@mail.ru, svetlanakos@mail.ru

Ключевые слова: методика химии, дистанционное обучение, интерактивный метод, обучающиеся, исследование, химическое образование.

Модернизация образовательного процесса ориентирована на формирование и дальнейшее развитие личности ребенка при использовании системно-деятельностного и практико-ориентированных методов обучения. На сегодняшний день интерактивные системы обучения и дистанционный формат обучения стали предметом большого внимания в образовательном пространстве Российской Федерации. Обучение можно назвать «интерактивным», если на уроке достигается высокий уровень взаимодействия между учителем и учеником.

Анализ учебно-воспитательного процесса в образовательных учреждениях Туркменистана показал, что в экспериментальных классах частично применяется дистанционный формат обучения.

Мы отмечаем определенную атмосферу таких занятий, которая основывается на взаимной поддержке и уважении. При этом практики отмечают совершенствование когнитивных, коммуникативных, регулятивных и личностных компетенций. В условиях химического образования в Туркменистане отмечаем значимость воспитательных возможностей вариативных интерактивных форм, средств и методов обучения. Все это способствует не только мотивации обучающихся, но и формированию гражданской ответственности на уроках химии.

Проведя анализ научно-методической литературы, мы констатируем определенные трудности в организации дистанционного характера обучения в большинстве образовательных школ Республики Туркменистан. Наше исследование включает в себя изучение методических особенностей адаптации элементов дистанционного обучения химического образования в Туркменистане. При этом мы делаем на выявление эффективности применения интерактивных методов обучения при изучении химии с целью реализации дистанционного обучения химии.

УДК 372.8

ПОВЫШЕНИЕ МОТИВАЦИИ К УЧЕБНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ОБУЧАЮЩИХСЯ ДЕВЯТЫХ КЛАССОВ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ХИМИИ

Розметова Ш.Х., Мельникова. Г.Ф.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail rozmetova2001@bk, ms.valitova1989@mail.ru

Ключевые слова: мотивация обучения, цифровизация, интерактивные технологии, методика преподавания химии.

В современном образовании внимание уделяется формированию положительной внутренней мотивации школьников к изучению предмета [1, с. 98].

Сегодня в процессе обучения химии особое значение приобретают разного рода интерактивные, цифровые форматы и технологии, позволяющие школьникам использовать привычные для них гаджеты в образовательном процессе [2, с. 62].

Нами было проведено исследование, целью которого стало выявление наиболее эффективных форм организации обучения химии в 9 классе для повышения мотивации к изучению предмета.

В ходе опытно-экспериментальной работы нами были разработаны веб-квесты, профориентационные мероприятия. Доказана эффективность проведенных занятий в повышении мотивации школьников к изучению химии. В целом внедрение разработанной системы занятий в практику обучения химии в 9 классе способствовало повышению интереса к изучению предмета, увеличению познавательной активности и мотивации.

Полученные результаты позволяют сделать вывод об эффективности разработок и обуславливают возможность использования ее в практике работы учителей химии и других естественнонаучных предметов.

Список литературы

1. Панькина, В.В. Повышение мотивации обучающихся к изучению химии через проектно-исследовательскую деятельность / В.В. Панькина, Н.В. Жукова, О.А. Ляпина // Гуманитарные науки и образование. – 2019. – Т. 10. – № 2(38). – С. 97-102.
2. Качалова, Г.С. Повышение мотивации обучающихся старших классов при изучении химии / Г.С. Качалова, Т.К. Багавиева, Е.В. Шаталов // Управление развитием образования. – 2022. – № 1. – С. 61-65.

УДК 372.8

РЕФЛЕКСИЯ КАК МЕХАНИЗМ ФОРМИРОВАНИЯ КРИТИЧЕСКОГО МЫШЛЕНИЯ НА ДИСТАНЦИОННЫХ УРОКАХ ХИМИИ

Саттарова Г.А., Космодемьянская С.С.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: mysun.themoon7@gmail.com, svetlanakos@mail.ru

Ключевые слова: методика химии, рефлексия, обучающиеся, технология критического мышления, химическое образование, дистанционное обучение.

Значимость темы исследования обусловлена с переходом образовательных учреждений на смешанное (гибридное) обучение. Рефлексия в качестве механизма развития критического мышления весьма востребована при изучении химии.

Целью исследования является раскрытие методологических основ рефлексии как механизма развития критического мышления для применения будущими учителями химии в дистанционном формате.

Проблему решения применения рефлексии как механизма формирования критического мышления [2] исследовались в работах С.И. Заир-Бек, В.И. Муштавинской. Вопросам внедрения дистанционного обучения [1] посвящены исследования В.Е. Зубова, Е.С. Полат, Е.В. Романова и Т.В. Дроздова. По результатам нашего 4-хлетнего [3] исследования (с 2019 года) мы пришли к выводу, что рефлексия как механизм формирования критического мышления должна быть одним из основных компонентов урочной и внеурочной деятельности. Мы подтвердили гипотезу о непосредственной взаимосвязи и взаимодополнении рефлексии и форм и методов индивидуальной работы обучающихся с информацией.

Список литературы

1. Полат Е.С. Педагогические технологии дистанционного обучения: учебное пособие для вузов / Е.С. Полат. – 3-е изд. – М.: Издательство Юрайт, 2020. – 392 с.
2. Турчевская, Б.К. Рефлексия как механизм формирования критического мышления / Б.К. Турчевская, И.О. Киреева // Мотивация и рефлексия личности: актуальные вопросы теории и практики. – 2020. – С. 294-298.
3. Саттарова, Г.А. Рефлексия как инструмент эффективного обучения на уроках химии / Г.А. Саттарова, С.С. Космодемьянская // Interdisciplinary research: past experience, present opportunities, future strategies: Collection of articles XVII International Scientific and Practical Conference. – Melbourne: ICSRD «Scientific View». – 2022. – 419 с. – С. 356-365.

УДК 373.1

САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА ОБУЧАЮЩИХСЯ В ЦИФРОВОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ СРЕДЕ

Текаева О.О., Сагитова Р.Н.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: o.tekayeva1999@gmail.com

Ключевые слова: самостоятельная работа, цифровая образовательная среда, обучение химии.

Современная образовательная среда становится цифровой и интерактивной, что требует изменения подходов к организации учебного процесса. Самостоятельная работа обучающихся в условиях цифровизации образования [1, 2] становится одним из ключевых инструментов формирования компетентных выпускников. Одним из главных достоинств цифровой образовательной среды является возможность организации дистанционной самостоятельной работы обучающихся.

В результате опытно-экспериментальной работы с российскими и туркменскими обучающимися установлено, что цифровая образовательная среда позволяет обучающимся работать в коллаборативном режиме: обмениваться с другими учащимися знаниями из разных частей страны и работать над проектными работами в группах. Это помогает им развивать коммуникативные навыки. Наконец, использование цифровых ресурсов в образовательной среде для самостоятельной работы обучающихся позволяет развить навыки самоорганизации и управления временем, что является важным навыком для будущей карьеры.

Список литературы

1. Гильманшина, С.И. Авторские цифровые ресурсы как элементы образовательной среды подготовки учителей химии / С.И. Гильманшина, Г.Д. Каримова, Р.Н. Шакирова // Современные проблемы науки и образования. – 2022. – № 1. – URL: <https://science-education.ru/article/view?id=31435> (дата обращения: 01.02.2022).

2. Гильманшина, С.И. Разработка и внедрение цифровых видеоматериалов методического сопровождения химического практикума / С.И. Гильманшина, А.Р. Рахманова, В.А. Миннахметова // Современные наукоемкие технологии. – 2022. – № 4. С. 151-155.

УДК 372.8

ОРГАНИЗАЦИЯ ХИМИЧЕСКОГО ПРАКТИКУМА ВО ВНЕКЛАССНОЙ РАБОТЕ

Тораева Х., Космодемьянская С.С.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: akgulorazgurbanoaa@gmail.co, svetlanakos@mail.ru

Ключевые слова: методика химии, лабораторный практикум, обучающиеся, внеклассная работа, химическое образование.

Внеклассная или внеурочная работа представляет собой ряд учебно-воспитательных мероприятий. Это накладывает специфичный оттенок на организацию химического практикума при проведении внеклассных мероприятий по химии.

Основной целью внеклассной работы является привитие интереса к самостоятельному изучению химии, развитие практическое применения теоретических знаний и навыков обучающихся, развитие творческой активности и др.

Анализ учебной практики в образовательных учреждениях Туркменистана, к сожалению, показал использование неполного потенциала химии как науки. Мы выявили определенные трудности в организации химического практикума в ряде образовательных школ Республики.

В образовательных учреждениях Российской Федерации отмечаем, что внеклассная работа сплачивает обучающихся, прививая им навыки коммуникабельности и работы в группах. Если учитель химии оптимально применяет специфику преподавания химии, то можно с обучающимся проводить исследовательские работы наравне с практическими работами, разрабатывать свои индивидуальные проекты и многое другое. Эксперименты во внеурочное время могут быть как «естественные», так и виртуальные, тем самым можно отлично приспособить обучающимся цифровую компетентность, что на уроках сделать весьма трудно.

Действительно, внеклассная работа по химии является наиболее информативной и интерактивной формой обучения и воспитания обучающихся. Мы предполагаем, что организация химического практикума в ходе внеклассной работы учителя способна наполнить учебный процесс творческой активностью обучающихся, мотивировать их к самостоятельному дальнейшему изучению химии, расширяя знания не только в области химии, но во других метапредметных областях.

УДК 378

ОСОБЕННОСТЬ ТЕХНОЛОГИИ КОНТЕКСТНОГО ОБУЧЕНИЯ БУДУЩИХ УЧИТЕЛЕЙ ХИМИИ

Фазылова С.Р., Агзамова И.И.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: fazilova.sumbel.exo@yandex.ru

Ключевые слова: контекстное обучение, технология контекстного обучения, обучение химии, подготовка учителей химии.

Профессиональная подготовка будущих учителей химии – очень сложный процесс, который носит системный характер, осуществляется в тесной взаимосвязи учебной и внеучебной работы. Она включает создание необходимых условий для формирования и развития профессиональных компетенций обучающихся, их духовно-нравственного и культурного развития [3], обогащение личностного опыта решения и профессионально значимых проблем в условиях цифровизации образования [1, 2].

Целью исследования является выявление особенностей технологии контекстного обучения будущих учителей химии.

Задачами исследования являются изучение психолого-педагогических и организационных основ применения технологии контекстного обучения в подготовке будущих учителей химии; анализ отечественного и зарубежного опыта применения технологии контекстного обучения; разработка профессиональных задач в условиях цифровизации образования.

Список литературы

1. Гильманшина, С.И. Авторские цифровые ресурсы как элементы образовательной среды подготовки учителей химии / С.И. Гильманшина, Г.Д. Каримова, Р.Н. Шакирова // Современные проблемы науки и образования. – 2022. – № 1. – URL: <https://science-education.ru/article/view?id=31435> (дата обращения: 01.02.2022).
2. Гильманшина, С.И. Разработка и внедрение цифровых видеоматериалов методического сопровождения химического практикума / С.И. Гильманшина, А.Р. Рахманова, В.А. Миннахметова // Современные наукоемкие технологии. – 2022. – №4. С. 151-155.
3. Мельникова, Г.Ф. Музеи университета как фактор поликультурного воспитания молодежи / Г.Ф. Мельникова, С.И. Гильманшина // Современные проблемы науки и образования. – 2015. – №4. – С. 225.

УДК 371.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВНЕУРОЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ПО ХИМИИ ДЛЯ ОРГАНИЗАЦИИ УЧЕБНО-ВОСПИТАТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ С ОБУЧАЮЩИМИСЯ СТАРШИХ КЛАССОВ В ШКОЛЕ

Чарыева Г., Халикова Ф.Д.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: gulyatoylyevna070801@gmail.com

Ключевые слова: внеурочная деятельность, учебно-воспитательная работа, метапредметный результат обучения, обучающийся, результат.

Внеурочная деятельность является неотъемлемым компонентом учебной работы, ориентированной как на достижение предметных результатов, так и на формирование личности обучающегося, а также усвоение метапредметных результатов обучения.

Внеурочная деятельность – учебная деятельность, которая реализуется в формах, не соответствующих классно-урочной системе, ориентированная на достижение планируемых результатов обучения основного образования. Внеурочная деятельность – это особенная, уникальная и оптимизированная форма организации свободного время проведения обучающихся.

В ходе исследования нами была организована экспериментальная работа в ходе прохождения педагогической практики на базе СУНЦ «IT-лицей» КФУ, в результате которой удалось подтвердить выдвинутую гипотезу о том, что регулярная реализация внеурочной деятельности в рамках учебно-воспитательной работы способствует повышению познавательного интереса, а также мотивации к предмету естественнонаучного цикла – химии, у обучающихся старших классов [1]. Мы провели анализ экспериментальной части по использованию внеурочной деятельности с обучающимися старших классов в рамках школьного химического образования, апробировали результаты практической работы по использованию внеурочной деятельности по химии для организации учебно-воспитательной работы с обучающимися старших классов в школе.

Список литературы

1. Халикова, Ф.Д. Роль внеурочной деятельности в обучении одаренных школьников / Ф.Д. Халикова, Г. Чарыева // International Journal of Humanities and Natural Sciences. – 2023. – Vol. 2-1(77). – P. 159-161.

УДК 372.8

АНАЛИЗ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МЕТОДОВ, ПРИЕМОВ И ТЕХНОЛОГИЙ ПО ФОРМИРОВАНИЮ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ КОМПЕТЕНЦИЙ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ХИМИИ

Чотаева О.Б., Ямбушев Ф.Д.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: fdyambushev@kpfu.ru

Ключевые слова: исследовательские компетенции, педагогические технологии, обучение химии, химическое образование.

Сегодня актуально формирование способности обучающихся к исследовательской работе, как компоненте творческой деятельности и профессиональной предрасположенности к различным видам работ в школе и университете в области обучения и воспитания [1, 2]. Исследовательская компетенция рассматривается как индивидуальное качество обучающегося, охватывающее знания, умения, навыки, которые ориентированы на формирование исследовательских способностей и стремление к самообразованию [1].

В процессе прохождения педагогической практики на базе школ г. Казани нами была проведена работа с обучающимися – экспериментальной и контрольной групп. Работа с обучающимися экспериментальной группы проходила в несколько этапов. Была организована работа с использованием методов, приемов и технологий, направленных на формирование исследовательской компетенции – проводились практические работы, проектные задания, были использованы виртуальные и цифровые лаборатории. Контрольное тестирование позволило сделать вывод о том, что итоговый показатель в сравнении с показателем вводного теста в экспериментальной группе несколько выше, чем показатели тестирования в контрольной группе.

Список литературы

1. Ляпина, О.А. Развитие исследовательских умений обучающихся при изучении химии / О.А. Ляпина, В.В. Панькина, Н.В. Жукова, Ю.М. Сухарева // Современные проблемы науки и образования. – 2021. – № 3. – URL: <https://science-education.ru/ru/article/view?id=30863> (дата обращения: 15.03.2023).
2. Мельникова, Г.Ф. Музеи университета как фактор поликультурного воспитания молодежи / Г.Ф. Мельникова, С.И. Гильманшина // Современные проблемы науки и образования. – 2015. – № 4. – С. 225.

УДК 373

ИГРОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ХИМИИ У ОБУЧАЮЩИХСЯ ПРЕДПРОФИЛЬНЫХ КЛАССОВ

Шамырадова О., Халикова Ф.Д.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: oguljan.shamyradova@gmail.com

Ключевые слова: игровая технология, предпрофильный класс, обучающийся, изучение химии, мотивация.

На сегодняшний день наиболее актуальной проблемой в образовании является отсутствие вовлечения в учебный процесс, потеря мотивации в обучении и потеря заинтересованности в изучении химии. Получение новых знаний, усвоение нового учебного материала химического содержания, приобретение новых умений и навыков не является основной целью обучающихся из-за элементарной потери интереса. Это влечет за собой снижение уровня знания предмета химии и мотивации в его изучении в целом. Для решения данной проблемы многие учителя прибегают к использованию современных методов и технологий, например, игровых, которые выступают в роли эффективного метода обучения, вовлекающего в учебный процесс каждого обучающегося. Игровые технологии – определенный вид деятельности, в рамках которой воссоздается ситуация, ориентированная на воспроизведение и освоения навыков и умений посредством игры, совершенствуется самостоятельный контроль за действиями.

В результате проделанного анализ экспериментальной деятельности по использованию игровых технологий в учебно-образовательной деятельности у предпрофильных классов как средства повышения познавательных интересов к обучению химии, нами были представлены методические рекомендации по применению игровых технологий, которые могут использовать учителя химии в своей педагогической работе [1].

Список литературы

1. Шамырадова, О. Применение игровых технологий в учебной деятельности с одаренными школьниками: сборник трудов конференции / О. Шамырадова, Ф.Д. Халикова // Современные проблемы и технологии инновационного развития образования: материалы III Междунар. студенч. науч.-практ. конф. (Тула, 5 апр. 2023 г.) / редкол.: С.В. Митрохина [и др.] – Чебоксары: ИД «Среда», 2023.

УДК 372.8

ИССЛЕДОВАНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРИМЕНЕНИЕ АДАПТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОБУЧЕНИЯ ХИМИИ СРЕДНЕГО ОБРАЗОВАНИЯ

Шульга В.А., Космодемьянская С.С.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: Virusyakav@mail.ru, svetlanakos@mail.ru

Ключевые слова: методика химии, адаптивная система обучения, среднее общее образование, химическое образование.

Первый этап исследование включал в себя следующие компоненты:

1. Анкетирование обучающихся среднего общего образования относительно адаптивного обучения химии. Апробирование разработанных элементов технологии адаптивного обучения химии для 10-го класса на конструкторе открытых образовательных ресурсов на базе Н5Р «УДОБА». В процессе экспериментальной деятельности исследования приняли участие учащиеся 10-х классов МБОУ «Гимназия №20 им. Абдуллы Алиша» [2]. Данные усвоения основных химических понятий были вычислены по формуле для вычисления коэффициента усвоения знаний:

$$\text{коэффициент_усвоения} = P/(m \times n),$$

где P – число правильных ответов; m – соответствует количеству вопросов; n – число обучающихся.

2. Результаты письменных 5 контрольных точек по химии. Во время проведения уроков в четвертой четверти нами был проведен комплект уроков с активным применением адаптивных технологий с учетом индивидуальных особенностей обучающихся (стиль мышления; ведущая модальность; уровень обученности).

Вывод: анализ контрольных точек за данный период показал, что применение элементов адаптивной системы [1] обучения химии благоприятно влияет на качество усвоения предметных знаний по химии. Можно отметить, учет индивидуальных особенностей обучающихся средней школы является достаточно эффективным способом повышения качества обучения.

Список литературы

1. Иванова, И.С. Теория и методика адаптивного обучения химии: учебно-методическое пособие / И.С. Иванова. – Санкт-Петербург: Лема, 2011. – 62 с.

2. Шульга, В.А. Применение активных форм и методов обучения / В.А. Шульга // Актуальные направления фундаментальных и прикладных исследований: материалы XXVIII международной научно-практической конференции. – North Charleston, USA: 2022. – С. 102-107.

УДК 372.8

АНАЛИЗ ОРГАНИЗАЦИИ ВНЕУРОЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ПО ХИМИИ В УСЛОВИЯХ ЦИФРОВОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ СРЕДЫ

Эсенова О.Я., Мельникова Г.Ф.

Россия, Казань, Казанский федеральный университет

Russia, Kazan, Kazan Federal University

E-mail: servijanovezova@mail.ru

Ключевые слова: оценка знаний, контроль знаний, цифровые оценочные средства, обучение химии.

Сегодня в условиях цифровой образовательной среды [1, 2] одной из востребованных форм педагогической деятельности химического образования, как отмечается в [3, 4], является грамотная внеурочная работа. Гипотеза исследования: регулярная организация внеурочной деятельности по химии в условиях цифровой образовательной среды способствует повышению степени заинтересованности предметами естественнонаучного цикла, повышению качества обученности, гармоничному развитию личности. В ходе педагогической практики на базе СУНЦ «ИТ-лицей» г. Казани нами были организованы две группы обучающихся 8 классов – экспериментальная и контрольная и проведена опытно-экспериментальная внеурочная деятельность с использованием различных цифровых образовательных платформ, цифровых методов обучения; привнесения обучающихся в процесс индивидуального поиска информационных данных. В итоге выдвинутая гипотеза была подтверждена.

Список литературы

1. Гильманшина, С.И. Авторские цифровые ресурсы как элементы образовательной среды подготовки учителей химии / С.И. Гильманшина, Г.Д. Каримова, Р.Н. Шакирова // Современные проблемы науки и образования. – 2022. – № 1. – URL: <https://science-education.ru/article/view?id=31435> (дата обращения: 01.02.2022).
2. Гильманшина, С.И. Разработка и внедрение цифровых видеоматериалов методического сопровождения химического практикума / С.И. Гильманшина, А.Р. Рахманова, В.А. Миннахметова // Современные наукоемкие технологии. – 2022. – № 4. С. 151-155.
3. Мельникова Г.Ф. Музеи университета как фактор поликультурного воспитания молодежи / Г.Ф. Мельникова, С.И. Гильманшина // Современные проблемы науки и образования. – 2015. – № 4. – С. 225.
4. Пак М.С. Теория и методика обучения химии: учебник для вузов / М.С. Пак. – СПб: Изд-во РГПУ им. А. И. Герцена, 2015. – 306 с.

СОДЕРЖАНИЕ

СЕКЦИЯ 1.....	4
Адыгамов М.Ш. ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ КАРБОКСИЛАТОВ ХРОМА (III)	5
Ахмадгалеев К.Д., Стрельник И.Д., Герасимова Т.П., Карасик А.А., Синяшин О.Г. ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ ТЕТРАЯДЕРНЫЕ КОМПЛЕКСЫ МЕДИ(I) С 1,3-ДИАЗА-5-ФОСФАЦИКЛОГЕКСАНАМИ	6
Гайфуллина Э.Т., Галимова Э.Р., Зиятдинова А.Б., Амиров Р.Р., Заиров Р.Р., Корнев Т.А., Ханнанов А.А. ОСОБЕННОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ НАНОЧАСТИЦ СЕРЫ В УЛЬТРАМИКРОГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕДАХ	7
Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М., Авезов К.Г., Бахриддинов А.Х. ИЗУЧЕНИЕ И РАЗРАБОТКА СПОСОБОВ ПОЛУЧЕНИЯ СТРОИТЕЛЬНЫХ НЕОРГАНИЧЕСКИХ ПИГМЕНТОВ	8
Гизятуллов Р.Н., Егорова С.Р., Ламберов А.А., Ермолаев Р.В., Курбангалеева А.З. ВЛИЯНИЕ МОДИФИЦИРОВАНИЯ ФТОРОМ НА СОСТОЯНИЕ АКТИВНОГО КОМПОНЕНТА И СВОЙСТВА АЛЮМОХРМОВОГО КАТАЛИЗАТОРА В РЕАКЦИИ ДЕГИДРИРОВАНИЯ ИЗОБУТАНА В ИЗОБУТИЛЕН	9
Жернаков М.А., Мирзаянов И.И., Бухаров М.С., Гарифзянов А.Р., Штырлин В.Г. СИНТЕЗ, СТРУКТУРА, ОПТИЧЕСКИЕ И ТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА КОМПЛЕКСОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ С 2-МЕТИЛДИПИРИДО-[3,2-f:2',3'-h]-ХИНОКСАЛИНОМ	10
Ибагуллина М.Р., Амакуе Д., Пушкарева И.С., Кутырева М.П. СИНТЕЗ ГИБРИДНЫХ НАНОЧАСТИЦ МАГНЕТИТА, МОДИФИЦИРОВАННЫХ СВЕРХРАЗВЕТВЛЕННЫМ ПОЛИЭФИРОПОЛИОЛОМ	11
Мосалёв П.О., Абдуллина Д.Р., Гизатов Р.Р. СИНТЕЗ И КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МОНОДЕНТАНТНЫХ ФЕНИЛСОДЕРЖАЩИХ КАРБОКСИЛАТНЫХ КОМПЛЕКСОВ Cu(II)	12
Мустафина А.О., Амиров Р.Р., Зиятдинова А.Б., Заиров Р.Р., Низовцев А.В., Бухаров М.С., Губайдуллин А.Т. КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ Cu(II) И Mn(II) С 2-АМИНОПРОПАН-1,2,3-ТРИКАРБОНОВОЙ КИСЛОТОЙ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ	13
Солодов А.Н., Нежелская Д.А., Модина В.А. КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ЖЕЛЕЗА(III) С РЯДОМ ОКСИ-БЕНЗОЙНЫХ КИСЛОТ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ПОЛИЭТИЛЕНИМИНА	14
Платонова А.А., Головизнин А.А., Хаметшина Э.Ф., Солодов А.Н. СИНТЕЗ НАНОЧАСТИЦ ОКСИДОВ ЖЕЛЕЗА МЕТОДОМ ТЕРМОЛИЗА: ВЛИЯНИЕ КОНЦЕНТРАЦИИ ОЛЕИНОВОЙ КИСЛОТЫ	15
Рецепова А.Ф., Рахматуллина К.Ф., Журавлева Ю.И. КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ КОБАЛЬТА(II) С РОДАНИД-ИОНАМИ В УЛЬТРАМИКРОГЕТЕРОГЕННЫХ СРЕДАХ	16
Роженцова Д.К., Бочкова О.Д. СИНТЕЗ И ЦИТОТОКСИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НАНОЧАСТИЦ ДИОКСИДА КРЕМНИЯ С НИТРОЗИЛЬНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ РУТЕНИЯ	17
Севинчова Д.Н., Турсунов М.А., Умаров Б.Б. КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА КОМПЛЕКСА Ni(II) С АРОИЛГИДРАЗОНОМ ЭТИЛОВОГО ЭФИРА 2,4-ДИОКСОПЕНТАНОВОЙ КИСЛОТЫ ...	18
Сулаймонова З.А., Умаров Б.Б., Атоева М.О., Мирзаева Г.А., Наврузова М.Б. СТРОЕНИЕ АЦИЛГИДРАЗОНОВ МОНОАЦЕТИЛФЕРРОЦЕНА	19
Уразаева К.В., Серов Н.Ю., Гилязетдинов Э.М., Бухаров М.С., Штырлин В.Г. ТЕРМОДИНАМИКА ОБРАЗОВАНИЯ, КИНЕТИКА РЕАКЦИЙ ЛИГАНДНОГО ОБМЕНА И СТРУКТУРА КОМПЛЕКСОВ В РАСТВОРАХ ОКСОВАНАДИЯ(IV) С БИОЛИГАНДАМИ	20

Фаезова А.И., Даянова И.Р., Стрельник И.Д., Мусина Э.И. Карасик А.А. ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ДИМЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ ЗОЛОТА(I) С 1,5-ДИАЗА-3,7-ДИФОСФАЦИКЛООКТАНАМИ.....	21
Хисматуллин А. А. СИНТЕЗ БЕСФТОРОВЫХ ЛЬЖНЫХ МАЗЕЙ СКОЛЬЖЕНИЙ	22
Холикова Г.К., Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М., Акрамов А.Я., Фатуллаев Н.Н., Турдиева Г.А., Кахрамонова М.З., Нарзуллаева М.Р. СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ СВОЙСТВ СОЛЕЙ МОЧЕВИНЫ С КИСЛОТАМЫ ЭЛЕМЕНТОВ V ГРУППЫ.....	23
Чернуха Е.А., Савенков А.Ю., Овчинникова Е.П, Власенко В.В., Журавлева Ю.И. ЯМР-РЕЛАКСАЦИОННОЕ ЗОНДИРОВАНИЕ ОБРАЗОВАНИЯ ПОЛИПЛЕКСОВ В ВОДНЫХ РАСТВОРАХ ПОЛИЭТИЛЕНИМИНА.....	24
СЕКЦИЯ 2.....	25
Абдюшева А.Р., Зимин Ю.С. КИНЕТИКА ОКИСЛЕНИЯ 2,6-ДИМЕТИЛФЕНОЛА ПРИ ВОЗДЕЙСТВИИ ПЕРОКСИДА ВОДОРОДА И ВОЛНОВОГО УДАРА	26
Абрамов И.А., Гайнанова С.И. ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЛЕВОФЛОКСАЦИНА С ПОМОЩЬЮ СЕНСОРА НА ОСНОВЕ ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННОГО ФУЛЛЕРЕНА	27
Афзалетдинов Р.Д., Кучина О.М., Судаков В.А., Гарифзянов А.Р. ОПРЕДЕЛЕНИЕ МАТРИЧНЫХ КАТИОНОВ ПЛАСТОВЫХ ВОД НЕФТЯНЫХ МЕСТОРОЖДЕНИЙ МЕТОДОМ ЭМИССИОННОЙ ФОТОМЕТРИИ ПЛАМЕНИ	28
Багманова А.Х., Рамазанова А.Н., Бруснищын Д.В., Медянцева Э.П., Зиганшин М.А., Еремин С.А., Донгур-Оол Д.А., Баишева Д.В., Каримова А.Л., Ягодкина Е.А., Зотагина М.О., Дворникова П.В. ИММУНО ХИМИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЦИПРОФЛОКСАЦИНА В МЕДИКО-БИОЛОГИЧЕСКИХ ОБЪЕКТАХ	29
Баширов И.Д., Афзалетдинов Р.Д., Гараева Г.Р., Нургалиев Д.К., Гарифзянов А.Р. ОПРЕДЕЛЕНИЕ КАТИОННОГО СОСТАВА КОММЕРЧЕСКИХ ОБРАЗЦОВ ПИТЬЕВОЙ ВОДЫ С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДОВ ЭМИССИОННОЙ ФОТОМЕТРИИ ПЛАМЕНИ И МАСС-СПЕКТРОМЕТРИИ С ИНДУКТИВНО СВЯЗАННОЙ ПЛАЗМОЙ	30
Бегешева Е.А. ЭЛЕКТРОПОЛИМЕРИЗАЦИЯ АЗУРА С ИЗ ВОДНЫХ СРЕД И ГЛУБОКИХ ЭВТЕКТИЧЕСКИХ РАСТВОРИТЕЛЕЙ.....	31
Лопатко Н.Ю., Ван Чжаоминь, Куксенюк А.А., Бейлинсон Р.М. АМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ БИОСЕНСОРЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АФЛАТОКСИНА М1.....	32
Габдрафикова Г.Р., Зиятдинова Г.К. ЭЛЕКТРОД НА ОСНОВЕ ПОЛИ(ЭРИОХРОМ ЧЕРНОГО Т) ДЛЯ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ L-ТИРОЗИНА.....	33
Газизуллина Э.Р., Медянцева Э.П. ВЫБОР МОДИФИКАТОРОВ ПОВЕРХНОСТИ ЭЛЕКТРОДОВ КАК ОСНОВЫ ИММУНОСЕНСОРОВ ПРИ ОПРЕДЕЛЕНИИ ТРИЦИКЛИЧЕСКИХ АНТИДЕПРЕССАНТОВ.....	34
Гайнанова С.И., Абрамов И.А. ЭНАНТИОСЕЛЕКТИВНЫЙ АНАЛИЗ НАПРОКСЕНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОГО СЕНСОРА НА ОСНОВЕ ОКСИДА ГРАФЕНА И МОДИФИЦИРОВАННОГО ХИТОЗАНА.....	35
Гайнетдинова Ю.И., Зайцева Е.В., Гарифзянов А.Р. МЕМБРАННАЯ ЭКСТРАКЦИЯ КАТИОНОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ О-2-ЭТИЛГЕКСИЛ-N,N-ДИ-2-ЭТИЛГЕКСИЛАМИНОМЕТИЛФОСФОНОВОЙ КИСЛОТЫ	36

Григорьева И.О., Зиятдинова Г.К. ЭЛЕКТРОД, МОДИФИЦИРОВАННЫЙ НАНОЧАСТИЦАМИ ДИОКСИДА ЦЕРИЯ И ЦЕТИЛПИРИДИНИЙ БРОМИДОМ, ДЛЯ ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОГО ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПРОПИЛГАЛЛАТА	37
Гусейнова А., Евтюгин Г.А. ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ СЕНСОРЫ И БИОСЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ АСИММЕТРИЧНЫХ МЕДИАТОРОВ ЭЛЕКТРОННОГО ПЕРЕНОСА	38
Ефимов В.М. ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЧНОСТЫХ ХАРАКТЕРИСТИК ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ.....	39
Жарикова О.Г., Косурова Д.С., Шанин И.А., Арутюнян Д.А., Мухаметова Л.И., Еремин С.А. ОПРЕДЕЛЕНИЕ МОНОБЕНЗИЛФТАЛАТА В ВОДЕ МЕТОДОМ ПОЛЯРИЗАЦИОННОГО ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО ИММУНОАНАЛИЗА	40
Заборских М.В., Денисова С.А. ИЗУЧЕНИЕ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ СКАНДИЯ С БРОМПИРОГАЛЛОЛОВЫМ КРАСНЫМ В ПРИСУТСТВИИ КАТАМИНА АБ.....	41
Иванова М.П., Зиятдинова Г.К. ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ ПОДХОД К ОПРЕДЕЛЕНИЮ ТАНИНОВ В РАСТИТЕЛЬНОМ СЫРЬЕ	42
Калинина М.А., Евтюгин Г.А. ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ПОКРЫТИЙ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНОЙ ЧЕРНИ И НОВЫХ ЧАСТИЧНО ОКИСЛЕННЫХ ПИЛЛАР[5]АРЕНОВ... 43	
Калмыкова А.Д., Зиятдинова Г.К. ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ ЭВГЕНОЛА НА ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ ЭЛЕКТРОПОЛИМЕРИЗОВАННЫМ ПИРОГАЛЛОЛОВЫМ КРАСНЫМ	44
Кашина А.К., Рамазанова А.Н., Брусницын Д.В., Семенова С.А., Кусачева И.С, Табачная Д.А. ВЛИЯНИЕ КОМПОЗИТОВ НА ОСНОВЕ УГЛЕРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ И КЛАСТЕРНЫХ КОМПЛЕКСОВ МОЛИБДЕНА НА АНАЛИТИЧЕСКИЕ ВОЗМОЖНОСТИ ИММУНОСЕНСОРОВ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АМИТРИПТИЛИНА	45
Конькова Е.К., Чибирев Е.О., Гарифзянов А.Р. ВЛИЯНИЕ АЗОТНОЙ КИСЛОТЫ НА АНАЛИТИЧЕСКИЙ СИГНАЛ РЗЭ ПРИ АНАЛИЗЕ РАСТВОРОВ МЕТОДОМ АЭС МИП.....	46
Королев В.И., Зверева Э.Р. ВТОРИЧНОЕ ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОТХОДОВ ПРЕДПРИЯТИЙ ТЭК	47
Королькова К.А., Лопатко Н.Ю., Бейлинсон Р.М. НОВЫЕ ВАРИАНТЫ ОПРЕДЕЛЕНИЯ АРИСТОЛОХИЕВОЙ КИСЛОТЫ I ТИРОЗИНАЗНЫМИ БИОСЕНСОРАМИ И ПОЛЯРИЗАЦИОННЫМ ФЛУОРЕСЦЕНТНЫМ ИММУНОАНАЛИЗОМ	48
Курашов Я.В., Гарифзянов А.Р. ЖИДКОСТНАЯ И МЕМБРАННАЯ ЭКСТРАКЦИЯ ТРЕХЗАРЯДНЫХ КАТИОНОВ ПРАЗЕОДИМА, НЕОДИМА, ГАДОЛИНИЯ И ТЕРБИЯ О-ОКТИЛ[(N-МЕТИЛ-N,N-ДИОКТИЛ)АММОНИОМЕТИЛ]ФОСФОНАТОМ	49
Легасова А.О., Рамазанова А.Н., Брусницын Д.В., Капралова Ф.Т., Драная Я.О., Чернова П.С., Димиев А.М., Свалова А.В. ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ МОДИФИКАТОРА НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ КОБАЛЬТА И ВОССТАНОВЛЕННОГО ОКСИДА ГРАФЕНА В БИОСЕНСОРНЫХ УСТРОЙСТВАХ.....	50
Мурдасова Д.А., Поздняк А.А., Гедмина А.В. ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ОПРЕДЕЛЕНИЕ И АМПЕРОМЕТРИЧЕСКОЕ ДЕТЕКТИРОВАНИЕ ТЕТРАЦИКЛИНА НА ЭЛЕКТРОДЕ, МОДИФИЦИРОВАННОМ БИНАРНОЙ СИСТЕМОЙ ПАЛЛАДИЙ-ЗОЛОТО И КОМПОЗИТОМ ОКСИДА ГРАФЕНА.....	51
Нестерова Ю.А. ЭЛЕКТРОПОЛИМЕРИЗОВАННЫЕ ПОКРЫТИЯ НА ОСНОВЕ ПОЛИ(АЗУРА А) ИЗ ВОДНО-ОРГАНИЧЕСКИХ СРЕД.....	52

Перескокова Е.В., Лопатко Н.Ю., Бейлинсон Р.М. АМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ ТИРОЗИНАЗНЫЙ ИММУНОСЕНСОР, МОДИФИЦИРОВАННЫЙ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫМИ МАТЕРИАЛАМИ, ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ КОЛХИЦИНА	53
Райзер А.Е., Хузягулова М.М., Денисова С.А., Заболотных С.А. ОСАЖДЕНИЕ И ФЛОТАЦИЯ ИОНОВ СКАНДИЯ (III) И ТУЛИЯ (III) АЛКИЛБЕНЗОЛСУЛЬФОКИСЛОТОЙ.....	54
Сайтов Д.Б., Ельчищева Ю.Б., Павлов П.Т. ИЗУЧЕНИЕ РЕАКЦИИ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ N-БЕНЗИЛОИЛ-N'-(8-ХИНОЛИЛСУЛЬФОНИЛ)ГИДРАЗИНА С ИОНАМИ Cu(II)	55
Сафина Г.Г., Ахмадуллина Л.И., Гарифзянов А.Р. МЕМБРАННАЯ ЭКСТРАКЦИЯ КАТИОНОВ РЕДКО ЗЕМЕЛЬНЫХ ЭЛЕМЕНТОВ O-2-ЭТИЛГЕКСИЛ(N,N-ДИ-2-ЭТИЛГЕКСИЛАМИНОМЕТИЛ)ФОСФОНАТОМ.....	56
Смирнова А.А., Рамазанова А.Н., Брусницын Д.В., Зиганшин М.А., Семенова С.А., Елистратова Ю.Г., Мустафина А.Р. АМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ ИММУНОСЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ ЭЛЕКТРОДОВ, МОДИФИЦИРОВАННЫХ ВОССТАНОВЛЕННЫМ ОКСИДОМ ГРАФЕНА В СОЧЕТАНИИ С КЛАСТЕРНЫМИ КОМПЛЕКСАМИ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ, ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ИМИПРАМИНА	57
Тарабукина А.Д., Зиятдинова Г.К. ВОЛЬТАМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЙ СЕНСОР НА ДИГИДРО КВЕРЦЕТИН ДЛЯ КОНТРОЛЯ КАЧЕСТВА БИОЛОГИЧЕСКИ АКТИВНЫХ ДОБАВОК.....	58
Текаева О.О., Сагитова Р.Н. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА ОБУЧАЮЩИХСЯ В ЦИФРОВОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ СРЕДЕ	59
Толкачева Е.В., Мирзаянов И.И., Гарифзянов А.Р. ПРОЦЕССЫ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ И ЭКСТРАКЦИИ КАТИОНОВ ЩЕЛОЧНОЗЕМЕЛЬНЫХ И ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ С N-(КАРБОКСИМЕТИЛ)-N-АЛКИЛАМИНОМЕТИЛЕН(О-ЭТИЛ)ФОСФОНОВОЙ КИСЛОТОЙ.....	60
Федорова Д.А., Рамазанова А.Н., Брусницын Д.В., Медянцева Э.П., Журавлева Ю.И., Асылгараева А.Ф., Димиев А.М., Свалова А.В. ПЕРСПЕКТИВНЫЕ МОДИФИКАТОРЫ НА ОСНОВЕ НАНОЧАСТИЦ МЕДИ В СОЧЕТАНИИ С ВОССТАНОВЛЕННЫМ ОКСИДОМ ГРАФЕНА ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ БИОСЕНСОРОВ	61
Цуй Ичень, Явишева А.А., Бейлинсон Р.М. АМПЕРОМЕТРИЧЕСКИЕ ТИРОЗИНАЗНЫЕ ИММУНОСЕНСОРЫ, МОДИФИЦИРОВАННЫЕ НАНОМАТЕРИАЛАМИ РАЗЛИЧНОЙ ПРИРОДЫ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ХЛОРАМФИНЕКОЛА.....	62
Шафигуллина И.З., Стойков Д.И., Евтюгин Г.А. ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИЕ ФЕРМЕНТНЫЕ СЕНСОРЫ НА ОСНОВЕ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИЛЛАР[5]АРЕНА С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПЕЧАТНОЙ ПРОТОЧНОЙ ЯЧЕЙКИ СО СМЕННЫМ РЕАКТОРОМ.....	63
Якупов И.С., Григорян Е.А. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ПОЛИМЕРНЫХ ПЛЕНОК В ПРЕДПОСЕВНОЙ ИНКРУСТАЦИИ СЕМЯН ДЛЯ СНИЖЕНИЯ НАПЫЛЕНИЯ	64
Ян Цибо, Явишева А.А., Бейлинсон Р.М. ОПРЕДЕЛЕНИЕ ХЛОРАМФЕНИКОЛА МЕТОДОМ ПОЛЯРИЗАЦИОННОГО ФЛУОРЕСЦЕНТНОГО И ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНОГО ИНЖЕКЦИОННОГО ИММУНОАНАЛИЗА	65
СЕКЦИЯ 3.....	66
Акчурина А.Р., Бурилов В.А., Гафиатуллин Б.Х., Султанова Э.Д., Соловьева С.Е., Антипин И.С. НОВЫЕ ГЕТЕРОЛИГАНДНЫЕ ННС- ПИРИДИНОВЫЕ КОМПЛЕКСЫ ПАЛЛАДИЯ (II) ТИПА RPPSI НА ОСНОВЕ П-ТРЕТ-БУТИЛТИАКАЛИКС[4]АРЕНА	67
Анисимова К.С., Ильин А.В. ФОСФИН-КАТАЛИЗИРУЕМОЕ А- И БИСПРИСОЕДИНЕНИЕ ГИДРОФОСФОРИЛЬНЫХ СОЕДИНЕНИЙ К АКТИВИРОВАННЫМ АЛКИНАМ.....	68

Атнабаева К.Р., Нагорнова О.А., Шабалин К.В., Фосс Л.Е., Ивкова Г.А., Борисов Д.Н. АЦИЛИРОВАНИЕ САЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ ХЛОРУКСУСНЫМ АНГИДРИДОМ В ПРИСУТСТВИИ ГЕТЕРОГЕННЫХ КАТАЛИЗАТОРОВ.....	69
Байгузина Э.А., Султанова Д.Р., Давлетшина Н.В. АКТИВНЫЙ ТРАНСПОРТ ИОНОВ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ ЛИПОФИЛЬНЫМИ ФОСФОРИЛИРОВАННЫМИ БЕТАИНАМИ.....	70
Берналь Г.Л.К., Салин А.В. ФОСФИН-КАТАЛИЗИРУЕМЫЙ СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ АРГЛАБИНА.....	71
Богданов И.М., Бурилов В.А., Миронова Д.А. Соловьева С.Е., Антипин И.С. СИНТЕЗ НОВЫХ АМФИФИЛЬНЫХ ТРИАЗОЛ СОДЕРЖАЩИХ СОЛЕЙ БИС-ИМИДАЗОЛИЯ.....	72
Варанкина В.А., Ильин А.В. ФОСФИН-КАТАЛИЗИРУЕМЫЕ РЕАКЦИИ ПОЛУЧЕНИЯ α -ЗАМЕЩЕННЫХ ЦИННАМАТОВ И АКРИЛАТОВ.....	73
Владимиров Р.Д., Фатыхова А.А., Гимадиев Т.Р., Маджидов Т.И. ИНТЕГРАЦИЯ ХИМИЧЕСКОЙ БАЗЫ ДАННЫХ В РОБОТИЗИРОВАННЫЕ СИСТЕМЫ.....	74
Габитова Э.Р., Агарков А.С., Нефедова А.А., Овсянников А.С., Литвинов И.А., Волошина А.Д., Соловьева С.Е., Антипин И.С. 2-АРИЛМЕТИЛИДЕНОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ТИАЗОЛО[3,2- <i>a</i>]ПИРИМИДИНА: СИНТЕЗ, СУПРАМОЛЕКУЛЯРНАЯ ОРГАНИЗАЦИЯ В КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ ФАЗЕ И ЦИТОТОКСИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ.....	75
Галимов М.Н., Абдуллина Д.Р., Берестова Т.В. СИНТЕЗ И МОДЕЛИРОВАНИЕ СТРУКТУРЫ ХЕЛАТНЫХ РАЗНОЛИГАНДНЫХ АМИНОКИСЛОТНЫХ N,O-КОМПЛЕКСОВ ПЕРЕХОДНЫХ МЕТАЛЛОВ.....	76
Гильмуллин А.Д., Фатыхова А.А., Занков Д.В., Маджидов Т.И. РЕАЛИЗАЦИЯ ГИБРИДНОГО ГЕНЕТИЧЕСКОГО АЛГОРИТМА С ГЛУБОКИМ ОБУЧЕНИЕМ С ПОДКРЕПЛЕНИЕМ ДЛЯ ПРЕДСКАЗАНИЯ ПУТИ СИНТЕЗА МОЛЕКУЛЫ.....	77
Замалетдинова Д.М., Фархутдинова Э.Р., Рахматуллин Р.Р., Бухаров С.В. НОВЫЕ ГИБРИДНЫЕ СОЕДИНЕНИЯ НА ОСНОВЕ <i>para</i> -АМИНОФЕНИЛАРСОНОВОЙ КИСЛОТЫ.....	78
Зиннатов Г.А., Давлетшин Р.Р. ЖИДКОСТНАЯ ЭКСТРАКЦИЯ РЕДКОЗЕМЕЛЬНЫХ МЕТАЛЛОВ ФОСФОРИЛИРОВАННЫМИ ПРОИЗВОДНЫМИ 1,4-ДИАМИНОБУТАНА.....	79
Иванова К.А., Богданов А.В. СИНТЕЗ НОВЫХ АММОНИЕВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ИЗАТИНА, СОДЕРЖАЩИХ КАРБОКСИЛАТНЫЙ ФРАГМЕНТ.....	80
Искандеров Э. ВОДОРАСТВОРИМЫЕ СОЛИ БЕНЗОФУРОКСАНОВ, ЗАМЕЩЕННЫЕ АЛИФАТИЧЕСКИМИ И АРОМАТИЧЕСКИМИ АМИНАМИ.....	81
Кобелева Е.С., Шильникова О.В., Низамов И.С., Низамов И.Д. ПИРИДИНОВЫЕ АЛКАЛОИДЫ В СИНТЕЗЕ СОЛЕЙ ИЗОМЕРНЫХ ДИТИОФОСФОРНЫХ КИСЛОТ.....	82
Кожихов А.А., Агарков А.С., Нефедова А.А., Овсянников А.С., Исламов Д.Р., Соловьева С.Е., Антипин И.С. МЕТАНОЛИЗ 2-АРИЛМЕТИЛИДЕНОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАЗОЛО[3,2- <i>a</i>]ПИРИМИДИНА В УСЛОВИЯХ МИКРОВОЛНОВОЙ АКТИВАЦИИ.....	83
Кузнецов Н.О., Соловьева А.А., Давлетшин Р.Р. СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ФОСФОРИЛИРОВАННЫХ ЧЕТВЕРТИЧНЫХ АММОНИЕВЫХ СОЛЕЙ.....	84
Куприянова А.А., Ивкова Г.А., Мионов В.Ф. РЕАКЦИИ ЦИКЛИЧЕСКИХ P(III)-ПРОИЗВОДНЫХ САЛИЦИЛОВОЙ КИСЛОТЫ С ИМИНАМИ.....	85

Мингажетдинова Д.О., Агарков А.С., Нефедова А.А., Габитова Э.Р., Литвинов И.А., Соловьева С.Е., Антипин И.С. 2-АРИЛГИДРАЗОНОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ТИАЗОЛО[3,2-<i>A</i>]ПИРИМИДИНА: СИНТЕЗ, СТРУКТУРА И РЕАКЦИЯ ВОССТАНОВЛЕНИЯ.....	86
Нафикова А.В., Романов С.Р., Галкина И.В., Бахтиярова Ю.В. БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ ФОСФОНИЕВЫХ СОЛЕЙ, ПОЛУЧЕННЫХ ПРИ РЕАКЦИИ ТРЕТИЧНЫХ ФОСФИНОВ С АМИДАМИ АКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ.....	87
Осогосток А.Р., Давлетшин, Р.Р. СИНТЕЗ И СТРУКТУРА НОВЫХ α-ГИДРОКСИФИНОКСИДОВ..	88
Охиров Ш.М., Ишметова Д.В., Латыпова Э.Р., Вахитов В.А., Талипов Р.Ф. СИНТЕЗ И ЦИТОТОКСИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ОСНОВАНИЯ МАННИХА НА ОСНОВЕ α-ТЕРПЕНИОЛА....	89
Пинигина А.Е., Ахметшин Т.Н., Маджидов Т.И. АВТОМАТИЧЕСКОЕ ИЗВЛЕЧЕНИЕ РЕАКЦИОННЫХ ПРАВИЛ ДЛЯ ИНСТРУМЕНТОВ КОМПЬЮТЕРНОГО ПЛАНИРОВАНИЯ СИНТЕЗА.....	90
Санатов И.Р., Ермакова Е.А., Давлетшин Р.Р., Давлетшина Н.В. СИНТЕЗ И АНТИМИКРОБНАЯ АКТИВНОСТЬ ЛИПОФИЛЬНЫХ ФОСФОРИЛИРОВАННЫХ БЕТАИНОВ	91
Сардарян А.М., Давлетшин Р.Р. СИНТЕЗ ТЕТРАФОСФОРИЛИРОВАННЫХ ДИАМИНОВ	92
Сафарова Л.И., Ивкова Г.А. РЕАКЦИЯ БИС(2,2,3,3-ПЕНТАФТОРПРОПИЛОВОГО) ЭФИРА ПЕНТАФТОР БЕНЗИЛИДЕНМАЛОНОВОЙ КИСЛОТЫ С 2,3-ФЕНИЛ-БЕНЗО[<i>d</i>]-1,3,2-ОКСАЗАФОСФОРИН-4-ОНОМ.....	93
Седов А.Н., Соловьева А.А., Давлетшин Р.Р. СИНТЕЗ И АНТИМИКРОБНАЯ АКТИВНОСТЬ О,О-ДИАЛКИЛ(АРИЛ)ГИДРОКСИМЕТИЛФОСФОНАТОВ.....	94
Сидлярук Н.А., Дикушин Д.А., Смолобочкин А.В., Ризбаева Т.С., Газизов А.С., Бурилов А.Р., Пудовик М.А. СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ 3-АРИЛИДЕН-1-ПИРРОЛИДИНА, ОБЛАДАЮЩИХ ЦИТОТОКСИЧНОСТЬЮ ПО ОТОНОШЕНИЮ К ОПУХОЛЕВЫМ КЛЕТОЧНЫМ ЛИНИЯМ ЧЕЛОВЕКА	95
Тутуев М.С., Якимов В.Ю., Низамов И.С., Низамов И.Д. ЦИНХОНОВЫЕ АЛКАЛОИДЫ В СИНТЕЗЕ ОПТИЧЕСКИ АКТИВНЫХ СОЛЕЙ ДИТИОФОСФОНОВЫХ КИСЛОТ НА ОСНОВЕ РАЦЕМИЧЕСКИХ СПИРТОВ	96
Тухватшин В.С., Талипов Р.Ф. НОВЫЙ ПОДХОД К УВЕЛИЧЕНИЮ СЕЛЕКТИВНОСТИ ОБРАЗОВАНИЯ 4,4-ДИМЕТИЛДИОКСАНА-1,3 – ПОЛУПРОДУКТА В СИНТЕЗЕ ИЗОПРЕНА	97
Фахретдинов Д.Ш., Якупов И.Ш., Латыпова Э.Р., Талипов Р.Ф. КИНЕТИКА ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ АКРИЛОНИТРИЛА И ПИПЕРИЛЕНА В ПРИСУТСТВИИ СИНТЕТИЧЕСКОГО ЦЕОЛИТ CaX	98
Хабибуллина А.М., Раббаниева Э.С., Хабибрахманова А.М., Курбангалиева А.Р. ХИРАЛЬНЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ 2(5<i>n</i>)-ФУРАНОНА, СОДЕРЖАЩИЕ ФРАГМЕНТЫ 2-МЕРКАПТОЭТАНОЛА И МОНОТЕРПЕНОВЫХ СПИРТОВ	99
Чудаков Д.А., Яковлев А.А., Низамов И.С., Низамов И.Д. ХИРАЛЬНЫЕ ПИРИДИНИЙ ДИТИОФОСФОНАТЫ НА ОСНОВЕ МОНОТЕРПЕНОВЫХ СПИРТОВ	100
Шабанов А.А., Салин А.В. ФОСФИН-КАТАЛИЗИРУЕМЫЙ СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ ОКСИНДОЛА С α-МЕТИЛЕНЛАКТОНАМИ.....	101
Шибасва К.О., Романов С.Р., Галкина И.В., Бахтиярова Ю.В. РЕАКЦИИ АЛКИЛИРОВАНИЯ ЭЛЕМЕНТООРГАНИЧЕСКИХ БЕТАИНОВ	102
Шумакова А.Е., Гарифуллина Г.Г., Насретдинова Р.Н. АНТИОКСИДТЕЛЬНОСТЬ АКТИВНОСТЬ ЛИМОННОЙ, АСКОРБИНОВОЙ КИСЛОТ И ИХ СМЕСИ.....	103

Шустиков А.А., Калинин А.А., Гайсин А.И., Шарипова А.В., Шмелев А.Г., Вахонина Т.А., Балакина М.Ю. СИНТЕЗ И СВОЙСТВА КРЕМНИЕВОГО ЭФИРА ХИНОКСАЛИНОВОГО Д-π-А ХРОМОФОРА.....	104
СЕКЦИЯ 4.....	105
Акйол К.И., Макаров Е.Г., Исхакова З.Э., Миронова Д.А., Бурилов В.А., Соловьева С.Е., Антипин И.С. СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ НОВЫХ ВОДОРАСТВОРИМЫХ МОНО- И ПОЛИАМИНОТРИАЗОЛ ПРОИЗВОДНЫХ КАЛИКС[4]АРЕНА СО СВОБОДНЫМИ ГИДРОКСИЛЬНЫМИ ГРУППАМИ.....	106
Ахатова А.Э., Богданов И.М., Бурилов В.А., Гарипова Р.И., Миронова Д.А., Соловьева С.Е., Антипин И.С. СИНТЕЗ И СВОЙСТВА НОВЫХ ТРИАЗОЛСОДЕРЖАЩИХ АММОНИЕВЫХ/ИМИДАЗОЛИЕВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ КАЛИКС[4]АРЕНА	107
Ахметшин Ш.Р., Ларионов Р.А., Зиганшин М.А. СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ И ТЕРМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА НЕКОТОРЫХ АЛИФАТИЧЕСКИХ ДИПЕПТИДОВ.....	108
Биллокова И.М., Миронова Д.А., Макаров Е.Г., Акйол К.И., Бурилов В.А. НОВЫЕ ПОЛИАМИНОТРИАЗОЛСОДЕРЖАЩИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ КАЛИКС[4]АРЕНОВ: АНАЛИЗ ЦИТОТОКСИЧНОСТИ И СВЯЗЫВАНИЕ С ДНК	109
Бурматова А.Е., Горювая А.С., Ханнанов А.А., Кутырева М.П. ФОРМИРОВАНИЕ МАГНИТОАКТИВНЫХ НАНОЧАСТИЦ КОБАЛЬТА В СРЕДЕ СВЕРХРАЗВЕТВЛЁННЫХ ПОЛИЭФИРОПОЛИОЛОВ В УСЛОВИЯХ ONE-POT СИНТЕЗА.....	110
Вавилова А.А., Стойков И.И. КРИСТАЛЛИЧЕСКИЕ ДВУМЕРНЫЕ НАНОСТРУКТУРЫ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНА, ФУНКЦИОНАЛИЗИРОВАННЫХ ПО НИЖНЕМУ ОБОДУ ГЕРАНИЛЬНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ: СИНТЕЗ И ОБРАЗОВАНИЕ СТАБИЛЬНЫХ ПОЛИМОРФОВ	111
Волкова Э.Ф., Стойков И.И. ТИАКАЛИКС[4]АРЕНЫ, СОДЕРЖАЩИЕ ФЕНИЛМОЧЕВИННЫЕ ФРАГМЕНТЫ ПО НИЖНЕМУ ОБОДУ: СИНТЕЗ КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩИЕ СВОЙСТВА ПО ОТНОШЕНИЮ К РЯДУ ОДНОЗАРЯДНЫХ АНИОНОВ.....	112
Володина А.А., Султанова Э.Д., Миронова Д.А., Бурилов В.А., Соловьева С.Е., Антипин И.С. (ТИА)КАЛИКС[4]АРЕНЫ С ФЛУОРЕСЦЕНТНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ: ФОТОФИЗИЧЕСКИЕ И ФОТОКАТАЛИТИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА.....	113
Исхакова З.Э., Макаров Е.Г., Акйол К.И., Бурилов В.А. СИНТЕЗ НОВЫХ МОНО- И ДИАЗИД ПРОИЗВОДНЫХ КАЛИКС[4]АРЕНОВ СО СВОБОДНЫМИ ГИДРОКСИЛЬНЫМИ ГРУППАМИ: СИНТЕЗ И ДАЛЬНЕЙШАЯ МОДИФИКАЦИЯ.....	115
Мансурова Э.Э., Волошина А.Д., Шулаева М.М., Фазлеева Р.Р., Низамеев И.Р., Любина А.П., Кадиров М.К., Зиганшина А.Ю., Семенов В.Э., Антипин И.С. СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИМЕРНЫХ НАНОНОСИТЕЛЕЙ ДЛЯ ДОСТАВКИ ФОТОСЕНСИБИЛИЗАТОРА В РАКОВЫЕ КЛЕТКИ.....	116
Моисеева М.В., Терентьева О.С., Падня П.Л., Стойков И.И. СТЕРЕОИЗОМЕРЫ ТИАКАЛИКСАРЕНА, СОДЕРЖАЩИЕ ИМИДАЗОЛИЕВЫЕ ФРАГМЕНТЫ ПО НИЖНЕМУ ОБОДУ: СИНТЕЗ И СВЯЗЫВАНИЕ АНИОНОВ	117
Назмутдинова В.А., Александрова Ю.И., Шурпик Д.Н., Зеленихин П.В., Стойков И.И. АМИДОАЛКИЛЬНЫЕ АМИНОПРОИЗВОДНЫЕ ПИЛЛАР[5]АРЕНА КАК АНТИБИОПЛЕНОЧНЫЕ АГЕНТЫ	118
Овчинников Д.Г., Мостовая О.А., Стойков И.И. ВЛИЯНИЕ МАКРОЦИКЛИЧЕСКОГО ЯДРА НА ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПАМАМ-ДЕНДРИМЕРОВ С ЛИЗОЦИМОМ.....	119

Паскевич И.В., Гафиатуллин Б.Х., Бурилов В.А., Соловьева С.Е., Антипин И.С. СИНТЕЗ НОВЫХ ПРЕКУР СОВРОВ ННС КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ <i>П-ТРЕТ</i> -БУТИЛ(ТИА)КАЛИКС[4]АРЕНА	120
Пергат А.В., Александрова Ю.И., Шурпик Д.Н., Стойков И.И. ПОЛУЧЕНИЕ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИЛЛАР[5]АРЕНА, СОДЕРЖАЩИХ ЭТАНТИОЛЬНЫЕ ФРАГМЕНТЫ И ТРЕТИЧНЫЕ АМИНОГРУППЫ	121
Прытков В.А., Осипова А.М., Кутырева М.П. ФОРМИРОВАНИЕ НАНОЧАСТИЦ СЕРЕБРА В СРЕДЕ СВЕРХРАЗВЕТВЛЕННОГО ПОЛИЭФИРОПОЛИМАЛЕАТА.....	122
Пушкарёва Е.А., Бурилов В.А., Богданов И.М., Миронова Д.А., Султанова Э.Д., Соловьева С.Е., Антипин И.С. СИНТЕЗ НОВЫХ ТРИАЗОЛСОДЕРЖАЩИХ ПО ВЕРХНЕМУ ОБОДУ КАЛИКС[4]АРЕНОВ В СТЕРЕОИЗОМЕРНОЙ ФОРМЕ « <i>КОНУС</i> ».....	123
Россова А.А., Муравьева Д.В., Герасимов А.В., Кутырева М.П. СТАБИЛИЗАЦИЯ НАНОЧАСТИЦ БОРИДА КОБАЛЬТА ПРОИЗВОДНЫМИ СВЕРХРАЗВЕТВЛЕННЫХ ПОЛИЭФИРОВ.....	124
Такунцева Д.К., Султанаев В.Р., Якимова Л.С., Стойков И.И. ПРОИЗВОДНЫЕ ПИЛЛАР[5]АРЕНА С АМИНОКИСЛОТНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ: ОБРАЗОВАНИЕ НАНОРАЗМЕРНЫХ АССОЦИАТОВ В ПРИСУТСТВИИ СЫВОРОТОЧНОГО АЛЬБУМИНА	125
Федонин А.П., Ившин К.А., Метлушка К.Е., Латыпов Ш.К., Катаева О.Н. ИЗУЧЕНИЕ ЗАВИСИМОСТИ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНОЙ ОРГАНИЗАЦИИ ОТ ТОПОЛОГИИ И РАЗМЕРОВ КОМПОНЕНТОВ КОМПЛЕКСОВ С ПЕРЕНОСОМ ЗАРЯДА НА ОСНОВЕ СЛАБЫХ ДОНОРНЫХ МОЛЕКУЛ И АКЦЕПТОРОВ РЯДА ФТОРПРОИЗВОДНЫХ TSNQ.....	126
Федосеева А.А., Султанова Э.Д., Гафиатуллин Б.Х., Бурилов В.А., Антипин И.С. КАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ НОВЫХ ПАЛЛАДИЕВЫХ ННС-КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНОВ В РЕАКЦИЯХ КРОСС-СОЧЕТАНИЯ И ВОССТАНОВЛЕНИЯ.....	127
Чернышева С.Д., Федоренко С.В., Бочкова О.Д. СИЛИКАТНЫЕ НАНОЧАСТИЦЫ НА ОСНОВЕ КОМПЛЕКСОВ MN(II) КАК ПОТЕНЦИАЛЬНЫЕ КОНТРАСТНЫЕ АГЕНТЫ ДЛЯ МРТ.....	128
Чурбанова Е.С., Габдрахманова Ф.Б., Халифа М.А.М., Клешина С.Р., Соловьева С.Е., Антипин И.С. НОВЫЕ АЗОПРОИЗВОДНЫЕ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНА И ИХ КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ С РОДАМИНОВЫМИ КРАСИТЕЛЯМИ.....	129
Шайхутдинова З.М., Паширова Т.Н., Мансурова М.Н., Казакова Р.Р., Богданов А.В., Татаринев Д.А., Массон П. ПОЛИМЕРСОМЫ С ИНКАПСУЛИРОВАННОЙ ФОСФОТРИЭСТЕРАЗОЙ-ТЕРАПЕВТИЧЕСКИЕ НАНОРЕАКТОРЫ ДЛЯ ДЕТОКСИКАЦИИ <i>IN VIVO</i>	130
Шибасева К.С., Стойков И.И. ПРОИЗВОДНЫЕ <i>П-ТРЕТ</i> -БУТИЛТИАКАЛИКС[4]АРЕНА С А-АМИНОФОС ФОНАТНЫМИ ФРАГМЕНТАМИ НА НИЖНЕМ ОБОДЕ: СИНТЕЗ И СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫЕ СВОЙСТВА.....	131
Шилова И.В., Стойков И.И. СИНТЕЗ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНОВ, СОДЕРЖАЩИХ АМИДНЫЕ, ПЕРВИЧНЫЕ АМИНОГРУППЫ И СЛОЖНОЭФИРНЫЕ ФРАГМЕНТЫ.....	132
Шутилов И.Д., Стрельникова Ю.В., Овсянников А.С., Исламов Д.Р., Пятаев А.В., Дороватовский П.В., Лазаренко В.А., Литвинов И.А., Губайдуллин А.Т., Соловьева С.Е., Антипин И.С. ЛИГАНДЫ САЛЕНОВОГО ТИПА НА ОСНОВЕ ПРОИЗВОДНЫХ (ТИА)КАЛИКС[4]АРЕНОВ С О-ВАНИЛИНОВЫМИ ФРАГМЕНТАМИ В КАЧЕСТВЕ СТОИТЕЛЬНЫХ БЛОКОВ ДЛЯ КОНСТРУИРОВАНИ МАГНИТОАКТИВНЫХ КОМПЛЕКСОВ	133
СЕКЦИЯ 5.....	134

Акчурина А.С., Азметов Т.Р., Сапожников С.В., Штырлин Н.В., Штырлин Ю.Г. СИНТЕЗ СОЕДИНЕНИЙ ОКСАЗОЛИДИНОВОГО РЯДА, СОДЕРЖАЩИХ ФРАГМЕНТЫ ПИРИДОКСИНА	135
Белова М.А., Стрельник А.Д., Фафанова Е.М., Штырлин Ю.Г. СИНТЕЗ И АНТИГЛИКИРУЮЩИЕ СВОЙСТВА АЗОПРОИЗВОДНЫХ ПИРИДОКСИНА	136
Бызов М.А., Романов С.Р., Бахтиярова Ю.В. СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОТИВОМИКРОБНЫХ СОЛЕЙ МЕТИЛТРИФЕНИЛФОСФОНИЯ	137
Васильева О.С., Маланьева А.Г., Пугачев М.В., Агафонова М.Н., Штырлин Ю.Г. ИССЛЕДОВАНИЕ АНАЛЬГЕТИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ И ТОКСИЧНОСТИ <i>IN VIVO</i> ТРИС-ЭФИРНОГО ПРОИЗВОДНОГО ПИРИДОКСИНА И КЕТОРОЛАКА	138
Вендин М. В. МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНГИБИРОВАНИЯ Р-ГЛИКОПРОТЕИНА.....	139
Гребенников Я.Н., Димухаметов М.Н., Миронов В.Ф. СИНТЕЗ И ОЦЕНКА БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ 4-(2-ГИДРОКСИПРОПИЛ)АМИНО) БЕНЗОЛСУЛЬФОНАМИДОВ, СОДЕРЖАЩИХ 3-ФОСФОНАТНЫЙ, 3-ФОСФИНАТНЫЙ ИЛИ 3-ФОСФИНОКСИДНЫЙ ФРАГМЕНТ.....	140
Едиге А. Е. ПРИМЕНЕНИЕ ИСКУССТВЕННЫХ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ В МОДЕЛИРОВАНИИ ИНГИБИРУЮЩЕЙ СПОСОБНОСТИ МАЛЫХ МОЛЕКУЛ ПО ОТНОШЕНИЮ К ЦИТОХРОМАМ P450.....	141
Ерашов И.А., Идрисова Л.Р., Немтарев А.В., Миронов В.Ф. 30-АЗИДОБЕТУЛИН В РЕАКЦИИ Cu-КАТАЛИЗИРУЕМОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ.....	142
Исламов Д.И., Хайруллина В.Р., Мартынова Ю.З., Максимов Л.С. НОВЫЕ ИНГИБИТОРЫ ИЗОФОРМ ЦИКЛООКСИГЕНАЗ НА ОСНОВЕ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРАЗОЛА	143
Кузванова П.Р., Богданова Л.Р., Седов И.А. ВЛИЯНИЕ КАТИОНОВ МЕТАЛЛОВ НА ФИБРИЛЛООБРАЗОВАНИЕ α-ЛАКТАЛЬБУМИНА.....	144
Ли Ц., Хайбрахманова Д.Р., Седов И.А. ФИБРИЛЛООБРАЗОВАНИЕ АЛЬБУМИНА В ПРИСУТСТВИИ ЛИГАНДОВ С РАЗЛИЧНОЙ АФФИННОСТЬЮ.....	145
Малянова А.В., Цапаева О.В., Немтарев А.В., Миронов В.Ф. НОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ СУЛЬФАНИЛАМИДА С ПОТЕНЦИАЛЬНЫМ ПРОТИВООПУХОЛЕВЫМ И АНТИМИКРОБНЫМ ДЕЙСТВИЕМ.....	146
Муканов А.Р. ПРЕДСКАЗАНИЕ ПРОДУКТОВ РЕАКЦИЙ НА ОСНОВЕ КОНДЕНСИРОВАННОГО ГРАФА РЕАКЦИЙ С ПОМОЩЬЮ НЕЙРОННЫХ СЕТЕЙ	147
Платонова Е.А., Хазиев Р.М., Агафонова М.Н., Казакова Р.Р., Штырлин Ю.Г. СИНТЕЗ ГИБРИДНЫХ МОЛЕКУЛ НА ОСНОВЕ ПИРИДОКСИНА И АДЕНОЗИНА	148
Салахетдинова А.Р., Салин А.В. КИНЕТИКА И МЕХАНИЗМ РЕАКЦИИ ТРИФЕНИЛФОСФИНА С МЕТИЛВИНИЛКЕТОНОМ	149
Симдянова А.В. СПОСОБ ВОСПРОИЗВОДИМОГО ПРИГОТОВЛЕНИЯ МЕТАСТАБИЛЬНОГО ПОЛИМОРФА ФЕНИЛБУТАЗОНА ТВЕРДОФАЗНЫМ ЗАМЕЩЕНИЕМ.....	150
Сулейманов Э.Г., Шулаева М.М., Зуева И.В., Петров К.А., Семёнов В.Э. СИНТЕЗ И АНТИХОЛИНЭСТЕРАЗНЫЕ СВОЙСТВА НОВЫХ МЕТИЛИРОВАННЫХ ПРОИЗВОДНЫХ УРАЦИЛА	151
Султанова Ж.Н., Паширова Т.Н., Шайхутдинова З.М., Арсеньев М.В., Бухаров С.В., Юсупов А.Н., Богданов А.В., Массон П. АЛКИЛАММОНИЕВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ПИРОКАТЕХИНА - ОБРАТИМЫЕ ИНГИБИТОРЫ БУТИРИЛХОЛИНЭСТЕРАЗЫ.....	152

Талашманова С. М., Осельская В.Ю., Гатиатулин А. К. ВЛИЯНИЕ ГИДРАТАЦИИ НАТИВНЫХ ЦИКЛОДЕКСТРИНОВ НА ИНКАПСУЛЯЦИЮ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ВЕЩЕСТВ.....	153
Титов Е.А., Немтарев А.В., Миронов В.Ф. ЭФФЕКТИВНЫЙ СИНТЕЗ ТЕРПЕНИЛГЛИЦИДИЛОВЫХ ЭФИРОВ.....	154
Уразманова К.Р., Хазиев Р.М., Штырлин Ю.Г. СИНТЕЗ ПИРИДОКСИНСОДЕРЖАЩЕЙ АМИНОКИСЛОТЫ.....	155
Урубкова У.П., Шемахина М.Э., Немтарев А.В., Миронов В.Ф. АЦИКЛИЧЕСКИЕ ФОСФОРСОДЕРЖАЩИЕ ПРОИЗВОДНЫЕ β-ИОНОНА.....	156
Федоров Д.А., Мартынова Ю.З., Хайруллина В.Р., Насретдинова Р.Н. QSAR-МОДЕЛИРОВАНИЕ ИНГИБИТОРОВ ЗС-ПОДОБНОЙ ПРОТЕАЗЫ SARS-COV-2 В РЯДУ НЕКОТОРЫХ ГЕТЕРОЦИКЛИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ.....	157
Хамзин Т.А., Пугачев М.В., Агафонова М.Н., Бондарь О.В., Штырлин Ю.Г. ВЗАИМОСВЯЗЬ "СТРУКТУРА - ПРОТИВООПУХОЛЕВАЯ АКТИВНОСТЬ" ПИРИДОКСИНСОДЕРЖАЩИХ СТРУКТУРНЫХ АНАЛОГОВ САХАРУМОЗИДА-Б.....	158
Шалина А.А., Немтарев А.В., Миронов В.Ф. ФРИДЕЛИН ИЗ ЛИСТЬЕВ КЛЕНА ЯСЕНЕЛИСТНОГО (<i>Acer negundo L.</i>).....	159
Шарафитдинова Л.И., Хайруллина В.Р., Мартынова Ю.З. МОЛЕКУЛЯРНЫЙ ДОКИНГ ПРОИЗВОДНЫХ 3,4-ДИГИДРОПИРИМИДИН-2-ТИОНА В АКТИВНЫЙ ЦЕНТР ТИМИДИЛАТКИНАЗЫ.....	160
Шинкарёва А.М., Немтарев А.В., Миронов В.Ф. ЧЕТВЕРТИЧНЫЕ ФОСФОНИЕВЫЕ И АРСОНИЕВЫЕ СОЛИ НА ОСНОВЕ 5-ГИДРОКСИ-1,4-НАФТОХИНОНА.....	161
Шукурова М. Ф. ХИМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПЕКТИНА ВЫДЕЛЕННОГО ИЗ ПРОМЫШЛЕННЫХ ОТХОДОВ.....	162
Яндимирова А.С., Сапожников С.В., Штырлин Н.В., Булатова Е.С., Агафонова М.Н., Вафина Р.М., Клинова Е.Н., Штырлин Ю.Г. СИНТЕЗ И БИОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ЧЕТВЕРТИЧНЫХ АММОНИЕВЫХ СОЕДИНЕНИЙ НА ОСНОВЕ ЭФИРОВ ПЕНТАЭРИТРИТА И ПИРИДОКСИНА.....	163
СЕКЦИЯ 6.....	164
Алешин Р.П. ИЗУЧЕНИЕ МЕХАНИЗМА И КИНЕТИКИ НЕКАТАЛИТИЧЕСКОЙ РЕАКЦИИ АЗИД-АЛКИНОВОГО ЦИКЛОПРИСОЕДИНЕНИЯ.....	165
Аслонова Ф.С., Ганиев Б.Ш., Мардонов У.М., Холикова Г.К. СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ ЦИАНУРОВОЙ КИСЛОТЫ СПЕЦИАЛЬНОГО НАЗНАЧЕНИЯ И ИЗУЧЕНИЕ ИХ СВОЙСТВ.....	166
Бабкин Р.А., Саматов А.А., Нагриманов Р.Н. ПРИМЕНЕНИЕ МЕТОДА КАЛОРИМЕТРИИ РАСТВОРЕНИЯ ДЛЯ ОПРЕДЕЛЕНИЯ ЭНТАЛЬПИЙ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ ТЕРПЕНОИДОВ ПРИ 298 К.....	167
Балахонцев И.С. РАСЧЕТ ЭНТАЛЬПИЙ СУБЛИМАЦИИ АРОМАТИЧЕСКИХ СОЕДИНЕНИЙ, НЕ СПОСОБНЫХ К МЕЖМОЛЕКУЛЯРНОМУ ВОДОРОДНОМУ СВЯЗЫВАНИЮ, В ШИРОКОМ ДИАПАЗОНЕ ТЕМПЕРАТУР.....	168
Гайнутдинов Б.Р., Хайбрахманова Д.Р., Седов И.А. ФИБРИЛЛООБРАЗОВАНИЕ ЛИЗОЦИМА В ПРИСУТСТВИИ АЛЬГИНАТА НАТРИЯ.....	169
Гатауллина Р.М., Спиридонова М.И., Солодов А.Н. ВЛИЯНИЕ ОРИЕНТАЦИИ ЛИСТОВ ОКСИДА ГРАФЕНА В ЭПОКСИДНОМ ПОЛИМЕРЕ НА ЕГО ТРИБОЛОГИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ.....	170

Зимин К.С., Солодов А.Н., Елисеева Т.Н., Амирова Л.М. 3D-ПЕЧАТЬ ВЫСОКОСТАБИЛЬНОЙ ПОЛИМЕРНОЙ КОМПОЗИЦИИ С ПЕРОВСКИТНЫМИ КВАНТОВЫМИ ТОЧКАМИ.....	171
Ларионов И.С., Балькаев Д.А., Зайнулин Р.Р., Амирова Л.М. 3D-ПЕЧАТЬ СТЕКЛОНАПОЛНЕННЫМ ПОЛИПРОПИЛЕНОМ НА ТЕРМОПЛАСТИЧНОМ ЛИСТЕ	172
Зайцева В.Е., Лапук С.Е., Герасимов А.В. КИНЕТИКА СТЕКЛОВАНИЯ И ФИЗИЧЕСКОЕ СТАРЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ИОННЫХ ЖИДКОСТЕЙ	173
Италмасов А.Р., Нагриманов Р.Н. РАЗРАБОТКА АДДИТИВНОЙ СХЕМЫ РАСЧЕТА ЭНТАЛЬПИИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ СУЛЬФАНИЛАМИДОВ ПРИ 298 К	174
Калиров А.Ф., Ердякова А.В., Ханнанов А.А., Кутырева М.П. СВЕРХРАЗВЕТВЛЕННЫЕ ПОЛИЭФИРЫ И НЕИОНОГЕННЫЕ ПАВ НА ОСНОВЕ ИХ ДЕНДРОНОВ ДЛЯ ИНКАПСУЛЯЦИИ ЛЕКАРСТВЕННЫХ ПРЕПАРАТОВ.....	175
Красильникова Я.О., Герасимов А.В., Зубайдуллина Л.С. АМОРФНЫЕ ТВЕРДЫЕ ДИСПЕРСИИ ФЛУТАМИДА С ПОЛИВИНИЛПИРРОЛИДОМ.....	176
Лапук С.Е., Герасимов А.В. КИНЕТИКА КРИСТАЛЛИЗАЦИИ И СТЕКЛООБРАЗУЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ БЫСТРО КРИСТАЛЛИЗУЮЩИХСЯ СУЛЬФАНИЛАМИДОВ	177
Лебедева П.В., Фоминых О.Д., Балакина М.Ю. МОЛЕКУЛЯРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ПММА С НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКИМИ ДИПОЛЬНЫМИ ХРОМОФОРАМИ.....	178
Лифанов А.Д., Улитин Н.В., Шадрин Г.Р. ПРОГНОЗИРОВАНИЕ КИСЛОТНОГО И ОСНОВНОГО ПАРАМЕТРОВ СВОБОДНОЙ ПОВЕРХНОСТНОЙ ЭНЕРГИИ ПОЛИМЕРОВ.....	179
Миргазиева Э.Р. ОСОБЕННОСТИ ЦИКЛИЗАЦИИ ДИПЕПТИДОВ L-АЛАНИЛ-L-ЛЕЙЦИН И L-ЛЕЙЦИЛ-L-АЛАНИН В УСЛОВИЯХ ОГРАНИЧЕНИЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ.....	180
Олебердиева А., Борецкая А.В., Ламберов А.А. ИЗМЕНЕНИЕ ТЕКСТУРНЫХ ХАРАКТЕРИСТИК КОРУНДА ОТ ФАЗОВОГО СОСТАВА ИСХОДНОГО ГИДРОКСИДА АЛЮМИНИЯ.....	181
Сафарова Л.И., Ивкова Г.А. РЕАКЦИЯ БИС(2,2,3,3-ПЕНТАФТОРПРОПИЛОВОГО) ЭФИРА ПЕНТАФТОРБЕНЗИЛИДЕНМАЛОНОВОЙ КИСЛОТЫ С 2,3-ФЕНИЛ-БЕНЗО[<i>d</i>]-1,3,2-ОКСАЗАФОСФОРИН-4-ОНОМ	182
Серебрякова Е.Д., Кузнецова А.А., Верещагина Я.А. N-АЛКИЛ-N-(ДИФЕНИЛФОСФОРИЛ МЕТИЛ)ДИФЕНИЛ-ФОСФОРИЛАЦЕТАМИДЫ: ИК СПЕКТРОСКОПИЯ И DFT РАСЧЕТЫ	183
Сибгатуллина Р.Л., Ибрагимова А.Р., Нагриманов Р.Н. СОВЕРШЕНСТВОВАНИЕ СООТНОШЕНИЯ ТИПА «СТРУКТУРА-СВОЙСТВО» ДЛЯ ОЦЕНКИ ЭНТАЛЬПИЙ СОЛЬВАТАЦИИ.....	184
Федосеева А.А., Султанова Э.Д., Гафиятуллин Б.Х., Бурилов В.А., Антипин И.С. КАТАЛИТИЧЕСКАЯ АКТИВНОСТЬ НОВЫХ ПАЛЛАДИЕВЫХ ННС-КОМПЛЕКСОВ НА ОСНОВЕ ТИАКАЛИКС[4]АРЕНОВ В РЕАКЦИЯХ КРОСС-СОЧЕТАНИЯ И ВОССТАНОВЛЕНИЯ.....	185
Хабибуллина Д.С., Ибрагимова А.Р., Нагриманов Р.Н. ТЕРМОХИМИЯ МЕЖМОЛЕКУЛЯРНЫХ ВЗАИМОДЕЙСТВИЙ АЛИФАТИЧЕСКИХ СПИРТОВ В 2-МЕТИЛТЕТРАГИДРОФУРАНЕ	186
Хафизова А.И., Галкина И.В. СИНТЕЗ И ЛЮМИНИСЦЕНЦИЯ КОМПЛЕКСОВ ЛАНТАНОИДОВ С ФОСФОСОДЕРЖАЩИМИ ЛИГАНДАМИ.....	187
Шарипова Г.Ш., Мардонов У.М., Муратова М.Н., Турсунова И.Н., Ганиев Б.Ш., Аvezов К.Г., Аслонова Ф.С. ИЗУЧЕНИЕ МНОГОФУНКЦИОНАЛЬНЫХ НЕОРГАНИЧЕСКИХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ ФОСФОРИТА	188
Эминов А.А., Зверева Э.Р. ИССЛЕДОВАНИЕ СОСТАВА НЕФТЯНЫХ ШЛАМОВ	189

СЕКЦИЯ 7.....	190
Агзамова И.И., Фазылова С.Р. ОСОБЕННОСТЬ ТЕХНОЛОГИИ СПИРАЛЬНОГО ОБУЧЕНИЯ БУДУЩИХ УЧИТЕЛЕЙ ХИМИИ.....	191
Аллабердиев О., Космодемьянская С.С. МЕТОДИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ОРГАНИЗАЦИИ ЭКСКУРСИЙ В ПРОФОРИЕНТАЦИОННОЙ РАБОТЕ УЧИТЕЛЯ ХИМИИ	192
Байрамназарова А., Гайфуллина А.З. АНАЛИЗ РЕАЛИЗАЦИИ МЕЖПРЕДМЕТНЫХ СВЯЗЕЙ В ПРЕПОДАВАНИИ ХИМИИ В КАЧЕСТВЕ СРЕДСТВА ПОВЫШЕНИЯ КАЧЕСТВА ЗНАНИЙ ОБУЧАЮЩИХСЯ.....	193
Валова А.А., Космодемьянская С.С. ОПОРНЫЙ КОНСПЕКТ КАК СРЕДСТВО ОЦЕНИВАНИЯ УРОВНЯ СФОРМИРОВАННОСТИ ПРЕДМЕТНЫХ РЕЗУЛЬТАТОВ ПО ХИМИИ	194
Гарягдыев Ш.А., Гайфуллина А.З. ПРОЕКТНАЯ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ КАК ЭФФЕКТИВНАЯ ФОРМА ОРГАНИЗАЦИИ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОГО ПРОЦЕССА.....	195
Дангатарова У., Космодемьянская С.С. МЕТОДИКА ОРГАНИЗАЦИИ ЛАБОРАТОРНОГО ХИМИЧЕСКОГО ПРАКТИКУМА В УЧЕБНОЙ РАБОТЕ	196
Джумаева Х., Камалеева А.Р. ОСОБЕННОСТИ СОВРЕМЕННОЙ МЕТОДИКИ ПРИМЕНЕНИЯ КОМПЬЮТЕРА В ПРОЦЕССЕ ОБУЧЕНИЯ ХИМИИ В СРЕДНЕЙ ШКОЛЕ	197
Комеков А.Н., Гайфуллина А.З. ВЛИЯНИЕ ЦИФРОВОЙ СРЕДЫ НА ФОРМИРОВАНИЕ НАВЫКОВ И КОМПЕТЕНЦИЙ ОБУЧАЮЩИХСЯ ПО ХИМИИ	198
Кузекенова А.А., Камалеева А.Р. ФОРМИРОВАНИЕ САМООБРАЗОВАТЕЛЬНЫХ УМЕНИЙ И НАВЫКОВ ОБУЧАЮЩИХСЯ НА УРОКАХ ХИМИИ.....	199
Лебедева К.В., Космодемьянская С. С. ОРГАНИЗАЦИЯ ЭКОЛОГИЧЕСКИ НАПРАВЛЕННОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ СОВРЕМЕННОГО УЧИТЕЛЯ ХИМИИ	200
Мельничук О.А., Космодемьянская С.С. МЕТОДИЧЕСКИЕ ОСОБЕННОСТИ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО ХАРАКТЕРА ХИМИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА	201
Овезова С.Ш., Ямбушев Ф.Д. ЦИФРОВИЗАЦИЯ СРЕДСТВ УЧЕТА, КОНТРОЛЯ И ОЦЕНКИ ЗНАНИЙ ПО ХИМИИ.....	202
Оразгурбанова А.Д., Космодемьянская С.С. МОТИВАЦИЯ ОБУЧАЮЩИХСЯ КАК РЕЗУЛЬТАТ ПРИМЕНЕНИЯ ЭЛЕМЕНТОВ ИГРОВЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В ХИМИЧЕСКОМ ОБРАЗОВАНИИ...	203
Оразова О., Халикова Ф.Д. АНАЛИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ РАБОТЫ ПО ПРИМЕНЕНИЮ МУЗЕЙНОЙ ПЕДАГОГИКИ В ОБУЧЕНИИ ХИМИИ	204
Рейимбаева Д., Космодемьянская С.С. ИНТЕРАКТИВНЫЕ МЕТОДЫ ДИСТАНЦИОННОГО ОБУЧЕНИЯ ХИМИИ.....	205
Розметова Ш.Х., Мельникова Г.Ф. ПОВЫШЕНИЕ МОТИВАЦИИ К УЧЕБНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ОБУЧАЮЩИХСЯ ДЕВЯТЫХ КЛАССОВ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ХИМИИ.....	206
Сагтарова Г.А., Космодемьянская С.С. РЕФЛЕКСИЯ КАК МЕХАНИЗМ ФОРМИРОВАНИЯ КРИТИЧЕСКОГО МЫШЛЕНИЯ НА ДИСТАНЦИОННЫХ УРОКАХ ХИМИИ	207
Текаева О.О., Сагитова Р.Н. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА ОБУЧАЮЩИХСЯ В ЦИФРОВОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ СРЕДЕ	208
Тораева Х., Космодемьянская С.С. ОРГАНИЗАЦИЯ ХИМИЧЕСКОГО ПРАКТИКУМА ВО ВНЕКЛАССНОЙ РАБОТЕ	209
Фазылова С.Р., Агзамова И.И. ОСОБЕННОСТЬ ТЕХНОЛОГИИ КОНТЕКСТНОГО ОБУЧЕНИЯ БУДУЩИХ УЧИТЕЛЕЙ ХИМИИ.....	210

Чарыева Г., Халикова Ф.Д. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ВНЕУРОЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ПО ХИМИИ ДЛЯ ОРГАНИЗАЦИИ УЧЕБНО-ВОСПИТАТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ С ОБУЧАЮЩИМИСЯ СТАРШИХ КЛАССОВ В ШКОЛЕ.....	211
Чотаева О.Б., Ямбушев Ф.Д. АНАЛИЗ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ МЕТОДОВ, ПРИЕМОВ И ТЕХНОЛОГИЙ ПО ФОРМИРОВАНИЮ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ КОМПЕТЕНЦИЙ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ХИМИИ.	212
Шамырадова О., Халикова Ф.Д. ИГРОВЫЕ ТЕХНОЛОГИИ, ИСПОЛЬЗУЕМЫЕ ПРИ ИЗУЧЕНИИ ХИМИИ У ОБУЧАЮЩИХСЯ ПРЕДПРОФИЛЬНЫХ КЛАССОВ.....	213
Шульга В.А., Космодемьянская С.С. ИССЛЕДОВАНИЯ ЭФФЕКТИВНОСТИ ПРИМЕНЕНИЯ АДАПТИВНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ОБУЧЕНИЯ ХИМИИ СРЕДНЕГО ОБРАЗОВАНИЯ	214
Эсенова О.Я., Мельникова Г.Ф. АНАЛИЗ ОРГАНИЗАЦИИ ВНЕУРОЧНОЙ ДЕЯТЕЛЬНОСТИ ПО ХИМИИ В УСЛОВИЯХ ЦИФРОВОЙ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЙ СРЕДЫ	215