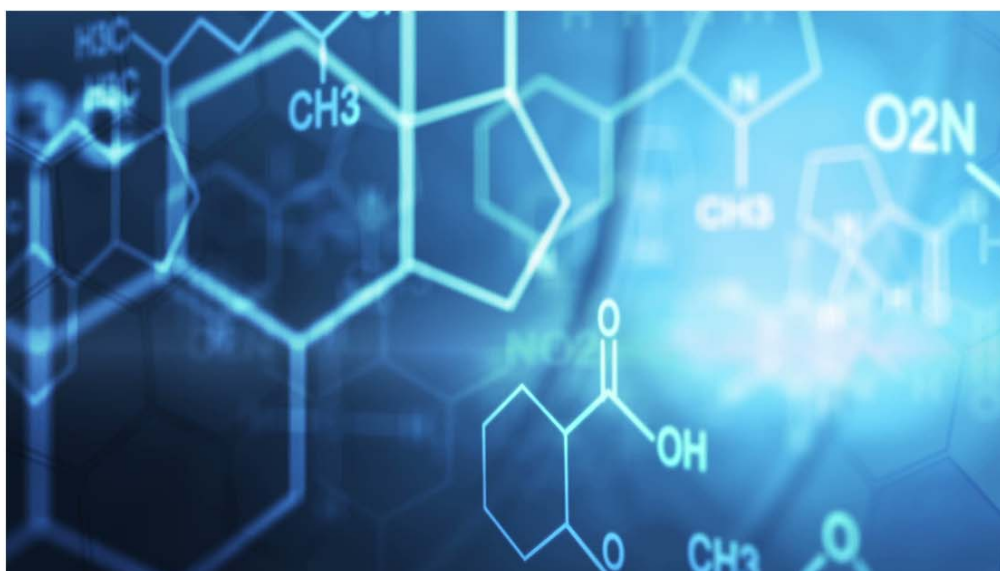


**III International  
scientific-practical  
conference**

**“COORDINATION COMPOUNDS:  
SYNTHESIS AND PROPERTIES”**



**III Міжнародна  
науково-практична  
конференція**

**«КООРДИНАЦІЙНІ СПОЛУКИ:  
СИНТЕЗ І ВЛАСТИВОСТІ»**

Ніжин  
6-7 жовтня 2016 року

Ministry of Education and Science of Ukraine  
Nizhyn Gogol State University  
Yuriy Fedkovich Chernivtsi National University  
Ternopil Volodymyr Hnatiuk National Pedagogical University  
Chernihiv T. Shevchenko National Pedagogical University  
National Pedagogical Dragomanov University  
Institute of bioorganic chemistry and petrochemistry  
of National Academy of Science of Ukraine  
Ministry of Education of Belarus  
Gomel Fr. Skaryna State University  
Ministry of Education of Georgia  
Iakob Gogebashvili Telavi State University  
Ministry of Education and Science of Poland  
Tadeusz Kosciuszko Cracow University of Technology

*III INTERNATIONAL SCIENTIFIC-PRACTICAL CONFERENCE*

**"Coordination compounds:  
synthesis and properties"**

*(In memory of of Corresponding Member of the NAS of Ukraine,  
professor Kovtun H.O.)*

October 6–7, 2016

Abstracts

Nizhyn – 2016

Міністерство освіти і науки України  
Ніжинський державний університет імені Миколи Гоголя  
Чернівецький національний університет імені Ю.Федьковича  
Тернопільський національний педагогічний університет імені В. Гнатюка  
Чернігівський національний педагогічний університет імені Т.Г. Шевченка  
Національний педагогічний університет імені М.П. Драгоманова  
Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України  
Міністерство освіти республіки Білорусь  
Гомельський державний університет імені Франциска Скорини  
Міністерство освіти Грузії  
Телавський державний університет імені Гогебашвілі Арчил Джорджадзе  
Міністерство науки та вищої освіти Польщі  
Краківська політехніка ім. Тадеуша Костюшка

*III МІЖНАРОДНА НАУКОВО-ПРАКТИЧНА КОНФЕРЕНЦІЯ*

**"Координаційні сполуки:  
синтез і властивості"**

*(присвячується пам'яті члена-кореспондента НАН України,  
професора Г.О.Ковтуна)*

6–7 жовтня 2016 року

Тези доповідей

Ніжин – 2016



Министерство образования и науки Украины  
Нежинский государственный университет имени Николая Гоголя  
Черновицкий национальный университет имени Ю. Федьковича  
Тернопольский национальный педагогический университет имени В. Гнатюка  
Черниговский национальный педагогический университет имени Т. Г. Шевченко  
Национальный педагогический университет имени М. П. Драгоманова  
Институт биоорганической химии и нефтехимии  
Институт органической химии НАН Украины  
Министерство образования республики Беларусь  
Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины  
Министерство образования Грузии  
Телавский государственный университет имени Гогебашвили А.Д.  
Министерство науки и высшего образования Польши  
Краковская политехника им. Тадеуша Костюшко

### *III МЕЖДУНАРОДНАЯ НАУЧНО-ПРАКТИЧЕСКАЯ КОНФЕРЕНЦИЯ*

## **"Координационные соединения: синтез и свойства"**

*(посвящается памяти члена-корреспондента НАН Украины,  
профессора Г.А.Ковтуна)*

6–7 октября 2016 года

Тезисы докладов

Нежин – 2016

УДК 546–3:54.057

К55

Рекомендовано Вченою радою Ніжинського державного  
університету імені Миколи Гоголя  
(Протокол № 3 від 29.09.2016 р.)

**Редакційна колегія :**

д.х.н., проф. В. В. Суховєєв (*головний редактор*), д.х.н., проф. А. І. Вовк,  
д.х.н., проф. Б. Д. Гришук, д.фарм.н., д.фарм.н., проф. А. М. Демченко,  
к.х.н., доц. Н. І. Дроздова, д.х.н, д.б.н., проф. І.В. Калінін,  
д.т.н., проф. І. М. Курмакова, д.х.н., проф. О. С. Лявинець,  
к.х.н., доц. О. В. Москаленко, к.х.н., доц. С. А. Циганков,

**Координаційні сполуки: синтез і властивості** : тези доповідей III Міжнародної науково-  
К55 практичної конференції (Ніжин, 6–7 жовтня 2016 р.) / за заг. ред. В. В. Суховєєва. –  
Ніжин : НДУ ім. Миколи Гоголя, 2016. – 79 с.  
ISBN 978-617-527-149-0

Збірник містить тези доповідей III Міжнародної науково-практичної конференції "Ко-  
ординаційні сполуки: синтез і властивості" (м. Ніжин, 6–7 жовтня 2016 року).

Для фахівців, що працюють у галузі біоорганічної хімії та нафтохімії у наукових закла-  
дах та вищій школі.

У текстах тез доповідей, опублікованих у цьому збірнику, збережено авторський стиль  
у поданні матеріалу.

Конференція присвячується пам'яті професора кафедри хімії,  
члена-кореспондента НАН України Г. О. Ковтуна

**УДК 546–3:54.057**

ISBN 978-617-527-149-0

© НДУ ім. М.Гоголя, 2016,

© автори тез, 2016

© редакційна колегія, 2016

## НАУКОВИЙ КОМІТЕТ КОНФЕРЕНЦІЇ:

Андрій Вовк	Голова, Директор Інституту біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України, член-кореспондент НАН України, професор
Валерій Кухар	співголова, почесний директор ІБОНХ НАН України, академік НАН України, професор
Володимир Броварець	Заступник директора Інституту біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України, професор
Володимир Кашковський	Заступник директора Інституту біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України
Леонід Шкарапута	Завідувач відділу Інституту біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України, професор
Григорій Поп	Завідувач відділу Інституту біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України, професор
Анатолій Демченко	Завідувач відділу ДУ "Інститут фармакології та токсикології НАМН України", професор
Олександр Лявинець	Завідувач кафедри органічної і фізичної хімії та екології хімічних виробництв Чернівецького національного університету імені Юрія Федьковича, професор
Богдан Гришук	Завідувач кафедри органічної хімії Тернопільського державного педагогічного університету ім. В. Гнатюка, професор
Ірина Курмакова	Завідувач кафедри хімії Чернігівського національного педагогічного університету імені Т.Г. Шевченка, професор
Галина Сенченко	Декан природничо-географічного факультету Ніжинського державного університету імені Миколи Гоголя, доцент кафедри біології, доцент
Володимир Суховєєв	Завідувач кафедри хімії Ніжинського державного університету імені Миколи Гоголя, професор
Наталія Дроздова	Завідувач кафедри хімії Гомельського державного університету імені Франциска Скорини, доцент.

## ОРГАНІЗАЦІЙНИЙ СЕКРЕТАРІАТ КОНФЕРЕНЦІЇ:

Володимир Суховєєв	Голова організаційного секретаріату, завідувач кафедрою хімії, професор Ніжинського державного університету імені Миколи Гоголя
Євген Полункін	Співголова організаційного секретаріату, завідувач відділу гомогенного каталізу і присадок до нафтопродуктів Інституту біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України
Олег Москаленко	Відповідальний секретар, доцент кафедри хімії Ніжинського державного університету імені Миколи Гоголя
Сергій Циганков	Координатор, доцент кафедри хімії Ніжинського державного університету імені Миколи Гоголя
Владислав Гриценко	Секретар, доцент кафедри хімії Ніжинського державного університету імені Миколи Гоголя
Валентина Гавій	Секретар, доцент кафедри біології Ніжинського державного університету імені Миколи Гоголя
Олена Швидко	Секретар, с. викл. кафедри хімії Ніжинського державного університету імені Миколи Гоголя
Ірина Білодід	Секретар, старший лаборант кафедри хімії Ніжинського державного університету імені Миколи Гоголя

## КОВТУН

Григорій Олександрович

(16.08.1948 – 31.05.2008)

*Талановитий вчений в галузі фізичної хімії та нафтохімії, доктор хімічних наук, професор, член-кореспондент НАН України, лауреат Державної премії України в галузі науки і техніки, лауреат премій ім. О.І. Бродського та Л.В. Писаржевського, голова експертної ради з хімії ВАК України (2005–2008 р.р.).*



Г.О. Ковтун, народився 16 серпня 1948 р. в с. Сазонівка Полтавської області.

Середню освіту здобув у Чевельчанській середній школі на Полтавщині.

Протягом 1966–1971 рр. навчався на хімічному факультеті Чернівецького державного університету.

У 1971 р. вступив до аспірантури Інституту хімічної фізики АН СРСР (м. Москва), після закінчення якої у 1974 р. успішно захистив кандидатську дисертацію і здобув ступінь кандидата хімічних наук.

У 1974–1988 рр. працював у Всесоюзному науково-дослідному інституті переробки нафти (м. Електрогорськ Московської області), де пройшов шлях від молодшого наукового співробітника до

завідувача відділом. У 1984 р. після захисту докторської дисертації "Комплекси металів у каталізі обриву ланцюгів окиснення" йому присуджено ступінь доктора хімічних наук.

З 1988 р. до останніх днів життя Г.О.Ковтун працював у Києві в Інституті біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України, де очолював створений за його ініціативою відділ гомогенного каталізу та присадок до нафтопродуктів, з 2003 р. був заступником директора з наукової роботи. У 1992 р. Г.О. Ковтуна обрано членом-кореспондентом НАН України.

Тематика досліджень Г.О. Ковтуна – кінетика і механізми металокомплексного, металокластерного та нанокластерного каталізу радикальних реакцій, фізико-органічні основи поліфункціональних присадок до нафтопродуктів та альтернативних палив; історія хімії.

Григорієм Олександровичем створено основи фізичної хімії металокомплексного та металокластерного каталізу обриву ланцюгів окиснення органічних сполук, які є новими науковими напрямками селективних каталізаторів та сучасних стабілізаторів окиснення органічних матеріалів. Піонерськими дослідженнями

Г.О.Ковтуна є каталіз диспропорціювання вільних радикалів гігантськими нанокластерами паладію, синтетичними аналогами бактеріальних фередоксинів ( $Fe_4S_4$ -кластер), ендомодифікованими кластерами карбону (вуглецеві нанотрубки і фулерени модифіковані перехідними металами), гетерополіядерними комплексами металів; нові присадки до автомобільних палив, каталізатори паливних елементів.

На основі здобутих результатів започатковано теорію стабілізаторів окиснення каталітичної дії, викладену автором у монографії "Химия ингибиторов окисления органических соединений" (1995 р.).

Одержані фундаментальні результати покладені в основу створених поліфункціональних присадок до нафтопродуктів (мастильних матеріалів, технологічних рідин і палив для наземної, морської, авіаційної та космічної техніки).

Г.О. Ковтун – автор понад 500 наукових публікацій, серед яких 15 книг (монографії, довідники, посібники), 54 винаходів (включаючи зарубіжні патенти). Григорій Олександрович є автором понад 20 впроваджень на різних підприємствах України, країн СНД та далекого зарубіжжя. Він нагороджений Почесними грамотами Президії НАН України та Київського міського голови.

Плідну творчу працю Григорій Олександрович органічно поєднував з напруженою педагогічною діяльністю. Він підготував 15 кандидатів та 1 доктора наук. Його учні очолюють кафедри і факультети у вищих навчальних закладах. Важливе місце у діяльності Г.О.Ковтуна займало співробітництво з Вищою школою. Він читав курси лекцій у Ніжинському державному університеті ім. Миколи Гоголя. За його ініціативою були створені і успішно працювали спільна проблемна науково-дослідна лабораторія цього університету, а також філія кафедри хімії та хімічної технології Національного авіаційного університету при ІБОНХ НАН України.

Значне місце у діяльності Григорія Олександровича мала активна науково-організаційна та громадська робота – заступника академіка-секретаря Відділення хімії НАН України (1992–2003 рр.), члена експертної комісії з хімії Комітету з Державних премій України в галузі науки та техніки (з 2006 р.), члена кваліфікаційних вчених рад та редколегій наукових журналів, керівника кількох розділів наукових і науково-технічних програм міністерств та відомств України, голови експертної ради з хімії Вищої Атестаційної комісії України (з 2004 р.)

Г.О. Ковтуну завжди були притаманні унікальна працездатність, цілеспрямованість, висока громадянська позиція, принциповість у поєднанні з тактовністю, вимогливість до себе і до своїх колег, виважений аналіз рішень, що приймаються, наполегливість і послідовність в їх виконанні, професіоналізм та широка ерудиція. Він постійно генерував нові ідеї та інженерні рішення, був носієм демократичних засад у науці.

Слід зазначити, що Григорій Олександрович був яскравою особистістю, захоплювався історією хімії та рідної Полтавщини. З цих тематик опубліковано понад 50 статей у журналах "Вісник НАН України", "Колега", "Країна знань", "Сигнал", "Universitates" і газетах "Демократична Україна", "Хімія" у видавництві "Шкільний світ", "Сьогодні".

31 Травня 2008 року на 60 році раптово пішов з життя. Григорій Олександрович був неординарною людиною, йому були властиві чесність і порядність, щирість і щедрість, весела вдача і кипуча енергія, чуйність і жертвність. Він



був цікавим співрозмовником з тонким почуттям гумору, талановитим оратором і оповідачем. Це головні, але далеко не повні чесноти людини, яка яскраво пройшла по Землі і так несподівано згасла.

Вісім років тому цей світ покинула людина багатогранного інтелекту і таланту, надзвичайного творчого потенціалу, сповнена ідеями і задумами, невичерпного оптимізму. Світла пам'ять про Григорія Олександровича Ковтуна назавжди збережеться у серцях його колег, друзів та соратників.

# ТЕЗИ ДОПОВІДЕЙ

**ПІДСИЛЕННЯ МІЖФАЗНИХ ШАРІВ В СИСТЕМАХ НА ОСНОВІ ПОЛІМЕРІВ ТА КОПОЛІМЕРІВ СТИРОЛУ**

*Київський національний університет імені Т.Г. Шевченка,  
Володимирська 60, 01601, Київ, Україна, marina.anoshenko@gmail.com*

Відомо, що системи кополімер стиролу і акрилонітрилу – ПС (САН-ПС) є системами з обмеженою сумісністю. Взаємодія в міжфазному шарі таких систем забезпечується  $\pi$ - $\pi$ -електронною кон'югацією фенільних кілець стирольної складової САН і ПС. Але для полімерних систем виникає проблема некопланарності відповідних фенілів, які зв'язані з макроланцюгами. На нашу думку, існує можливість корекції копланарності за рахунок третього компонента - низькомолекулярного арена.

З літератури відомі подібні стійкі комплекси для низькомолекулярних систем арен-арен. З іншого боку відомі комплекси аренів з сильними кислотами Льюїса, зокрема тетраціанетиленом (TCNE) [1]. Аналогічні комплекси відомі і для систем полімер- TCNE. [2].

Методом діелектричної релаксації досліджено композиції кополімер стиролу і акрилонітрилу (азеотропного складу) – ПС, а також потрійні системи САН-ПС-низькомолекулярна речовина (НМР). За зміною діелектричних характеристик в температурних областях прояву *krank-schaft* коливань [3] і  $\alpha$ -релаксації (САН) робили висновки про рівень міжмолекулярної взаємодії в системах з різним співвідношенням компонентів.

Область *krank-schaft* коливань може проявлятися лише, якщо кополімер містить ди-, три-, тетради стирольних послідовностей. В зв'язку з цим, методом ІЧ-спектроскопії ми довели їх наявність в досліджених зразках САН, а крім того, і наявність олігоад з 5-6 стирольними послідовностями.

У роботі застосовувались промислові термопластичні полімери САН і ПС: Середньов'язкісні молекулярні маси ( $M_n$ ) і температури склування склали: САН: 54560 (ДМФА, 20 °С). Температура склування ( $T_g$ ): 108 °С), ОГХ ПС: 237775 (хлороформ, 25 °С). Температура склування ( $T_g$ ): 98 °С), ОГХ Змішування САНу з ПС проводили подвійною екструзією при температурах на 20–30 °С вище за температури текучості САН і ПС.

Зразки формували у вигляді плівок (пресування при 150 °С, тиск 100 атм.).

В якості НМР застосовували ариени: бензол, толуол, стирол і кислоти Льюїса: 1-ціанетилен, тетраціанетилен.

Введення НМР (~1%) відбувалося в умовах сорбції в ексикаторі при кімнатній температурі: системи полімер- TCNE отримували в розчині (хлороформ).

На Рис. 1 представлена температурна залежність тангенса кута діелектричних втрат для систем САН-ПС.

Видно, що  $\max \text{tg}\delta$  ( $T_\alpha$ ) для систем САН-ПС зсувається в бік менших температур (3–5 °С) порівняно з  $T_\alpha(\text{САН})=123$  °С. Температурна область *krank-schaft* коливань (40–50 °С) для систем САН-ПС проявляється більш різко ніж в чистому САН, причому окремо виділяються *krank-schaft* -області САНу і ПСу.

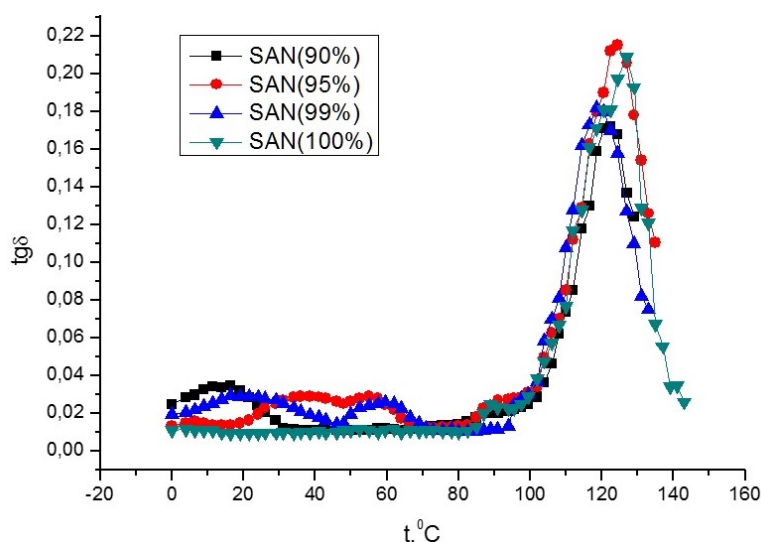


Рис.1 Температурна залежність  $\text{tg}\delta$  для композицій: САН-ПС

Порівняльна характеристика систем САН-ПС-стирол (рис.2) показує що область  $\alpha$ -релаксації є або незмінною, або зміщується в сторону більших температур (система САН:ПС=90:10%). Особливо треба відмітити те, що повністю заморожується *krank-schaft* коливання. Ця область в потрійних системах релаксує "монолітно". Аналогічно поводить себе система САН-ПС-толуол. Бензол активно взаємодіє з обома компонентами, але ця взаємодія є селективною ("сендвіч" САН-НМР-ПС не утворюється).

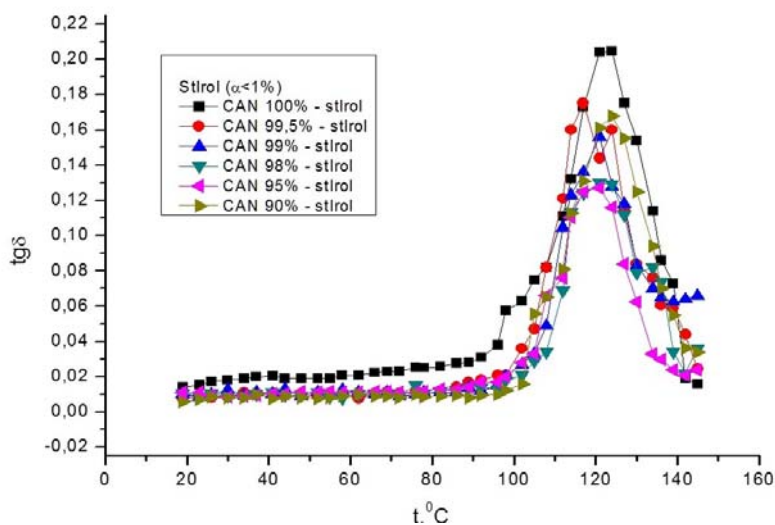


Рис.2 Температурна залежність  $\text{tg}\delta$  для композицій:САН-строл-ПС

Таким чином встановлено що в ряду аренив тільки толуол і стирол (молекули з асиметричним розподілом електронної густини в бензольному кільці) проявили здатність до утворення комплексних зв'язків САН-НМР-ПС;

Наведені нижче графіки ілюструють можливості ТСНЕ. Аналізуючи графік 3, спостерігаємо типову для САН-у картину: коливання в області 40–60 °С та пік  $\alpha$ -релаксації при температурі 91–93 °С. Пік є дещо зсунутим в сторону менших температур через вплив розчинника з якого була отримана плівка (хлороформ). Слід звернути увагу на плече при температурі 77 °С. Це плече характерне для розморозки фенільних сегментів, які мають відмінний від *krank-schaft* коливань рух.

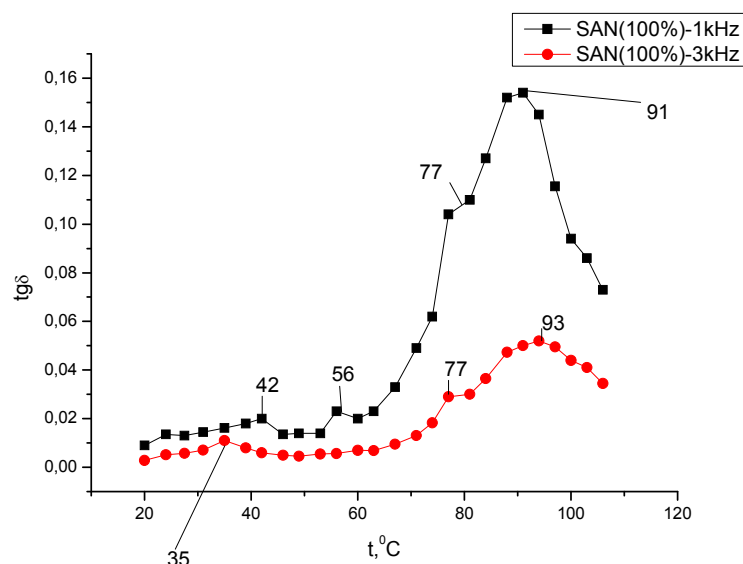


Рис.3 Температурна залежність  $\text{tg}\delta$  для чистого САН-у

Графік 4 показує поведінку системи, коли в неї було введено 0,2% TCNE. Слід звернути увагу на область 40–60 °С. Якщо в попередньому графіку ми спостерігали *krank-schaft* коливання, то в даному випадку вони зникли. Аналізуючи цю ситуацію, можна зробити висновок про взаємодію TCNE та фенілів САН-у, в результаті якої, коливання не відбуваються. Звернувши увагу на теперішнє положення плеча графіка (106 °С) можна судити про зміщення самого піку  $\alpha$ -релаксації в сторону вищих температур. Пік  $\alpha$ -релаксації зареєструвати не вдалось через електронну провідність системи, яка потребує подальшого вивчення.

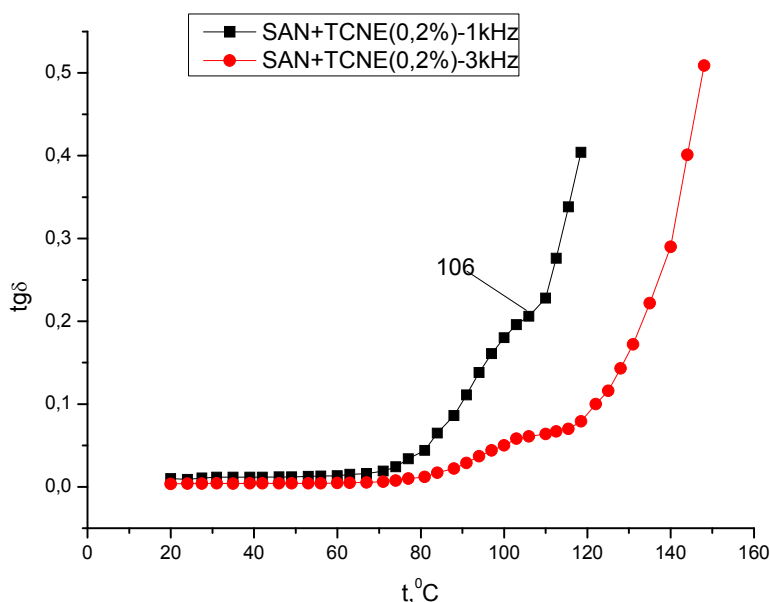


Рис.4 Температурна залежність  $\text{tg}\delta$  для композицій: САН- TCNE

Відносно слабка кислота Льюїса 1-ціанетилен також селективно взаємодіє з компонентами системи САН-ПС.

### Література

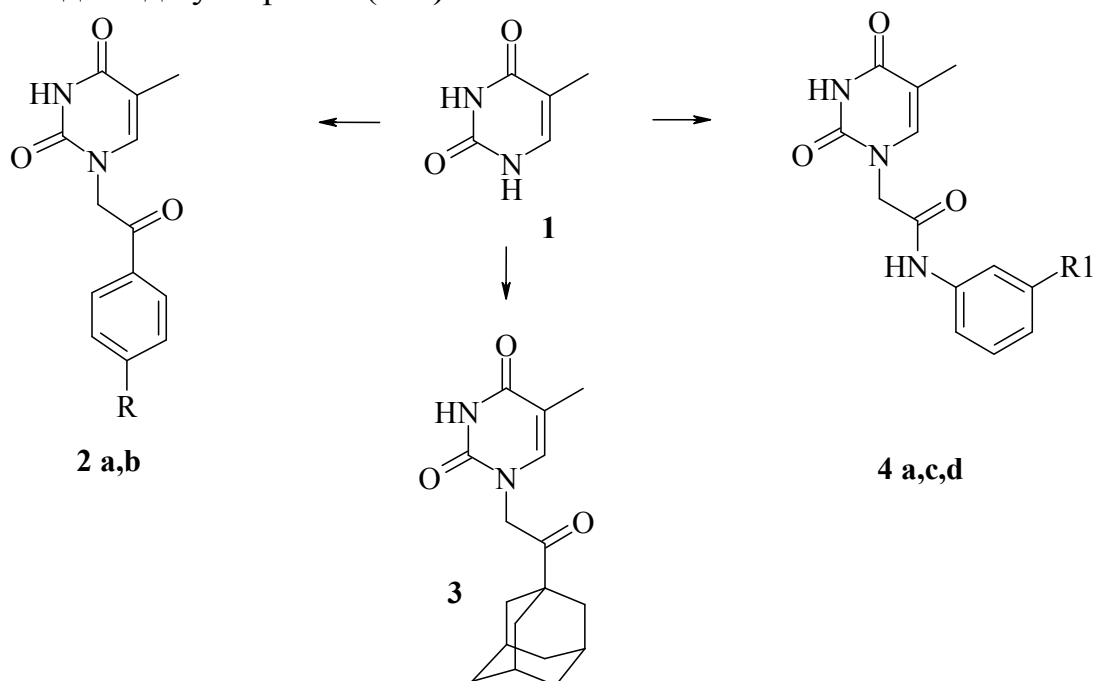
1. Фізер Л., Фізер М. "Органічна хімія" 1970 р., с. 169-171.
2. Die Makromolekulare Chemie: Vol. 155, Issue 1, pages 259–268, 17 May 1972.
3. Бойер Р., "Переходы и релаксационные явления в полимерах" // М, Мир: 1968, – 384с.

## СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ НОВИХ ПОХІДНИХ ТИМІНУ

*Ніжинський державний університет імені М. Гоголя*

Пошук нових ефективних поліфункціональних лікарських засобів на основі природних об'єктів є одним з пріоритетних напрямків у фармакології та біоорганічній хімії. Похідні піримідину входять до складу нуклеїнових кислот і тому їх аналоги можуть взаємодіяти з нуклеотидзв'язуючими зонами рецепторних поверхонь біомембран, що підвищуватиме фармакологічну безпеку зазначених лікарських засобів. Так, 6-метилурацил застосовується як імуномодулюючий препарат [1], а аналог тимідину, противірусний препарат зидовудін, – для лікування СНІДу [2]. Тому синтез нових похідних тиміну та дослідження їх фармакологічної активності є перспективним напрямком експериментальних досліджень.

Нами показано, що тимін (**1**) легко алкілується як заміщеними фенацетилбромідами, так і відповідними  $\alpha$ -хлорацетанілідами з утворенням відповідних похідних за першим атомом Нітрогену гетероциклу. Реакція відбувається в присутності еквімолярних кількостей калій карбонату в сухому ацетонітрилі, що приводить до утворення (**2–4**):



де R = a) H, b) Cl, c) Br, d) Et.

Склад та будову синтезованих сполук (**2–4**) підтверджено елементним аналізом та даними ЯМР  $^1\text{H}$ -спектроскопії.

Прогнозування фармакологічної активності зазначених речовин проведено за допомогою комп'ютерної програми Prediction of Activity spectra for Substances [3]. Знайдено, що сполуки (**2–4**) з вірогідністю 76,2–85,9% можуть виявляти антиекземну дію, сполуки (**2a, 4a**) з вірогідністю 75,6–75,7% можуть бути інгібіторами нуклеозидоксидази, тоді як сполуки (**2a, 3**) – інгібіторами тестостерон-17- $\beta$ -дегідрогенази (НАДФ+) (75,3–75,6%), а сполуки (**2a, 2b**) – 27-гідроксихолестерол-7- $\alpha$ -монооксидази. Слід зазначити, що сполука (**2a**) є найбільш ефективною для пошуку нових поліфункціональних лікарських препаратів.

Прогнозування можливої токсичності здійснено за допомогою комп'ютерного моделювання. Для цього використано програму GUSAR [5].

Встановлено, що синтезовані речовини належать до 4–5 класів токсичності за класифікацією К.К. Сидорова [6]. Так, при внутрішньочеревному введенні щурам сполук (2-4), LD<sub>50</sub> може складати в межах 299,8–657,6 мг/кг, при внутрішньовенному – 142,9–503,3 мг/кг, пероральному – 1060,0–3625,0 мг/кг, а підшкірно – 1701,0–5202,0 мг/кг маси тварин. Слід зазначити, що сполука (4с) може бути нетоксичною для щурів.

### Література

1. Режим доступу: <http://cyberleninka.ru/article/n/antioksidantnye-svoystva-proizvodnyh-pirimidina>
2. Зидовудин. Режим доступуЖ <https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%97%D0%B8%D0%B4%D0%BE%D0%B2%D1%83%D0%B4%D0%B8%D0%BD>
3. Комп'ютерна програма Prediction of Activity spectra for Substances. Режим доступу: <http://pharmaexpert.ru/PASSonline/predict.php>. – Назва з екрана.
4. Пат. РФ, G01N33/00. Способ определения величины острой токсичности химических веществ по данным энергии связи в молекуле / Трушков В.Ф.; Клабукова Е.Р – № 2164684; заяв. 27.01.1998; опубл.13.09.1999.
5. Gusar online [Електронний ресурс]. – Режим доступу : <http://pharmaexpert.ru/GUSAR/acutoxpredict.html>. – Назва з екрану (08.09.2016).
6. Сидоров К.К. // Токсикология новых промышленных химических веществ. – М. : Медицина, 1979. – Вып. 13. – С. 47–51.

547.53:311.37

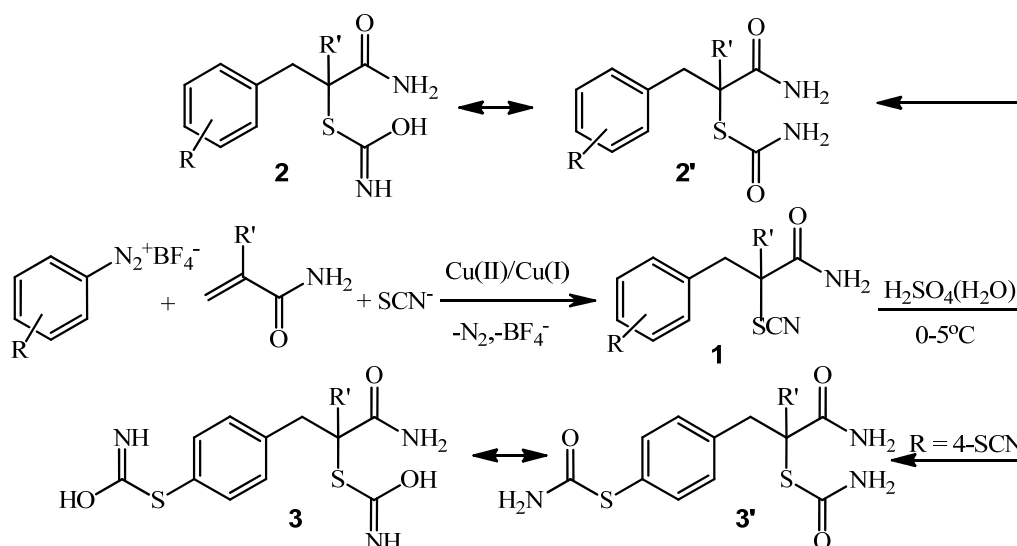
**Барановський В.С., Симчак Р.В.,  
Яцюк В.М., Гришук Б.Д.**

### СИНТЕЗ ТА БІОЛОГІЧНА АКТИВНІСТЬ АРИЛЗАМІЩЕНИХ α-ІМІНОТІОКАРБОНАТОПРОПАНАМІДІВ

*Тернопільський національний педагогічний університет ім. В. Гнатюка,  
вул. М. Кривоноса, 2, 46027, Тернопіль, baranovsky@tnpu.edu.ua*

Арилалкільні тіо- та ізотіоціанати, що містять в структурі молекул інші фармакофорні функціональні групи, становлять значний інтерес як біологічно активні речовини [1]. Проте поряд з високою біологічною активністю в багатьох випадках спостерігається їх значна токсичність, що обмежує практичне використання даних сполук як фармацевтичних засобів. Носієм цитотоксичної дії виступає здебільшого тіоціанатна група, тому пошук методів хімічної модифікації тіоціанатів є досить актуальним у плані створення більш ефективних лікарських субстанцій.

Взаємодією арилдіазоній тетрафлуороборатів з амідами акрилової і метакрилової кислот у присутності роданід-аніонів нами одержані 3-арил-(2-метил)-2-тіоціанатопропанаміди **1**, які надалі перетворені в похідні імінотіокарбонатної кислоти **2**, **3** реакцією кислотного гідролізу тіоціанатної групи (за реакцією Рімшнейдера [2]). Здійснені перетворення відбуваються за схемою:



**1-3:** R = H, 2-Me, 4-Me, 4-MeO, 4-HOOC, 4-SO<sub>3</sub>H, 4-SCN; R' = H, Me

Синтез тіоціанатоамідів **1** проводили згідно методик [3, 4]. Для кількісного перетворення 3-арил-(2-метил)-2-тіоціанатопропанамідів **1** у 3-арил-(2-метил)-2-(S-імінотіокарбонато)пропанаміди **2**, **3** процес гідролізу проводили в середовищі концентрованої сульфатної кислоти (96%) при 0–5 °С [5] впродовж 24 год. В таких умовах виходи імінотіокарбонатів **2**, **3** досягають 95%.

Слід відзначити, що у випадку 3-(4-тіоціанатофеніл)-(2-метил)-2-тіоціанатопропанамідів гідроліз відбувається за участю обох тіоціанатних груп тіоціанатопропанамідного і 4-тіоціанатофенільного фрагментів.

Будову синтезованих сполук **2**, **3** підтверджено даними ІЧ та ЯМР <sup>1</sup>H спектрів. Аналіз ІЧ спектрів засвідчує відсутність у структурі продуктів реакції родангруппи у жодній з її ізомерних форм (характеристичні смуги поглинання в ділянці 2170-2140 (ν<sub>SCN</sub>) і 2080-2040 (ν<sub>NCS</sub>) не спостерігаються). Крім цього, широкі смуги з максимумами при 3436-3412 см<sup>-1</sup> вказують на наявність в структурі досліджуваних продуктів гідроксо- та іміногруп, зв'язаних між собою водневими зв'язками, а прояв двох максимумів в ділянці характеристичних частот карбонільної групи (1732-1704 см<sup>-1</sup>) – на наявність двох амідних фрагментів.

В ЯМР <sup>1</sup>H спектрах імінотіокарбонатів **2**, **3** спостерігаються широкі синглети в ділянці 8.0-7.4 м.ч., що відповідають двом (сполуки **2**) і чотирьом (сполуки **3**) протонам, які відносяться до імінотіокарбонатних фрагментів. Характер сигналів однозначно дозволяє стверджувати про домінування в структурі даних сполук імінотіокарбонатного фрагменту над амінотіокарбонатним (тіокарбама-тним). Тобто, частка тіоамідної форми (ізомери **2'** і **3'**) є незначною.

Нами проведено кількісну оцінку біологічної активності одержаних імінотіокарбонатопропанамідів **2**, **3** за допомогою програми PASS C&T. Дані прогнозування свідчать, що сполуки **2**, **3** характеризуються достатньо високою здатністю виступати інгібіторами оптинів, які являють собою протеази зовнішніх мембран, ідентифіковані у багатьох представників патогенних для людини або рослин ентеробактерій. Ці спеціалізовані білки беруть участь в подоланні вроджених неспецифічних захисних сил чутливого господаря, сприяючи колонізації його окремих органів [6]. Тобто, сполуки **2**, **3** потенційно виявляють виражену бактеріостатичну дію, яка насамперед зумовлюється наявністю амідного



та імінотіокарбонатного фрагментів. Синтезовані імінотіокарбонатоаміди **2, 3** є також потенційними інгібіторами процесів окисного метаболізму в клітинах.

Експериментальні дослідження протимікробної активності підтверджують, що 3-арил-(2-метил)-2-(S-імінотіокарбонато)пропанаміди **2, 3** бактерицидно діють на штами *E. coli*, *S. aureus*, *P. aeruginosa* та *C. albicans* (мінімальні інгібуючі концентрації знаходяться в діапазоні 7.8-31.2 мкг/мл).

Таким чином, синтезовані нами  $\alpha$ -імінотіокарбонатопропанаміди мають достатній фармакологічний потенціал і можуть бути рекомендовані для більш детальних експериментальних випробувань з метою розробки на їх основі нових бактерицидних засобів.

### Література

1. Pataj S. The chemistry of functional groups: The Chemistry of Cyanates and Their Thio Derivatives / S. Pataj. – New York: Wiley-Interscience, 1977. – Pt. 2. – P. 819 – 886.
2. Riemschneider R. Thiocarbamates and Related Compounds. X.1 a New Reaction of Thiocyanates / R. Riemschneider // J. Am. Chem. Soc. –1956. – Vol. 78, N. 4. – P. 844–847.
3. Baranovskii V. S. Synthesis and heterocyclization of 3-aryl-2-methyl-2-thiocyanatopropanamides / V.S. Baranovskii, R.V. Simchak, B.D. Grishchuk // Russ. J. Gen. Chem. – 2009. – V 79, N. 2. – P. 269–273.
4. Baranovskii V. S. Anionarylation of acrylic and methacrylic acids derivatives with p- and m-phenylenebisdiazonium tetrafluoroborate / V. S. Baranovskii, V. N. Yatsyuk, B. D. Grishchuk // Russ. J. Gen. Chem. – 2014. – V. 84, N. 8. – P. 1505-1509.
5. Schmidt K. Some Alkyl Thiocarbamates Prepared from Alkyl Thiocyanates by Riemschneider's Reaction / K. Schmidt, P. Kollek-Bös // J. Am. Chem. Soc. –1953. – Vol. 75, N. 23. – P. 6067, 6068.
6. Protein regions important for plasminogen inactivation and inactivation of  $\alpha_2$ -antiplasmin in the surface protease Pla of *Yersinia pestis* / M. Kukkonen, K. Lahteenmaki, M. Suomalainen [etc] // Molecular Microbiology. – 2001. – Vol. 40(5). – P. 1097–1111.

УДК 546.287:54/145

Богатиренко В. А., Процик Н. М.

## ВИКОРИСТАННЯ ДОБАВОК МОДИФІКОВАНИХ КРЕМНЕЗЕМІВ У СКЛАДІ БУРОВИХ СИЛІКАТНИХ РОЗЧИНІВ

*Національний педагогічний університет імені М. П. Драгоманова*

Однією з найпоширеніших речовин на Землі є оксид Силіцію. На його основі колоїдно-хімічним золь-гель методом отримано велику кількість матеріалів: каталізаторів і адсорбентів (наприклад, цеолітів), покриттів, термо- і звукоізоляційних пористих матеріалів, кераміки, композиційних і лакофарбових матеріалів, бурових розчинів і реагентів тощо.

Застосування  $\text{SiO}_2$  у складі силікатних бурових розчинів надає ряд переваг перед іншими інгібованими буровими розчинами – хлорокалієвими, хлорокальцієвими і гліколеєвими. Присутність його у вигляді водорозчинних силікатів в буровому розчині навіть в невеликих кількостях (частки відсотка) веде до підвищення якості цементування обсадних колон. Силікатні реагенти, на відміну від хлорокалієвих, практично не змінюють мінералізацію бурового розчину; використання бурових силікатних розчинів (БСР) дозволяє уникнути засолонення ґрунтових вод і тим самим зберігає природний склад ґрунтового комплексу.

З метою підвищення протизносних та протиприхватних властивостей, а також покращення інгібуючих, гідрофобізуючих і реологічних властивостей останнім часом досліджуються силікатні композиції бурових розчинів на основі високодисперсних модифікованих частинок аморфних кремнеземів з розвинутою поверхнею (питома поверхня частинок  $\text{SiO}_2$  може перевищувати  $1000 \text{ м}^2/\text{г}$ ). Такі частинки мають високу адсорбційну активність, підвищену гідрофобність і хімічну активність щодо катіонів металів ґрунтового розчину внаслідок модифікації поверхні. Глинисті розчини, оброблені такими БСР, здатні запобігати проникненню флюїдів в породу в процесі буріння і скріплення свердловин, оскільки взаємодія таких частинок з частинками глинистих порід запобігає додатковому зволоженню останніх за рахунок гідрофобізації і знижує проникність фільтраційної кірки. Крім того, використання модифікованих кремнеземів сприяє взаємодії частинок кремнеземів з молекулами ПАР та інших органічних добавок БСР, які вводять з метою підвищення мастильних властивостей бурових розчинів і для розрідження концентрованих глинистих суспензій – це гумати, лігносульфонати, акрилати, водорозчинні естери целюлози, крохмальні реагенти, багатоатомні спирти та ін.

Нами досліджувалась можливість використання високодисперсного кремнезему, модифікованого нітрогеновмісними полімерними сполуками, які одержували в процесі поліконденсації кремнезему з розчинного скла (натрій метасилікату) у присутності кремнійорганічних сполук і попередників полімеризації поліамінів. Синтезовані матеріали – аміноорганокремнеземи – мають фізичні характеристики твердого тіла, проте їхні хімічні властивості визначаються головним чином природою "пришитої" поверхневої сполуки і свідчать, зокрема, про значне підвищення гідрофобності.

УДК 577.112.824:577.152.313:547.639

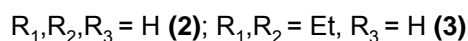
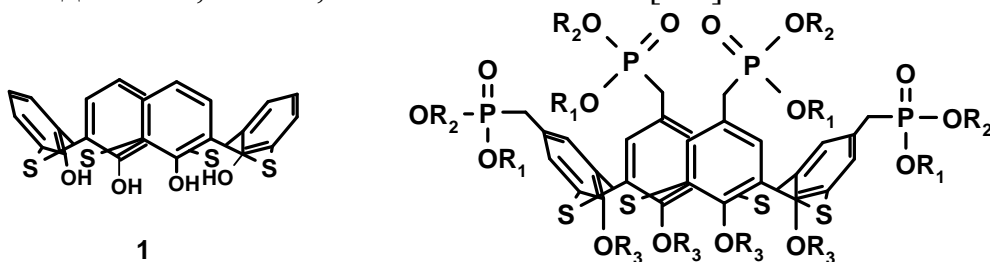
Булденко В.М., Труш В.В., Драпайло А.Б., Кальченко В.І., Вовк А.І.

## **ВЗАЄМОДІЯ ЛЮДСЬКОГО СИРОВАТКОВОГО АЛЬБУМІНУ З ТІАКАЛІКСАРЕНОМ ТА ЙОГО ПОХІДНИМИ**

*Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України  
Інститут органічної хімії НАН України*

Альбумін є одним з білків крові, що забезпечує транспортування ендогенних і екзогенних речовин. Вивчення механізмів комплексоутворення потенційно біоактивних сполук з альбуміном дозволяє прогнозувати можливості їх біологічного транспорту *in vivo*. Нами вперше показано здатність деяких похідних тіакаліксарену зв'язуватись з людським сироватковим альбуміном [1]. Похідні калікс[4]аренів досліджувались нами як інгібітори людських протеїнтирозинфосфатаз. Відомо, що зміни в активності цих ензимів можуть сприяти розвитку багатьох патологій, включаючи рак, метаболічні та автоімунні хвороби. Тому РТрази можуть бути перспективними терапевтичними мішенями для розробки нових лікарських препаратів, а їх інгібітори досліджуються як можливі нові лікарські засоби. Раніше нами було встановлено, що фосфорильовані мак-

роцикли здатні ефективно інгібувати активність лужної фосфатази та бактеріальної РТРази з Єрсинії [2,3]. Серед калікс[4]аренфосфонових кислот, тетраазамакроциклів і похідних фулеренів знайдено нові ефективні *in vitro* інгібітори РТР1В, ТС-РТР CD45, що можуть виявляють селективність дії, в тому числі по відношенню до SHP2, MEG2, MEG1 та LAR-РТР [4-9].



У цій роботі проаналізовано константи Штерна-Фольмера і константи зв'язування альбуміном тіакалікс[4]арену **1**, тіакалікс[4]арен-тетракіс-метилфосфонові кислоти **2** та її етилового естеру **3**.

Процес гасіння флуоресценції альбуміну з константою  $K_{SV}$  при додаванні макроциклу можна описати рівнянням Штерна-Фольмера:  $F_0/F = 1 + k_q \tau_0 [Q] = 1 + K_{SV} [Q]$ , де  $F_0$  і  $F$  - інтенсивності флуоресценції за відсутності та за наявності тіакаліксарену  $Q$ , відповідно,  $k_q$  - бімолекулярна константа гасіння,  $\tau_0$  - час життя флуорофора у збудженому стані (для біополімерів приблизно  $10^{-8}$  с). Попередньо було встановлено, що константа Штерна-Фольмера  $K_{SV}$  зменшується зі зростанням температури, тобто гасіння флуоресценції відбувається за рахунок утворення нефлуоресцентного комплексу між флуорофором в основному електронному стані та гасником. Значення  $k_q$ , отримані з рівняння Штерна-Фольмера, становлять приблизно  $10^{13} \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ , що значно перевищує максимальне значення цієї константи для динамічного типу гасіння ( $10^{10} \text{ M}^{-1} \text{ s}^{-1}$ ) і також підтверджує утворення комплексу білка з лігандом.

Використовуючи спектральні дані, з лінійної залежності  $\log(F_0-F)/F$  від  $\log[Q]$  було розраховано константи зв'язування  $K_b$  та кількість лігандів ( $n$ ), що приєднуються до однієї молекули ЛСА.

Аналіз отриманих результатів ( $25^\circ\text{C}$ ) вказує на те, що значення  $n$  для сполук **1-3** складає 0,76, 0,83 і 0,89, що свідчить про наявність щонайменше одного центру зв'язування каліксаренів на поверхні альбуміну. Константа Штерна-Фольмера є вищою для незаміщеної структури **1** ( $2,76 \cdot 10^5 \text{ M}^{-1}$ ) у порівнянні з похідними **2** і **3** ( $0,61 \cdot 10^5 \text{ M}^{-1}$  і  $0,82 \cdot 10^5 \text{ M}^{-1}$ , відповідно). Однак, менш полярні молекули **1** і **3** демонструють більші значення констант зв'язування  $K_b$  ( $0,147 \cdot 10^5 \text{ M}^{-1}$  і  $0,236 \cdot 10^5 \text{ M}^{-1}$ , відповідно) якщо порівнювати зі значенням цієї константи у разі взаємодії з альбуміном тіакалікс[4]арен-тетракіс-метилфосфонові кислоти **2** ( $0,056 \cdot 10^5 \text{ M}^{-1}$ ). Ці дані, а також наявність гідроксильних груп на нижньому ободі макроциклів не виключає роль як гідрофобних, так і водневих зв'язків, а також сил Ван-дер-Ваальса при формуванні комплексів тіакаліксаренів з альбуміном.

### Література

1. Trush V. V. Phosphonate monoesters on a thiocalix[4]arene framework as potential inhibitors of protein tyrosine phosphatase 1B / S. G. Kharchenko, V. Yu. Tanchuk, V. I. Kalchenko, A. I. Vovk //

- Org. Biomol. Chem. – 2015. – Vol. 13. № 33. – P. 8803-8806.
2. Vovk A. Calix[4]arene-methylenebisphosphonic acids as calf intestine alkaline phosphatase inhibitors / V. Kalchenko, S. Cherenok, V. Kukhar, et. al // Org. Biomol. Chem. – 2004. – Vol. 2. – P. 3162-3166.
  3. Vovk A. I. Inhibition of Yersinia protein tyrosine phosphatase by phosphonate derivatives of calixarenes / L. A. Kononets, V. Yu. Tanchuk, S. O. Cherenok, et. al // Bioorg. Med. Chem. Lett. – 2010. – Vol. 20. – P. 483-487.
  4. Tanchuk V.Y. Classification of binding site conformations of protein tyrosine phosphatase 1B / Tanchuk V.Y., Tanin V.O., Vovk A.I. // Chem. Biol. Drug Des. – 2012. – Vol. 80, № 1. – P. 121-128.
  5. Trush V. V. Calix[4]arene methylenebisphosphonic acids as inhibitors of protein tyrosine phosphatase 1B / S. O. Cherenok, V. Yu. Tanchuk, V. P. Kukhar, V. I. Kalchenko, A. I. Vovk // Bioorg. Med. Chem. Lett. – 2013. – Vol. 23. № 20. – P. 5619-5623.
  6. Kobzar O. L. Fullerene derivatives as a new class of inhibitors of protein tyrosine phosphatases / V. V. Trush, V. Yu. Tanchuk, A. V. Zhilenkov, P. A. Troshin, A. I. Vovk // Bioorg. Med. Chem. Lett. – 2014. – Vol. 24 № 14. – P. 3175-3179.
  7. Kobzar O.L. Phosphonate derivatives of tetraazamacrocycles as new inhibitors of protein tyrosine phosphatases / O.L. Kobzar, M.V. Shevchuk, A.N. Lyashenko, V.Yu. Tanchuk, V.D. Romanenko, S.M. Kobelev, A.D. Averin, I.P. Beletskaya, A.I. Vovk, V.P. Kukhar // Org. Biomol. Chem. – 2015. – Vol. 13, № 27. – P. 7437-7444.
  8. Trush V. V. Calix[4]arene  $\alpha$ -hydroxymethylphosphonic acids as potential inhibitors of protein tyrosine phosphatases / V. Y. Tanchuk, S. O. Cherenok, V. I. Kalchenko, A. I. Vovk // J. Org. Pharm. Chem. – 2014. – Vol. 12. – P. 39-42.
  9. Trush V. V. Evaluation of inhibition of protein tyrosine phosphatase 1B by calixarene-based  $\alpha$ -ketophosphonic acids / V. Y. Tanchuk, S. O. Cherenok, V. I. Kalchenko, A. I. Vovk // Chem. Biol. Lett. – 2015. – Vol. 2. № 1. – P. 1-5.

УДК 54.01:661.162.6

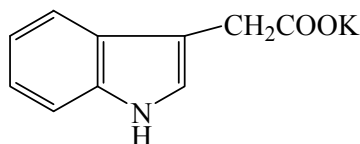
**Гавій В.М., Суховєєв В.В.**

## **ВПЛИВ ПЕРЕДПОСІВНОЇ ОБРОБКИ НАСІННЯ НА ФОРМУВАННЯ КОРЕНЕВОЇ СИСТЕМИ СОЇ**

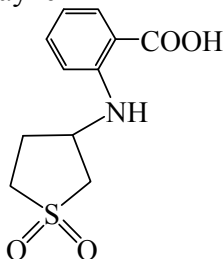
*Ніжинський державний університет імені Миколи Гоголя,  
м. Ніжин, Чернігівська обл., Україна.*

Україна має унікальні можливості для розвитку сільськогосподарського виробництва на основі галузі рослинництва. В Україні починаючи із середини минулого десятиріччя посівні площі сої почали стрімко зростати. Завдяки цьому соя на сьогоднішній день належить до однієї із найбільш рентабельних сільськогосподарських культур. У даний час в Україні урожайність сої не відповідає потенційним можливостям цієї культури. Невисока урожайність свідчить про недостатнє вивчення особливостей росту і розвитку рослин сої, процесів фотосинтезу і біологічної фіксації азоту, формування її урожаю, вплив регуляторів росту рослин на величину урожаю тощо. Ці питання є досить актуальними і недостатньо вивченими в умовах України, особливо при впровадженні у сільськогосподарське виробництво нових сортів сої. Для виробництва соєвої продукції необхідно значно підвищити рівень її врожайності на основі застосування ефективних регуляторів росту, які підвищують стійкість рослин проти хвороб та шкідників, збільшують урожайність, понижують втрати при збиранні та зберіганні продукції [1]. Перспективними у цьому напрямі можуть бути похідні антранілової та параамінобензойної кислот.

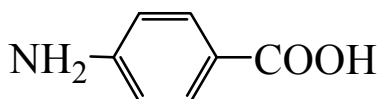
**Тому, метою нашої роботи** є дослідження впливу передпосівної обробки насіння сої синтезованими синтетичними регуляторами росту на формування її кореневої системи. Польові дослідження проводили на території навчально-дослідної агробіостанції Ніжинського державного університету імені Миколи Гоголя. Відповідно ділянки готували до посіву: проводили культивацію, обміряли, розбивали на варіанти та повторності, а також обробляли насіння досліджуваними речовинами, а саме:



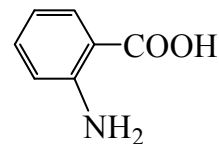
Гетероауксин



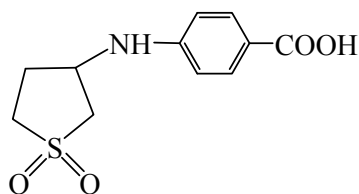
Сульфолан-3-іл-антранілова кислота



Параамінобензойна кислота



Антранілова кислота



Сульфолан-3-іл-параамінобензойна кислота

Нами були використані такі варіанти польових досліджень:

- контроль (без обробки насіння препаратами).
- обробка насіння гетероауксином (калієва сіль індолілоцтової кислоти), що використовувався як еталон.
- обробка насіння антраніловою кислотою;
- обробка насіння параамінобензойною кислотою;
- обробка насіння сульфолан-3-іл-антраніловою кислотою;
- обробка насіння сульфолан-3-іл-параамінобензойною кислотою.

Препарати випробовували у концентраціях 1,0, 0,2 та 0,02 мг/л. Час обробки насіння препаратами складав 24 години. Після обробки насіння сої висівали широкорядним способом у ґрунт поля (ширина міжрядь – 45 см). Глибина загортання насіння складала – 6 см [2]. Загальна площа поля становила 56 м<sup>2</sup>. Ґрунтовий покрив дослідного поля – чорнозем опідзолений, малогумусний. Потреби у внесенні мінеральних добрив не було. Повторність досліду – трьохразова.

Для досліджень використовувалася соя сорту Горизонт. Це сорт зернового напрямку, середньостиглий, тривалість вегетаційного періоду 105-110 днів до повної технічної стиглості. Має комплексну стійкість до хвороб і шкідників.

Ефективність регуляторів росту рослин залежить від особливостей погодних умов. Тому, при проведенні досліджень нами враховувалися метеорологічні показники, зокрема середньодобові мінімальні та максимальні температури повітря, кількість опадів, запаси вологи в ґрунті.

На фазі утворення трійчастого листа проводили фізіологічні виміри: визначали кількість бічних коренів рослин, лінійний ріст коренів сої. Адже коренева система сої відіграє важливу роль у мінеральному живленні рослини. Завдяки добре розвиненій кореневій системі соя може засвоювати поживні

елементи з глибших шарів ґрунту, а також ті, що знаходяться у важкодоступних формах і практично не засвоюються іншими зерновими і бобовими культурами. Крім того, соя може задовольняти значну частину своєї потреби в нітрогені (до 70%) завдяки симбіозу з азотфіксуючими бактеріями роду *Rhizobium*. За оптимальних умов симбіотичної азотфіксації рослини сої можуть засвоювати до 200 кг/га біологічного нітрогену, що дає можливість покращити баланс нітрогену в ґрунті та зменшити обсяги використання мінерального нітрогену. Науковцями з інституту фізіології рослин і генетики НАН України з'ясовано, що ефективність симбіозу підвищується за рахунок утворення більшої кількості бічних коренів [3].

Тому, було досліджено вплив синтетичних регуляторів росту на утворення бічних коренів сої культурної та їх лінійний ріст.

Встановлено, що досліджувані речовини виявляють суттєвий вплив на процес утворення бічних коренів та лінійний ріст коренів сої і за дією, у більшості варіантів, перевищують дію еталона та контролю. Виявлено, що фізіологічна дія препаратів значно залежить від концентрації їх у розчині та природи ліганда.

З'ясовано, що більшість досліджуваних нами сполук у всіх концентраціях перевищують показники контролю. Відповідно до них, у фазі утворення трійчастого листка найбільшу ефективність при концентрації 0,02 мг/л має сульфолан-3-іл-антранілова кислота, яка перевищила показники контролю на 125% по утворенню бічних коренів та на 135 % по їх лінійному росту, а показники еталону на 75 і 68% відповідно.

При концентрації 0,2 мг/л найактивніше стимулювали процеси утворення бічних коренів сульфолан-3-іл-антранілова, антранілова та параамінобензойна кислоти, що перевищили показники контролю на 167%, а еталону на 134%. Таку фізіологічну дію досліджуваних сполук можна пояснити тим, що параамінобензойна кислота входить до складу молекули фолієвої кислоти (вітамін Н<sub>1</sub>) і відграє ключову роль у біосинтезі білків і нуклеїнових кислот [4-5]. Похідні антранілової кислоти впливають на процеси росту рослин, а також є ефективними протизапальними препаратами нестероїдного типу [6] і антиоксидантами органічних сполук [7]. Лінійний ріст коренів сої культурної найбільше стимулював гетероауксин і перевищив показники контролю на 152%.

З підвищенням концентрації до 1 мг/л найбільша кількість бічних коренів утворилася під впливом антранілової кислоти, що перевищила показники контролю на 242%. Тоді як на лінійний ріст бічних коренів сої найефективніше вплинула сульфолан-3-іл-параамінобензойна кислота, яка перевищила показники контролю на 126%, а еталону – на 77% .

Таким чином, сульфолан-3-іл-антранілова та сульфолан-3-іл-параамінобензойна кислоти ефективно стимулюють ріст кореневої системи сої культурної. Тому саме ці сполуки можуть мати практичний інтерес для пошуку нових металохелатів у якості синтетичних регуляторів росту бобових культур.

### Література:

1. Огурцов Є. М. Урожайність сої залежно від застосування біологічних препаратів // Є. М. Огурцов, В. Г. Міхеєв // Вісник Харківського НАУ (Сер. "Рослинництво, селекція і насінництво, овочівництво"). – Харків, 2008. - №5. – С. 59 - 62.

2. Вирощування сої. – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <http://www/agroresurs.com.ua>
3. Кругова О.Д., Мандровська Н.М., Коць С.Я. Вплив синтетичного полісахариду на ефективність симбіозу та активність пероксидази й каталази у рослин гороху і сої // Сільськогосподарська мікробіологія: Міжвід. темат. наук. зб. — Чернігів, 2006. — Вип. 4. — С. 62-73.
4. Вітамін В10 (параамінобензойна кислота) – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: <http://biomedicina.com.ua/vitamin-v10-paraaminobenzojna-kyslota>
5. Параамінобензойная кислота. – [Електронний ресурс]. – Режим доступу: [http://100vitaminov.ru/vitamin\\_b10.php](http://100vitaminov.ru/vitamin_b10.php).
6. Рейдалова Л.И. Рострегулирующая активность N-арилпроизводных антралиновой кислоты / Л. И. Рейдалова, В. С. Петренко, Ю. А. Фиалков и др. // Физиологически активные вещества. – 1984. – Вип.16. – С. 45-47.
7. Тринус Ф. П. Нестероидные противовоспалительные средства / Ф.П Тринус, Н. А. Мохорт, Б. М. Клебанов– К.: Здоров'я, 1975. – 239 с.

УДК: 678.01:539.4.014:544.163.3

**Гаголкіна З.О., Лобко Є.В.,  
Клепко В.В., Кокозей В.М.**

## **ДІЕЛЕКТРИЧНІ ТА МЕХАНІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ СІТЧАСТИХ ПОЛІУРЕТАНІВ З ВВЕДЕНИМИ *IN SITU* ГЕТЕРОПОЛІЯДЕРНИМИ КОМПЛЕКСАМИ Ca/Cu, Sr/Cu та Cu/Cd**

*Інститут хімії високомолекулярних сполук НАН України*

Полімерні матеріали та покриття, зокрема поліуретани (ПУ), на сьогоднішній день мають широке використання. Разом з тим, для надання таким системам додаткових властивостей, активно застосовують різні модифікатори полімерної матриці, серед яких значну частку становлять металовмісні сполуки. Раніше було показано, що введення в ПУ *in situ* координаційних сполук металів веде до підвищення механічної міцності систем [1], а також зміни релаксаційних та діелектричних властивостей систем [1-3]. Так, для сегментованих ПУ з введеними в ланцюг комплексами з металоцентрами Cu(II) та Ni(II) [3] та для лінійних і сітчастих ПУ з введеними гетерополядерними сполуками перехідних металів [2] характерний йонний механізм провідності.

Синтез сегментованих сітчастих поліуретанів (СПУ) проводили у дві стадії. На першій стадії синтезували форполімер на основі поліпропіленгліколю (ППГ) з молекулярною масою 1000 та толуїлендіізоціанату (суміш 2,4-/2,6- ізомерів (80/20)). Реакцію зшивання проводили триметилпропаном. З метою гомогенного розподілу модифікатора у полімерній матриці гетерополядерні комплекси металів вводили до реакційної суміші у вигляді диметилформамідних розчинів в кількості 1% мас.

Для синтезу металовмісних сітчастих поліуретанів було використано гетерополядерні комплекси складу  $[Cu_2Cd_2Cl_4(HDea)_4] \cdot 2n H_2O$ . (HDea – діетаноламін),  $[Sr\{Cu(HL)_2\}_2(NO_3)]NO_3$ , та  $[Ca\{Cu(HL)_2\}_2](SCN)_2$ ,  $[Ca\{Cu(HL)_2\}_2]I_2$  ( $H_2L$  – продукт конденсації о-ваніліну та моноетаноламіну). Надалі в тексті СПУ, модифіковані вищевказаними гетерополядерними комплексами металів будуть позначені як СПУ-1, СПУ-2, СПУ-3, та СПУ-4 відповідно. Вихідний сітчастий поліуретан – як СПУ-0. Одержані СПУ є еластичними плівками, забарвленими в колір модифікатора.

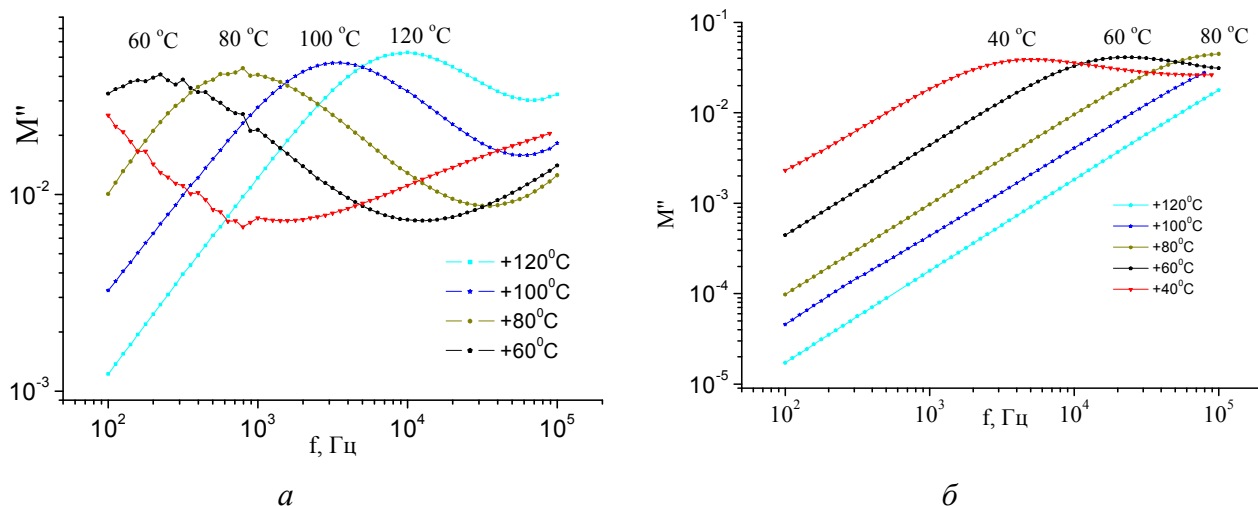


Рис. 1. Частотні залежності  $M''$  для СПУ-0 (а) та СПУ-1 (б) при різних температурах

Дослідження впливу гетерополіядерних металокомплексів на механізми переносу заряду в СПУ проводили за допомогою діелектричної релаксаційної спектроскопії з використанням діелектричного спектрометра, реалізованого на базі моста змінного струму Р5083. Р.

Механічні дослідження проводились на розривній машині 1925 ПА – 10 М при навантаженні 0,5 кН.

На частотній залежності уявної частини комплексного модуля ( $M''$ ) (рис.1) спостерігаються максимуми в інтервалі температур 60 – 120 °.

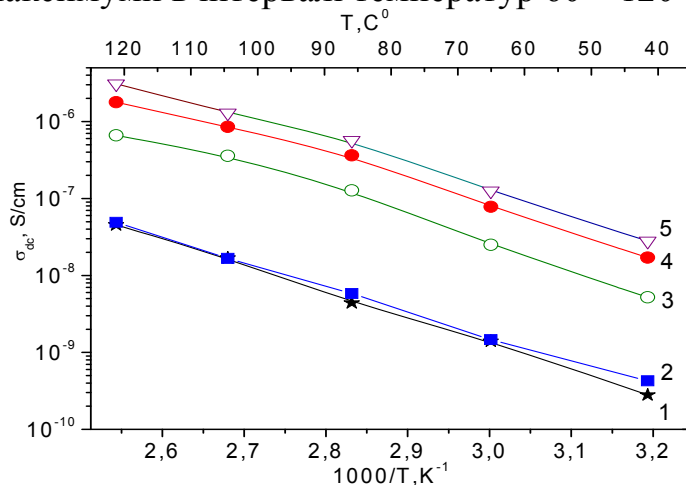


Рис. 2. Температурні залежності  $\sigma_{dc}$  для СПУ: (1) СПУ-0; (2) СПУ – 1; (3) СПУ – 2; (4) СПУ – 3; (5) СПУ – 4.

Ці максимуми пов'язані з релаксаційними процесами в СПУ. З підвищенням температури релаксаційні максимуми зсуваються в область вищих частот. Введення модифікатора у всіх випадках також веде до значного зміщення максимумів у бік вищих частот при відповідних температурах, порівняно з СПУ-0. Цей ефект пов'язаний зі збільшенням сегментальної рухливості гнучких блоків СПУ (олігоетерної компоненти) за рахунок її вивільнення внаслідок структурування систем при введенні координаційних сполук

Аналіз  $Z''$  ( $Z'$ ) для ізотерм досліджуваних СПУ дає можливість обчислити значення провідності при постійному струмі  $\sigma_{dc}$ . Температурні залежності  $\sigma_{dc}$  для СПУ наведено на рис. 2.

Таке підвищення провідності зі зростанням температури є характерним для



йонного типу провідності та, в даному випадку, пов'язано зі збільшенням сегментальної рухливості олігоетерної компоненти СПУ [4].

Таблиця 1

Механічні характеристики для вихідного та металовмісних СПУ

Зразок	Міцність на розрив, МПа	Подовження при розриві, %
СПУ-0	4,3	420
СПУ-1	7,1	410
СПУ-2	9,2	564
СПУ-3	8,4	560
СПУ-4	7,8	568

Як видно з рис. 2, провідність при постійному струмі ( $\sigma_{dc}$ ) для СПУ зростає зі збільшенням температури на 1-1,5 порядки.

Введення комплексів металів в полімерну матрицю може також підвищувати механічні характеристики полімерів [1, 2]. Одержані значення міцності на розрив ( $\sigma$ ) та відносного подовження при розриві ( $\epsilon_p$ ) для досліджених металовмісних СПУ наведено в табл. 1.

З табл. 1 видно, що введення гетерополіядерних комплексів металів в СПУ веде до підвищення міцності на розрив системи на 2,8-4,9 МПа. Це пов'язано зі здатністю функціональних груп СПУ взаємодіяти з гетерополіядерними комплексами, тим самим створюючи додаткові фізичні вузли зшивання [2]. Варто зазначити, що найвищими значеннями міцності на розрив характеризується СПУ, модифікований комплексом  $St/Cu$  (СПУ-2). При цьому значення подовження при розриві для металовмісних композитів СПУ-2, СПУ-3 та СПУ-4 зростає в середньому на 144%, а для СПУ-1 навпаки знижується на 10%.

### Література

1. Електричні та механічні властивості лінійних поліуретанів, модифікованих етилацетоацетатом міді / Ю. М. Нізельський, Ю. В. Скакун [та ін.] // Полімерний журнал. — 2007. — Т. 29, № 3. — С. 218 – 221.
2. Діелектрична релаксація і електропровідність лінійних та сітчастих поліуретанів наноструктурованих *in situ* комплексними сполуками металів / Ю. М. Нізельський, Н. В. Козак [та ін.] // Фізика конденсованих високомолекулярних систем. — 2007. — № 12. — С. 48 — 57.
3. Structure – property relationships in proton conductors based on polyurethanes / P. Pissis, A. Kyritsis [et al.] // Solid state ionics. — 2000. — № 136. P. 255 – 260.
4. Вплив введення *in situ* гетерополіядерних комплексів  $Cu_3Mn$  на структуру та властивості сітчастих поліуретанів / З. О. Гаголкіна, Е. В. Лобко [та ін.] // Вісник Київського національного університету імені Тараса Шевченка. Хімія. — 2014. — Т. 50, № 1. — С. 29 — 32.

**Головатюк В.М.<sup>1</sup>, Безуглий Ю.В.<sup>1</sup>,  
Кашковський В.І.<sup>1</sup>, Бражко О.А.<sup>2</sup>**

### ДИЗАЙН ТА СИНТЕЗ НОВИХ СПРОЦИКЛІЧНИХ 1,2-ДІАРИЛПІРАЗОЛІДИН-3,5-ДІОНІВ

<sup>1</sup>Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України, Харківське шосе, 50, Київ

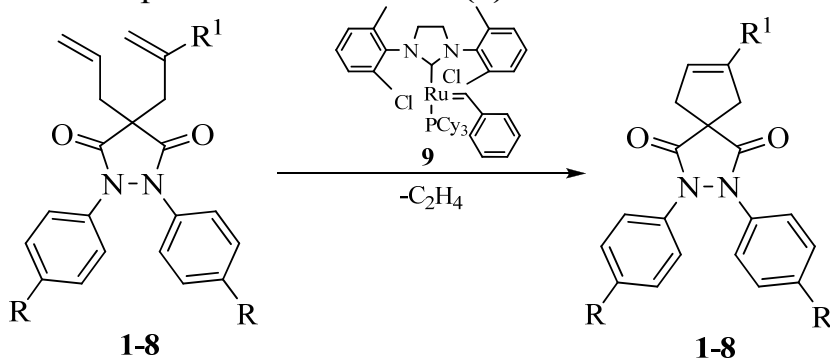
<sup>2</sup>Запорізький національний університет, вул. Жуковського, 66, Запоріжжя  
vladimirxpu@rambler.ru

Піразолідини, як відомо, є одними з важливих класів серед п'ятичленних нітрогеновмісних гетероциклічних сполук, які проявляють низку біологічних та

фізіологічних активностей, і, відповідно, використовуються досить широко в біології, медицині, ветеринарії тощо.

Нами був розроблений синтетичний підхід до створення реакціями метатезису із закриттям циклу нових спіроциклоалкенільних похідних 1,2-діарилпіразолідин-3,5-діону (**1-8**).

Слід відмітити, що ці реакції каталізувались *N*-гетероциклічним рутенійкарбеновим комплексом Граббса II покоління (**9**).



- |  |  |
|--|--|
| 1 - R=H, R <sup>1</sup> =H;                | 5 - R=Cl, R <sup>1</sup> =CH <sub>3</sub> ;    |
| 2 - R=H, R <sup>1</sup> =CH <sub>3</sub> ; | 6 - R=Br, R <sup>1</sup> =H;                   |
| 3 - R=CH <sub>3</sub> , R <sup>1</sup> =H; | 7 - R=Br, R <sup>1</sup> =CH <sub>3</sub> ;    |
| 4 - R=Cl, R <sup>1</sup> =H;               | 8 - R=CH <sub>3</sub> , Cl, R <sup>1</sup> =H. |

Гостру токсичність синтезованих сполук було досліджено як віртуально (прогнозування QSAR-аналізом за методологією комп'ютерної розробки QuS), так і експериментально (на білих безпородних мишах). Встановлено, що досліджувані піразолідиндіони **1-8** можна віднести до малотоксичних речовин, при чому з'ясовано, що токсичність цих сполук зменшується з появою як метильного замісника в циклопентеновому кільці (у 1,5 рази), так і замісників в ароматичному ядрі.

Методом QSAR-аналізу було встановлено, що сполуки **1-8** з високою вірогідністю можуть мати протизапальну та протитуберкульозну активності, здатність до пригнічення таких ракових клітинних ліній людини, як MGC-803 (рак шлунку), MCF-7 (рак молочної залози) и SMMC-7721 (рак печінки), а також здатність інгібувати ферменти обернену транскриптазу вірусу імунодефіциту людини (HIV-1) та протеїн-тирозин фосфатазу 1B (PTP 1B).

УДК 547.854.2/.8

Гречка І.А., Суховєєв В.В., Демченко А.М.

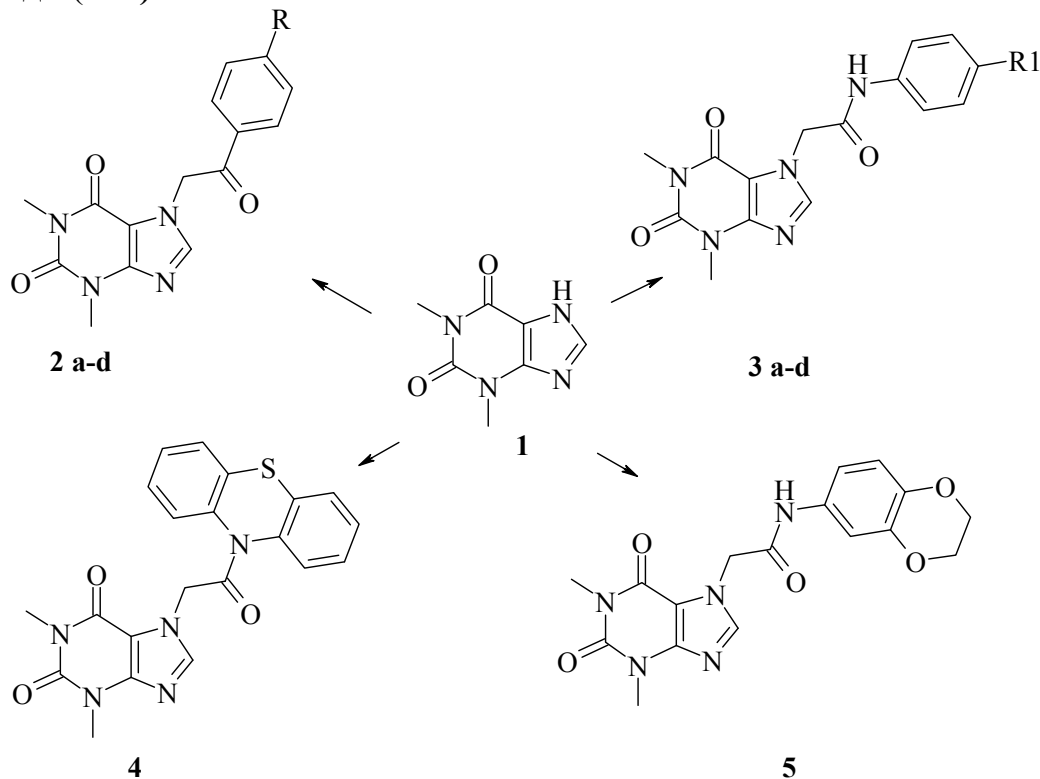
## СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ НОВИХ ПОХІДНИХ ТЕОФІЛІНУ

*Ніжинський державний університет імені М. Гоголя*

Теофілін є алкалоїдом, який за будовою близький до кофеїну. Він здатний збуджувати центральну нервову систему людини, розширювати судини серця, мозку, а також бронхи та спричиняти помірну сечогінну дію [1]. У медицині використовують синтетичний теофілін, а саме, сполуку теофіліну з етилендіаміном під назвою "Еуфілін" та "Амінофілін" використовують як спазмолітичний засіб [2]. Теофілін виявляє також імуномодулюючу дію, нормалізує газовий склад крові, комплексно впливає на серцево-судинну систему, а його ксантинові похідні є ефективними засобами в лікуванні бронхіальної астми [3]. Деякі похідні теофіліну виявляють виражену діуретичну дію [4]. Тому синтез модифі-

кованих аналогів БАР природного походження та дослідження їх можливої фізіологічної дії є пріоритетним напрямком наукових досліджень.

Нами показано, що теофілін (**1**) легко ацилується  $\alpha$ -хлорацетанілідами з утворенням відповідних гетероциклічних амідів. Реакція відбувається при 2-3-кратному надлишку калій карбонату в сухому ацетонітрилі, що дозволяє одержати амід (**2–5**) за схемою:



де R = a) H, b) Cl, c) Br, d) OCH<sub>3</sub>.

Склад та будову синтезованих сполук (**2–5**) підтверджено елементним аналізом та ЯМР <sup>1</sup>H-спектроскопією.

Прогнозування фармакологічної активності зазначених речовин проведено за допомогою комп'ютерної програми Prediction of Activity spectra for Substances [5]. Знайдено, що сполуки (**2–5**) з вірогідністю 59,0–97,0% можуть бути ефективними як Respiratory analeptic, Cyclic AMP phosphodiesterase inhibitor, Analeptic, Vasodilator, peripheral. Найбільш ефективними поліфункціональними лікарськими засобами серед синтезованих сполук можуть бути (**2b**) та (**4**). Так, сполука (**2b**), окрім зазначених активностей, з вірогідністю 71,0–76,0% може бути ефективною як Antiischemic, cerebral, Nootropic, Lipoprotein lipase inhibitor, CYP3A1 substrate, Muscle relaxant, CYP1A2 substrate, а сполука (**4**) – з вірогідністю 71,0–92,0% як Vasodilator, Spasmolytic, Papaverin-like, Anaphylatoxin receptor antagonist, Diuretic, FMO3 substrate та як Spasmolytic.

Прогнозування можливої токсичності здійснено за допомогою комп'ютерного моделювання. Для цього використано програму GUSAR [6].

Встановлено, що синтезовані речовини належать до 4–5 класів токсичності за класифікацією К.К. Сидорова [7].

### Література

1. Теофілін. Режим доступу: <https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%A2%D0%B5%D0%BE%D1%84%D1%96%D0%BB%D1%96%D0%BD> 2.

2. Эуфиллин. Режим доступу: <https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%AD%D1%83%D1%84%D0%B8%D0%BB%D0%BB%D0%B8%D0%BD>.
3. Перцева Т.О. Теофіліни у лікуванні хворих на бронхіальну астму / Т.О. Перцева, Т.С. Онищенко // Український пульмонологічний журнал. – 2000. – № 3. – С. 67–69.
4. Корнієнко В.І. Вивчення діуретичної активності деяких похідних теофіліну / В.І.Корнієнко, О.В.Ладогубець, Н.І.Лонгус та інш. // Ветеринарна медицина, вип. 96, 2012, С. 298–300.
5. Комп'ютерна програма Prediction of Activity spectra for Substances. Режим доступу: <http://pharmaexpert.ru/PASSonline/predict.php>. – Назва з екрана.
6. Gусar online [Електронний ресурс]. – Режим доступу : <http://pharmaexpert.ru/GUSAR/acutox-predict.html>. – Назва з екрану (08.09.2016).
7. Сидоров К.К. // Токсикология новых промышленных химических веществ. – М. : Медицина, 1979. – Вып. 13. – С. 47–51.

УДК 547. 831

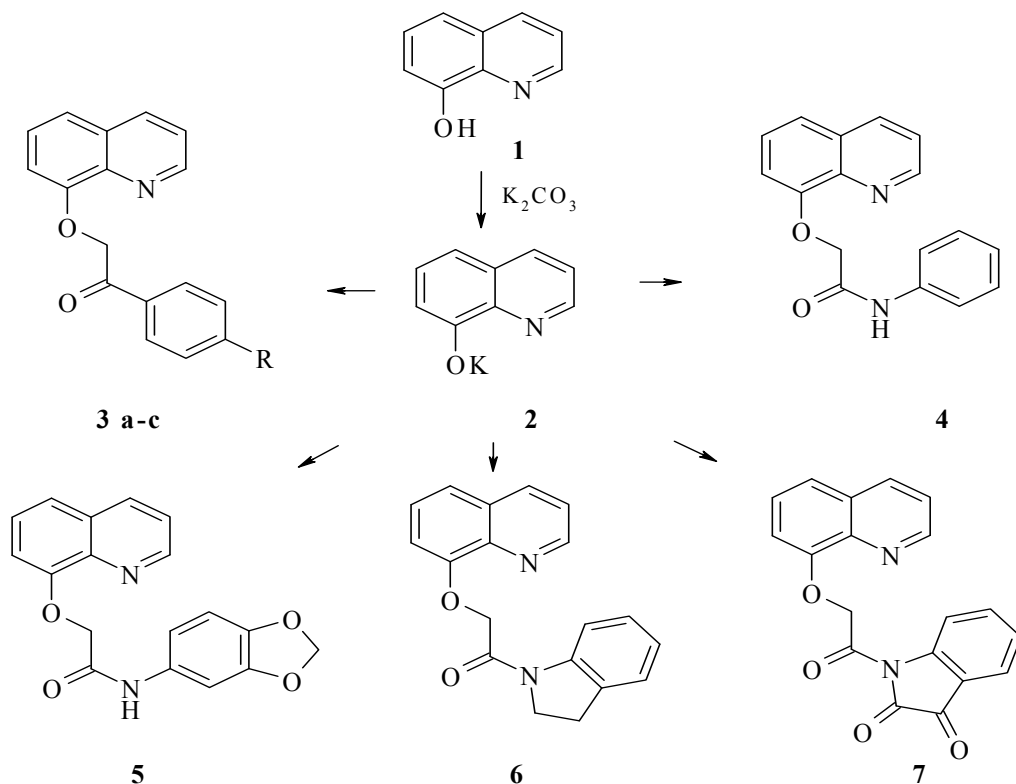
Демченко А.М., Суховєєв В.В., Круподер Т.О.

## СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ НОВИХ ПОХІДНИХ 8-ГІДРОКСИХІНОЛІНУ

*Ніжинський державний університет імені Миколи Гоголя*

Похідні 8-гідроксихіноліну мають хіміотерапевтичну дію при багатьох бактеріологічних інфекціях та захворюваннях, виявляють фунгіцидну та антисептичну дії, а комплекс 8-гідроксихіноліну з алюмінієм використано як органічний світлодіод [1]. Тому синтез нових похідних 8-гідроксихіноліну та дослідження їх практично-корисних властивостей має не лише науковий, а й практичний інтерес.

З метою пошуку нових білдинг-блоків для створення поліфункціональних фармакологічних засобів нами були синтезовані сполуки (3–7) за наступною схемою:



де R: H (3a),  $CH_3$  (3b),  $OCH_3$  (3c).

При взаємодії 8-гідроксихіноліну (**1**) з надлишком  $K_2CO_3$  було одержано його калієву сіль (**2**). Алкілування останньої до сполук (**3–7**) проведено в середовищі ацетонітрилу.

Склад та будову одержаних речовин підтверджено елементним аналізом та даними ЯМР  $^1H$ -спектроскопії.

Прогнозування фармакологічної активності сполук (**3а–с, 4–7**) проведено за допомогою комп'ютерної програми Prediction of Activity spectra for Substances [2].

Знайдено, що сполуки (**3а–с**) з вірогідністю 80,1–85,5% можуть виявляти протисеборейні властивості та бути інгібіторами редуктази (75,2–88,1%). Крім того, сполуки (**3с, 4, 6, 7**) є інгібіторами фосфоліпази D (75,4–90,3%), та інгібіторами глутатіонтіостеарази (68,5–82,2%).

Гостру токсичність досліджуваних речовин розраховано в залежності від сумарної енергії зв'язків в молекулі речовин:

$$DL_{50}=0,00065*E_{зв}+1,570 \text{ (мг/кг),}$$

$$E_{зв}=\sum E_{зв_i} * n_i,$$

де  $E_{зв_i}$  – сумарна енергія зв'язків в молекулі (Ккал/моль);  $n_i$  – кількість зв'язків даного виду в молекулі речовини;  $E_{зв_i}$  – енергія зв'язку даного виду, що визначається по таблиці стандартних енергій зв'язків [2].

Встановлено, що токсичність сполук (**4-7**) коливається в межах від 4,29 до 4,72.

### Література

1. 8-Оксихинолин. Режим доступу: <https://ru.wikipedia.org/wiki/8-%D0%9E%D0%BA%D1%81%D0%B8%D1%85%D0%B8%D0%BD%D0%BE%D0%BB%D0%B8%D0%BD> – Назва з екрана.
2. Комп'ютерна програма Prediction of Activity spectra for Substances. Режим доступу: <http://pharmaexpert.ru/PASSonline/predict.php>. – Назва з екрана.
3. Пат. РФ, G01N33/00. Способ определения величины острой токсичности химических веществ по данным энергии связи в молекуле / Трушков В.Ф.; Клабукова Е.Р – № 2164684; заяв. 27.01.1998; опубл.13.09.1999.

УДК 546.74

Дроздова Н.И., Силиванова А.И.

### ПОТЕНЦИОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССОВ ГИДРОКСОКОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЯ ИОНОВ ЦИНКА В РАСТВОРАХ СОСТАВА $Zn^{2+} - SO_4^{2-} - H_2O - ЭДТА$

Многие ионы металлов проявляют выраженные комплексообразующие свойства. В водных средах ионы этих металлов гидратированы и способны образовывать различные гидроксокомплексы, состав которых зависит от кислотности раствора. Гидролитические реакции играют значимую роль в технологических, природных, биологических процессах. Большое внимание уделяется изучению сорбции тяжелых металлов в присутствии неорганических и органических лигандов как природного, так и техногенного происхождения. Среди органических веществ интерес представляют комплексоны и, в частности, динатриевая соль этилендиаминтетрауксусной кислоты (ЭДТА). Образование устойчивых комплексонов в растворе является конкурирующим по отношению к процессам гидроксокомплексообразования и сорбции тяжелых металлов.

Цель работы: изучить влияние хелатирующего реагента ЭДТА на состав и область устойчивого состояния гидроксокомплексов цинка в модельных растворах.

Объектом исследования являлись растворы с концентрацией ионов  $Zn^{2+}$   $10^{-1}$ – $10^{-5}$  М и ионной силой 0,01. Исследования проводили методом потенциометрического титрования с использованием рН-метра марки рН-150 М при постоянной температуре  $25 \pm 1$  °С. На основании полученных экспериментальных данных были построены кривые потенциометрического титрования. Точки эквивалентности на кривых отвечают критическим точкам, отделяющим одну область устойчивого поведения системы от другой подобной области. Плато связаны с буферными свойствами систем.

Анализ кривых титрования всех исследуемых растворов в целом указывал на существование в диапазоне рН от 2 до 11 двух скачков титрования. Первый скачок соответствовал нейтрализации свободной кислоты и образованию моногидроксокомплексов типа  $MeOH^+$  и наблюдался при значениях рН от 2 до 8. При ионной силе равной 0,01 и концентрации ионов цинка в растворе  $Zn^{2+}-SO_4^{2-}-H_2O$  от  $10^{-1}$ ,  $10^{-2}$ ,  $10^{-3}$ ,  $10^{-4}$ ,  $10^{-5}$  М осаждение  $Zn(OH)_2$  отмечалось при рН 11,2; 10,2; 10,5; 10,2; 10,9 соответственно.

При введении в раствор комплексона в соотношении 1:1 наблюдали изменение хода кривых титрования. При титровании 0,1 М раствора  $Zn^{2+}-SO_4^{2-}-H_2O \cdot ЭДТА$  с ионной силе, равной 0,01 (рисунок 1), также наблюдали два скачка титрования, однако, отмечалось уменьшение соотношения  $[OH^-]/[Me^{2+}]$ , соответствующего точкам  $pH_{эқв}$  при образовании гидролизных форм. Первый скачок фиксировали при соотношении  $[OH^-]/[Me^{2+}]$  от 0,03 до 0,5 ( $pH_{эқв}$  5), второй - при соотношении  $[OH^-]/[Me^{2+}]$  от 1,7 до 2,3 ( $pH_{эқв}$  9,3) сопровождался выпадением осадка – гидроокиси цинка  $Zn(OH)_2$ . Полное осаждение  $Zn(OH)_2$  в 0,1 М растворе в присутствии комплексона было достигнуто при рН около 11,2, в отсутствие ЭДТА - при рН 12,5.

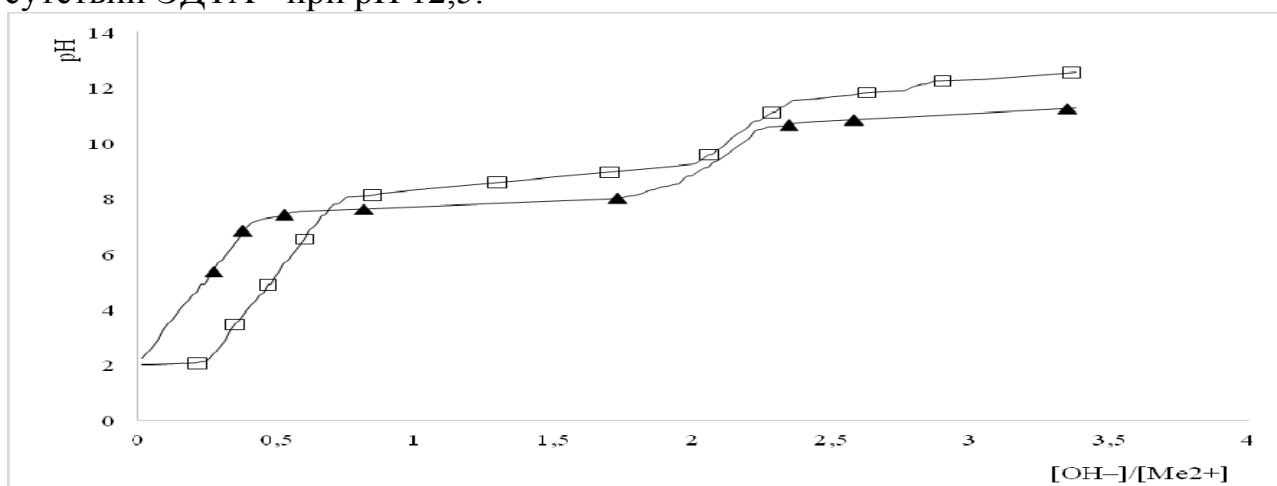


Рисунок 1 – Кривые потенциометрического титрования

0,1 М модельных растворов

Примечание–1–▲– $Zn^{2+}-SO_4^{2-}-H_2O \cdot ЭДТА$ , 2–□– $Zn^{2+}-SO_4^{2-}-H_2O$

Различия между средними значениями  $pH_{эқв}$  статистически значимы на уровне  $p=0,03$  (рисунок 2) .

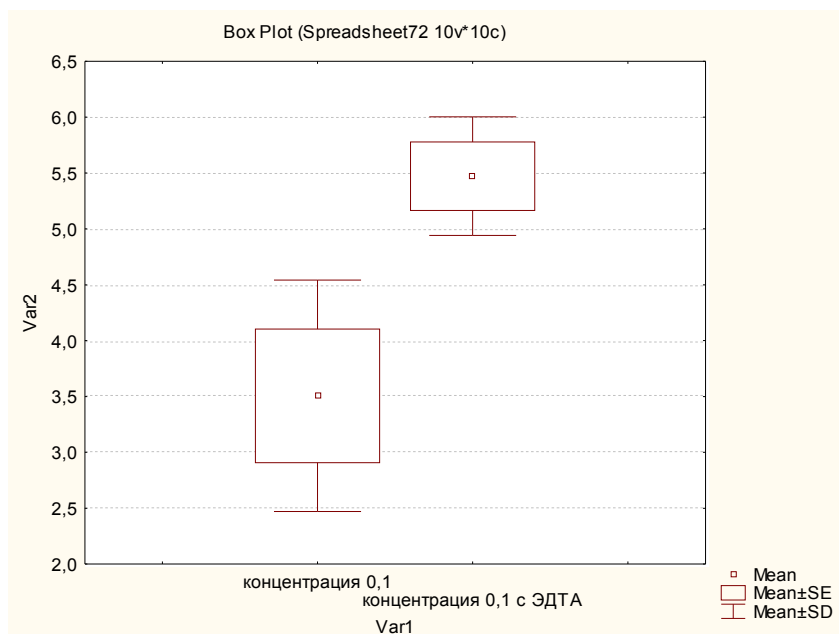


Рисунок 2 – Влияние комплексона ЭДТА на процесс осаждения ионов  $Zn^{2+}$  в растворе при концентрации  $10^{-1}$  М и ионной силе 0,01

Таким образом, установлено, что введение в раствор комплексона в соотношении металл : ЭДТА = 1 : 1 достоверно изменяет ход кривых титрования. В модельном эксперименте образование гидроксида в присутствии ЭДТА достигалось при меньших соотношения  $[OH^-]/[Me^{2+}]$  и более низких значениях pH среды, что важно при разработке методов осаждения металлов из природных и технологических вод.

УДК 546.742

**Зульфигаров А.О., Потаскалов В.А., Андрийко А.А.**

### **ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА ПИРОЛИЗА ПРИРОДНОГО ГРАФИТА, МОДИФИЦИРОВАННОГО КОМПЛЕКСНЫМ СОЕДИНЕНИЕМ 2Co-Ni С ТРИЭТАНОЛАМИНОМ**

*Национальный технический университет Украины "Киевский политехнический институт имени Игоря Сикорского", 03056, г. Киев, просп. Победы 37, sars2007@ukr.net*

Исследования влияния эффекта модификации поверхности графитов синтетического происхождения, используемых в литиевых источниках тока проводились многими исследователями. В частности использование в качестве модификаторов продуктов пиролиза комплексных соединений 2Co-Ni освещалось в работах [1, 2]. Но высокая стоимость углеродных материалов, полученных искусственным путем приводит к повышению стоимости готовых литиевых элементов. Поэтому интересным является поиск более экономически выгодных материалов, в частности, графитов природного происхождения.

Синтез полиядерных комплексов проводили из спиртовых растворов в две стадии. На первом этапе получали внутрикомплексное соединение кобальта (III) с аминспиртом триэтаноламином  $[CoH_2tetmHtetm]$  (где  $H_2tetm$  и  $Htetm$  - депротонированные формы триэтанолamina  $H_3tetm$   $N(CH_2CH_2OH)_3$ ), а на втором получали трёхядерный комплекс с никелем, в котором комплекс кобальта

играл роль сложного лиганда [3]. Дальнейшее нанесение на инертный носитель и графитовую матрицу (графит марки ГП-1) проводили из спиртовых растворов методом адсорбции и последующим пиролизом полученных образцов в инертной атмосфере высокочистого аргона.

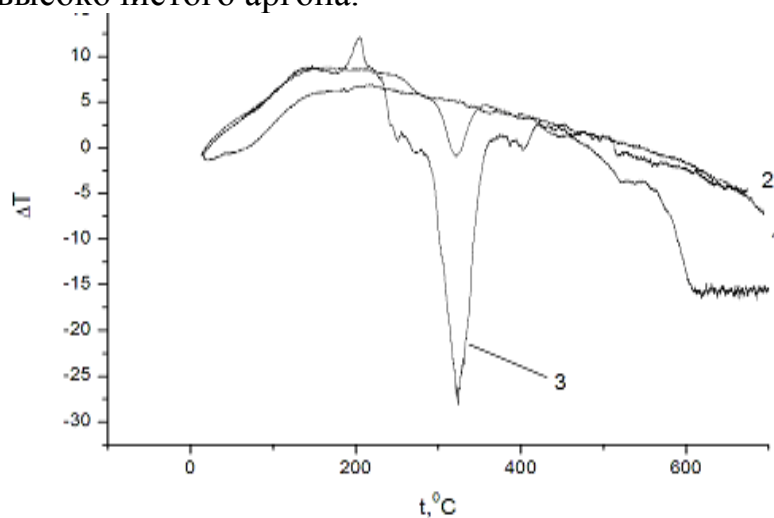


Рисунок 1 – ДТА кривые образцов: 1 – графит модифицированный триэтаноламиновым комплексом; 2 – немодифицированный графит; 3 – триэтаноламиновым комплекс, нанесенный на инертный носитель ( $\text{Al}_2\text{O}_3$ )

Термографические исследования проводились на лабораторной установке с использованием дифференциальной и интегральной термодпар с температурной компенсацией, а также регистрирующего устройства и специального программного обеспечения для ПК. Результаты термографических исследований пиролиза образцов показаны на рис. 1.

Согласно полученных результатов, характер процесса пиролиза зависит от материала подложки. Начало разложения органической части комплексного соединения кобальта(III)-никеля(II) с триэтаноламином происходит около  $230\text{ }^\circ\text{C}$ . Далее при температуре около  $320\text{ }^\circ\text{C}$  термодеструкция триэтаноламинового лиганда достигает завершающей стадии. Последующие преобразования с вероятным образованием активных центров в виде смешанных оксидов  $\text{Co(II)}$  и  $\text{Ni(II)}$  на поверхности подложки заканчиваются в районе  $400\text{ }^\circ\text{C}$ .

Главным отличием в полученных результатах стало то, что на поверхности инертной подложки оксида алюминия вышеуказанные процессы происходят интенсивней. Вероятно это обусловлено влиянием поверхности графита на процессы происходящие во время пиролиза.

Еще одним выводом из полученных термограмм можно сделать необходимость выбора температуры пиролиза так, чтобы во первых обеспечить полный распад комплекса и во вторых избежать восстановления полученных поверхностных оксидов до металлов, что исходя из температурных эффектов при  $500\text{--}600\text{ }^\circ\text{C}$  можно увидеть на рис. 1.

С целью идентификации полученные летучие продукты деструкции адсорбировали сорбентом марки Тенас на конце кварцевого реактора, после чего вымывали из него метиловым спиртом.

Полученный метанольный раствор исследовали методом газовой хроматографии с массдетектором, результаты которого приведены на рис. 2 и табл. 1.



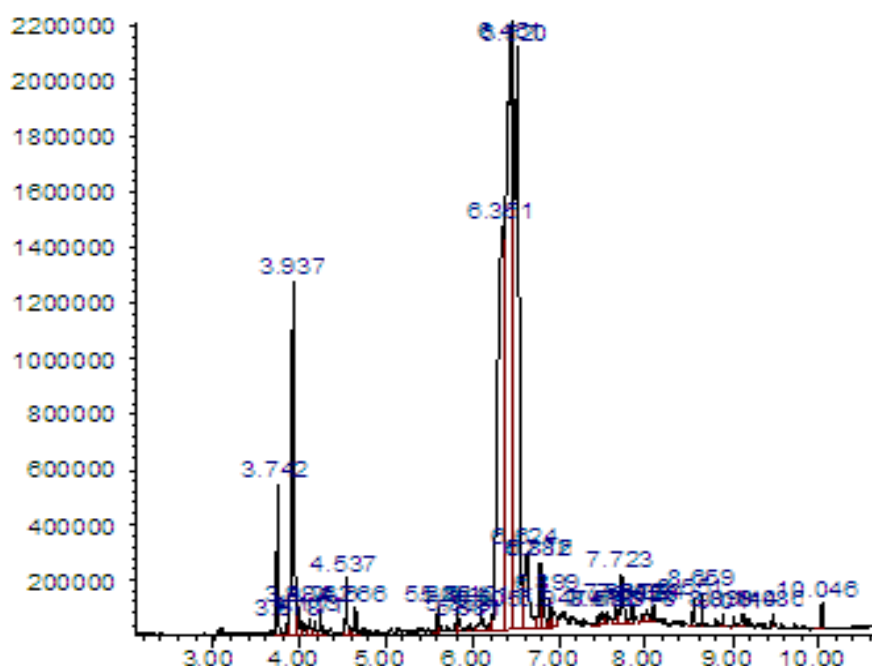


Рисунок 2 Хроматограмма анализа летучих продуктов пиролиза  $\{Ni[Co(H_2tetmHtetm)]_2\}(NO_3)_2$

Согласно полученных результатов основным продуктом термодеструкции комплексного соединения  $\{Ni[Co(H_2tetmHtetm)]_2\}(NO_3)_2$  стал триэтаноламин. Кроме того, в смеси летучих продуктов в достаточном количестве присутствует диэтаноламин, а также около 20% разнообразных гетероциклических соединений, в основном производных пиразина, с незначительными примесями производных имидазола, пиррола и морфолина.

Полученные результаты хроматографического анализа дают возможность более подробного изучения процессов модификации поверхности графитовых материалов продуктами пиролиза комплексного соединения кобальта(III)-никеля(II) с триэтаноламином с дальнейшей целью получения электрокатализаторов процессов переноса электронов в электрохимических системах.

Таблица 1

Результаты идентификации основных летучих продуктов пиролиза  $\{Ni[Co(H_2tetmHtetm)]_2\}(NO_3)_2$

Время удержания, минуты	Содержание, %	Соединение	Формулы соединений
3,937	6,97	Диэтанол-ламин	$HN(CH_2CH_2OH)_2$
6,451	74,19	Триэтанол-амин	$N(CH_2CH_2OH)_3$
6,622	4,55	N-(2-гидрокси-этил) формамид	

Поскольку природный графит марки ГП-1, используемый в качестве матрицы в проведенных испытаниях (Завальевское месторождение, Украина) исследовался в предыдущих работах [4,5], как более экономически целесообразный материал отрицательного электрода литий-ионных аккумуляторов по сравнению с синтетическим графитом, целесообразно дальнейшее исследование пиролизных процессов на его поверхности, для выяснения их механизма.

### Литература:

1. Андрийко О.О., Потаскалов В.А., Крюкова Е.А., Рейтер Л.Г., Чмиленко Н.А., Зулфигаров А.О. Модификация углеродных материалов отрицательного электрода литиевых аккумуляторов

- ляторов продуктами пиролиза комплексов 3-d металов с этаноламинами // Электрохимическая энергетика. - Саратов. 2005 – Т.5, №3. – с. 169-175.
2. Андрійко О.О., Потаскалов В.А., Зулфігаров А.О., Крюков О.А. Електрокаталітичні властивості піролізу гетерометальних триядерних комплексів Ni-2Co з етаноламінами у реакції електрохімічної інтеркаляції літію в графіт. // Науковий вісник Чернівецького університету. – Чернівці, 2008. – Вип. 399-400 - С. 80-82.
  3. В.А. Потаскалов, Н.И. Потаскалова, А.О. Зулфігаров, О.О. Андрійко Триядерні комплекси Co(III) з триетаноламіном. // Наукові вісті НТУУ "КПІ". – 2012, №3 – с.120-126.
  4. Потаскалов В.А., Зулфігаров А.О., Глоба Н.И., Андрійко О.О. Електрокаталізатори на углеродних носителях на основе продуктов пиролиза комплексов 3d-металлов с аминспиртами. // Вестник Национального технического Университета "ХПИ". – 2010. – №13. – С. 82-84.
  5. Zulfigarov A.O., Potaskalov V.A., Andriiko O.O. Effect of electrolyte composition on the electrochemical properties of both natural and synthetic graphite materials modified by 2Co(+3)-Ni(+2) complexes with aminoalcohols // Перспективні матеріали та процеси в технічній електрохімії, Монографія. – 2016. – с. 43-48.

**УДК 577.576.546.48.59.085:599**

**Kalinin I.V.**

## **ANTIOXIDANT PROPERTIES OF FOLIC ACID INTOXICATION DURING BY CADMIUM**

*National Pedagogical Dragomanov University, Ukraine*

The modern worsening environmental situation is one of the major concerns for the need of studying the mechanisms of adaptation of organisms to heavy metals as the most dangerous pollutants. High level of entering in organism causes significant metabolic disorders that ultimately affects health. Revelation of the mechanisms of adaptive reactions not possible without studying the antioxidant systems that are actively involved in biochemical processes of cell stress protection effects of various xenobiotics.

The folic acid have an important role in the reactions of synthesis of nucleic acids, proteins, metabolism of phospholipids, increases the catalytic activity of microsomal monooxygenases positively affects the function of liver, stimulates bile secretion, reduces fatty liver, caused by deficiency of choline in foods. The availability of molecules pterynoviy folic acid hydroxyl group and tertiary nitrogen atoms can bind heavy metal salts.

The aim of this work was to apply folic acid after influences of cadmium sulfate in liver of rats.

The investigation was performed on white nonlinear rats-male same age, weighing 180-200 g. They were formed in two groups of animals: the first - intact (control), second - the animals orally entered solution of cadmium sulfate in doses of 1 / 30 of LD50 - 14 days and then within 10 days Intoxicated animals received folic acid at a dose of 0.1 mg / kg. After the experiment, rats were decapitated under ether anesthesia and liver tissue were taken for further research. The work was done in accordance with the Council of Europe conventions on the protection of vertebrate animals used for scientific purposes.

Found that intoxication of cadmium sulfate resulted in decrease of reduced glutathione (GSH) in 2,5 times, reduce superoxidedismutase (SOD) and catalase (CAT) 2 times against the control group in rat liver. However, the use of folic acid after cadmium

poisoning contributed to the increase SOD activity by 32% and CAT activity by 28% and increasing the GSH content by 47% compared to Intoxicated animals.

Thus, the findings indicate a violation of metabolic processes in cadmium affected the liver and liver show the action of folic acid is probably caused by a positive impact on the regenerative processes and antioxidant properties.

УДК 546.3/4

Качан С.В.

## ХІМІЧНІ ФОРМИ БІОЕЛЕМЕНТІВ У ГРУНТАХ І ГРУНТОВИХ РОЗЧИНАХ

*Національний педагогічний університет імені М.П.Драгоманова*

У ґрунтах відбуваються фізичні, хімічні та біологічні процеси, від інтенсивності й співвідношення яких залежать форми, в яких перебувають хімічні елементи, їхня доступність для рослин, швидкість руху забруднювачів, стійкість ґрунтів. Довготривале ґрунтоутворення супроводжується міграцією у межах генетичних горизонтів ґрунтів, винесенням чи накопиченням біоелементів.

Нині в літературі відсутня інформація про склад і форми хімічних елементів у ґрунтових розчинах, особливо у зв'язку з величезною кількістю можливих комплексних сполук біометалів з органічною речовиною. Нас цікавили хімічні форми таких біометалів, як Mn, Ni, Co, Cu, Zn, Pb. Для цього проаналізовано хімічний склад ґрунтових розчинів основних типів ґрунтів України. Показано, що гумінові і фульвокислоти, виділені з ґрунтів різних ландшафтів, відрізняються, різна і стійкість їхніх комплексів з металами, виражена величинами констант стійкості.

Наприклад, для чорноземів звичайних Ni в основному знаходиться у вигляді фульватних комплексів (79,6%), Zn і Co – у вільній йонній формі (53,6 і 58,4% відповідно), Cu – у вигляді фульватних (47,2%) і гуматних комплексів (43,9%). Техногенно забруднені ґрунти промислових зон України містять найбільше Плюмбуму у формі нерозчинного карбонату  $PbCO_3$  (50,2%).

Відомо, що найбільшу загрозу серед токсичних металів несуть Pb, Cd і Hg, завдяки своїй здатності до біоаккумуляції. Крім того, для Меркурію недавно відкрита реакція біоакілування, внаслідок якої утворюються високотоксичні і легколетючі органічні сполуки типу диметилмеркурію  $(CH_3)_2Hg$ .

Установлено, що при збільшенні концентрації токсичних металів у 10 і 100 разів форми міграції у ґрунтових розчинах змінюються. Фульватні та гуматні комплекси практично відсутні, збільшується вміст вільних йонних форм, напр. у ґрунтовому розчині чорнозему звичайного міститься 0,058 мг/дм<sup>3</sup> Цинку і практично увесь він знаходиться у вигляді  $Zn^{2+}$  (94,3%).

Міграційну здатність металів можна оцінити коефіцієнтом водної міграції за Перельманом, і вона може сильно відрізнитись за однакового умісту в ґрунті, наприклад, для Купруму і Цинку. Найменш розчинного мікроелементу Купруму у ґрунтових розчинах може міститись від 3 до 135 мкг/дм<sup>3</sup>, а найбільш розчинного Цинку – від 4 до 270 мкг/дм<sup>3</sup>.

Установлено, що сполуки біометалів мають низькі міграційні властивості

за вертикальним профілем ґрунтів, головним чином акумулюються у поверхневому орному шарі і у більшій мірі є загрозою не з точки зору міграції у ґрунтові води, а із-за можливості транслокації у сільськогосподарські культури. Найбільший показник кумуляції виявляють Cd, Zn, Pb і Cu, значно менший – Mo, Fe, Ni, Co і Cr. Найменше акумулюється у ґрунтах Манган.

Розподіл, накопичення, міграція і перетворення хімічних форм при ізольованій та сумісній дії біометалів чи комбінованій дії біометалів з полютантами (пестицидами, радіонуклідами) – ці питання потребують детального і глибокого вирішення у найближчий час.

Пошуки аналітичних методів визначення сумарного і роздільного вмістів біометалів тривають. Серед таких надійними і недорогими для оперативного контролю, тобто безпосередньо на місці пробовідбору, є фотометричні і екстракційно-фотометричні методики.

Таким чином, нами розглянуті хімічні форми існування мікроелементів і токсичних елементів у ґрунтах, із врахуванням сукупності всіх розчинних і нерозчинних форм та їхньої поширеності. Інформативність такого підходу доповнена розглядом кількісних параметрів – констант стійкості чи нестійкості комплексів і добутоків розчинності молорозчинних сполук.

УДК 546.733+547.461.2+547.304.2

<sup>1</sup>Качоровская О.П.,  
<sup>2</sup>Трачевский В.В., <sup>3</sup>Гребенюк А.Г.

## УСЛОВИЯ ОБРАЗОВАНИЯ ВНЕШНЕСФЕРНЫХ И РАЗНОЛИГАНДНЫХ КОМПЛЕКСОВ КОБАЛЬТА(III) ПО ДАННЫМ ЯМР

<sup>1</sup>Национальный технический университет Украины "КПИ им. Игоря Сикорского"

<sup>2</sup>Технический Центр НАН Украины

<sup>3</sup>Институт химии поверхности имени А.А. Чуйко НАН Украины

Выявление закономерностей образования разнолигандных и внешнесферных комплексов переходных металлов с учетом маршрутов протекания с участием молекул растворителя и других компонентов среды разной функциональной принадлежности является одной из важнейших задач координационной химии. Процессы образования такого рода соединений, механизмы их формирования и особенности геометрического и электронного строения комплексов имеют не только теоретическую, но и практическую значимость в различных технологических процессах. Исследования реакций комплексообразования в конденсированных средах (особенно в тканях живых организмов) являются важными и перспективными в плане подбора условий для целенаправленного получения соединений с заданными свойствами, в то же время сведения о природе продуктов таких взаимодействий отрывочны и недостаточны для сознательного воплощения.

В настоящей работе методами ЯМР <sup>1</sup>H, <sup>13</sup>C, <sup>14</sup>N, <sup>59</sup>Co, ЭСП и квантово-химического моделирования комплексно изучены взаимодействия в системах [CoOx<sub>3</sub><sup>3-</sup> + dmen] (1) и [CoOx<sub>3</sub><sup>3-</sup> + CoEn<sub>3</sub><sup>3+</sup>] (2) (Ox - C<sub>2</sub>H<sub>4</sub><sup>2-</sup>; dmen - CH<sub>3</sub>NHC<sub>2</sub>H<sub>4</sub>NHCH<sub>3</sub>; En - NH<sub>2</sub>C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>NH<sub>2</sub>).

Для **1** по данным ЯМР  $^1\text{H}$ ,  $^{13}\text{C}$ ,  $^{14}\text{N}$  выявлено образование как внешнесферных  $(\text{CoOx}_3^{3-})(\text{dmen})_n$  ( $n = 1 \div 3$ ), так и внутрисферных комплексов: разнолигандного состава  $[\text{CoOx}_2\text{dmen}]^-$ ,  $[\text{CoOx}(\text{dmen})_2]^+$  и продуктов полного замещения оксалат-ионов молекулами  $N,N'$ -диметилэтилендиамина  $[\text{Co}(\text{dmen})_3]^{3+}$ .

Высокоинформативность спектров ЯМР  $^{59}\text{Co}$  позволила выявить изменения донорного окружения центрального атома координационных соединений. Наблюдаемый *increment* между значениями химических сдвигов сигналов ( $\delta$  м.д.) свидетельствует о ступенчатом замещении оксалат-ионов молекулами  $N,N'$ -диметилэтилендиамина. При введении в растворы катионов с различными структурообразующими атомами (например, тетраалкиламмония, тетраалкилфосфония, тетрафенилфосфония), отмечено изменение параметров спектров ЯМР, свидетельствующие об образовании ионных ассоциатов и сольваторазделенных ионных пар.

В системе **2** обнаружено не только перераспределение лигандов между координационными сферами исходных комплексов, но и формирование полиядерного соединения с преобразованием бидентатных лигандов этилендиамина и оксалат-иона в мостиковые в результате взаимодействия первоначально образующихся разнолигандных  $[\text{CoOx}_2\text{En}]^-$  и  $[\text{CoOxEn}_2]^+$ .

Квантово-химическое моделирование электронного строения компонентов структур  $[\text{CoOx}_2\text{En}]^-$  и  $[\text{CoOxEn}_2]^+$  указывает, что движущей силой формирования биядерного соединения является результирующее усреднение электронной плотности фрагмента, что подтверждается доминированием в спектрах ЯМР  $^{59}\text{Co}$  линии с химическим сдвигом  $\delta$  10250 м.д. при эволюции картины с уменьшением интенсивности сигналов с  $\delta$  11700 м.д. ( $\text{CoOx}_2\text{En}^-$ ) и  $\delta$  9400 м.д. ( $\text{CoOxEn}_2^+$ ).

УДК 547.854+4:615.31

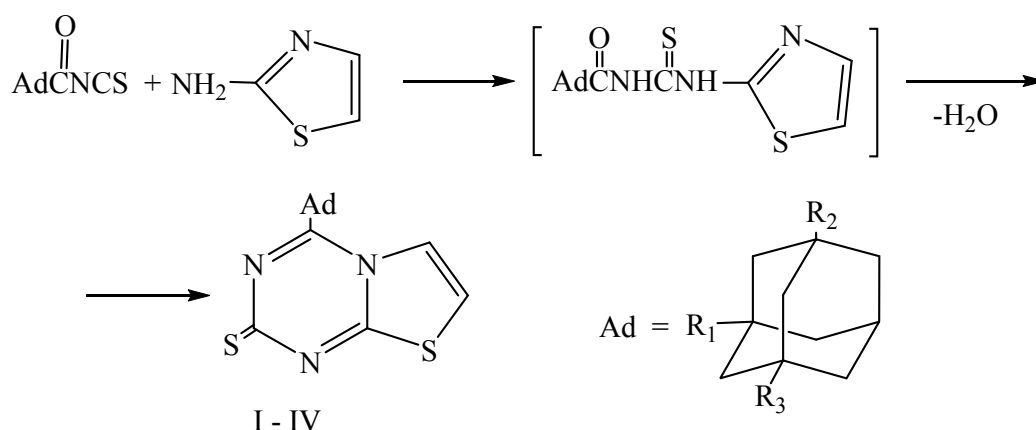
Клімко Ю.Є., Семенова І.Г.

## КОНДЕНСАЦІЯ АДАМАНТОЇЛІЗОТІОЦІАНАТІВ З 2-АМІНОТІАЗОЛОМ

*Національний технічний університет України "Київський політехнічний інститут"*

Похідні тіазолу проявляють фармакологічну активність і тому знайшли застосування як антимікробні, протівірусні та антигістамінні препарати, діуретики та мітодепресанти.

Нами винайдено, що при взаємодії адамантоїлізотіоціанатів з 2-амінотіазолом у безводному ацетоні проходить самовільна конденсація проміжних N-ацилтіосечовин у відповідні алкіл-5-тіоксо-3-тіа-4,6,7а-триазаїндени (I-V) за схемою:



I:  $R_1=R_2=R_3=H$ ; II:  $R_1=R_2=H, R_3=CH_3$ ; III:  $R_1=H, R_2=R_3=CH_3$ ;  
 IV:  $R_1=R_2=R_3=CH_3$ ; V:  $R_1=R_2=H, R_3=CH_3, p-Ph$

Виходи продуктів реакції становили від 65 до 78%. Їх структура була встановлена методами ІЧ, ЯМР та мас-спектрометрії.

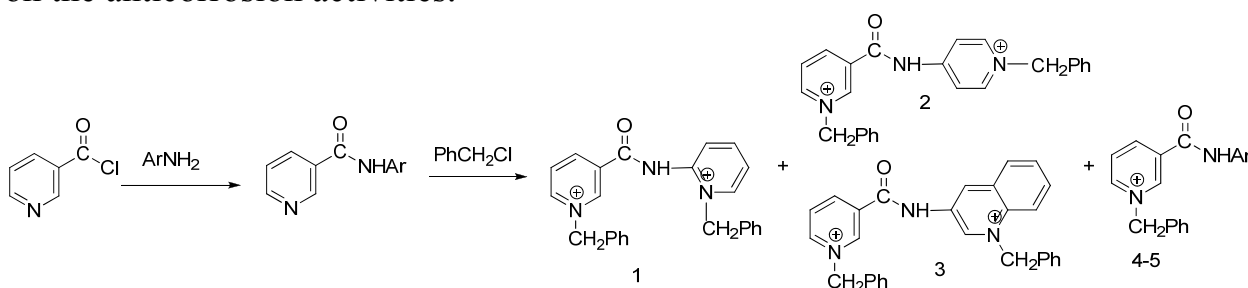
UDC 547.826+547.327+547.305.2

**Klimko Yu.E.,**  
**Pisanenko D.A., Gaidai O.V.**

### CORROSION-PROTECTING PROPERTIES OF SOME QUATERNIZED N-ARYLNICOTINAMIDES. SYNTHESIS AND QUANTUM MECHANICAL STUDIES

The corrosion-protecting properties of adsorption inhibitors can be enhanced by using quaternized pyridine derivatives with two adsorption centres or a lone electron pair on the nitrogen atom in these compounds. Increasing of corrosion-protecting properties can be connected also with a donor-acceptor interaction between the oxo group and corroding metal. Creation of additional adsorption centres in these compounds will allow obtaining substances, the inhibiting action of which can be raised as a result of summation of several effects.

As a prolongation of the work [1] on the synthesis and studying of corrosion-protecting properties of such compounds some bis-quaternary pyridinium salts (1-5) we have synthesized to investigate the effects of structural modification of these salts on the anticorrosion activities.



Ar=2-Pyl(1), 4-Pyl, 3-Quinyl(3), 2-Naphthyl(4), 1-Naphthyl(5)

As seen from the figure below we have synthesized mono- and bis quaternized N-arylnicotinamides with yields of 60-80% that found high corrosion-protecting properties of acid corrosion of steel. Calculations of quantum-chemical descriptors these compounds (B3LYP / 6-31G (d), Firefly (GAMESS)), which are presented in

the table. The literature provides linear dependence of inhibition of  $\Delta E$  and  $\Delta N$  (share electrons transferred) from  $K_{kor} = 0.7 \div 0.9$  [2].

To estimate corrosion-protecting properties of synthesized compounds 1-5, we studied their influence on the corrosion of 08 kp steel in 20% HCl at 20-80°C, determining the inhibition coefficient  $\gamma$  and the degree of protection  $Z$ . In summary the highest  $\gamma=326,2$  and  $Z=99,7$  at 80°C were established for salt 5.

Sub.	[ $\gamma$ ]	E MO, eV		$\Delta E$ (R=0.96)	$\Delta N$ (R=0.93)	$e^{\Delta E}$ (R=0.99)
		HOMO	LUMO			
1	1.71	-14.19	-4.84	9.35	-0.27	11487
2	6.00	-13.96	-4.77	9.19	-0.26	9787
3	7.56	-14.33	-5.17	9.16	-0.30	9500
4	21.60	-9.89	-2.50	7.39	0.11	1618
5	22.57	-10.13	-2.49	7.64	0.09	2078

### Література

1. Pisanenko D.A., Klimko Yu.E., Lichnitskii K.V. Russ.J.Appl.Chem. 2011, 84, pp.1445-1447.
2. Sastri V.S., Perumareddi J.R. Corrosion Science Section, 1997, vol.53, №8, pp.617-622.

УДК 544.526.5

**Кобаса І.М.<sup>1</sup>,  
Кондратьєва І.В.<sup>1</sup>, Курек С.С.<sup>2</sup>**

## СЕНСИБІЛІЗАЦІЯ ТИТАН(IV) ОКСИДУ ЦВІТЕР-ІОННИМ БАРВНИКОМ У ФОТОКАТАЛІТИЧНОМУ ПРОЦЕСІ ОКИСНЕННЯ ЙОДИД ІОНІВ

<sup>1</sup>Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

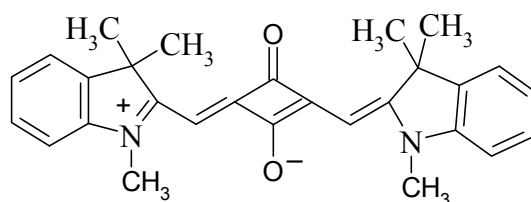
<sup>2</sup>Краківська політехніка імені Тадеуша Костюшки

Пошук ефективних фотокаталітичних систем і зараз знаходиться на стадії інтенсивного дослідження. Більшість наукових пошуків зосереджені на вирішенні таких актуальних проблем як фотокаталітичне перетворення і запасаання сонячної енергії, а також економічно доцільний фотокаталітичний синтез цінних хімічних продуктів, фоторозклад токсичних відходів виробництв, як один із найголовніших напрямків розв'язання екологічних проблем, тощо.

Найважливішою передумовою досягнення успіхів зі згаданих напрямків є створення таких фотокаталітичних систем, які забезпечують перебіг відповідних хімічних реакцій з високими квантовими виходами.

Серед світлочутливих напівпровідникових систем особливе місце посідають системи, які складаються із напівпровідникового фотокаталізатора, зокрема  $TiO_2$ , та барвника-сенсibilізатора (Б), що дозволяють не тільки підвищити фотокаталітичну активність, але й розширити спектральний діапазон його світлочутливості. В таких гетероструктурах (ГС) завдяки тісному контакту між фотокаталізатором і сенсibilізатором усуваються кінетичні ускладнення, створюються умови для більш повного поглинання світла, виключається ефект внутрішньої світлофільтрації.

У даній роботі одержані світлочутливі гетероструктури на основі титан(IV) оксиду і сенсibilізатора – цвітер-іонного барвника



Установлено вплив структури барвника на його спектральні й електрохімічні характеристики. Методом циклічної вольтамперометрії визначені потенціали окиснення і відновлення досліджуваного барвника. Розраховані значення енергетичних рівнів HOMO і LUMO і зроблено прогноз щодо можливості використання цвітер-іонного барвника як сенсibilізатора титан(IV) оксиду. Досліджена фотокаталітична активність гетероструктур Б/TiO<sub>2</sub> в реакції окиснення йодид іонів залежно від концентрації барвника.

УДК 678.01:66.095.34:547.539.1

**Kobzar Ya.L., Tkachenko I.M.,  
Shekera O.V., Shevchenko V.V.**

## **SYNTHESIS OF ISOMERIC CORE-FLUORINATED DIHYDROXYL-SUBSTITUTED AZOMETHINE-CONTAINING MONOMERS**

*Institute of Macromolecular Chemistry of National Academy of Sciences of Ukraine,  
48 Kharkivske shausse, Kyiv 02160, Ukraine*

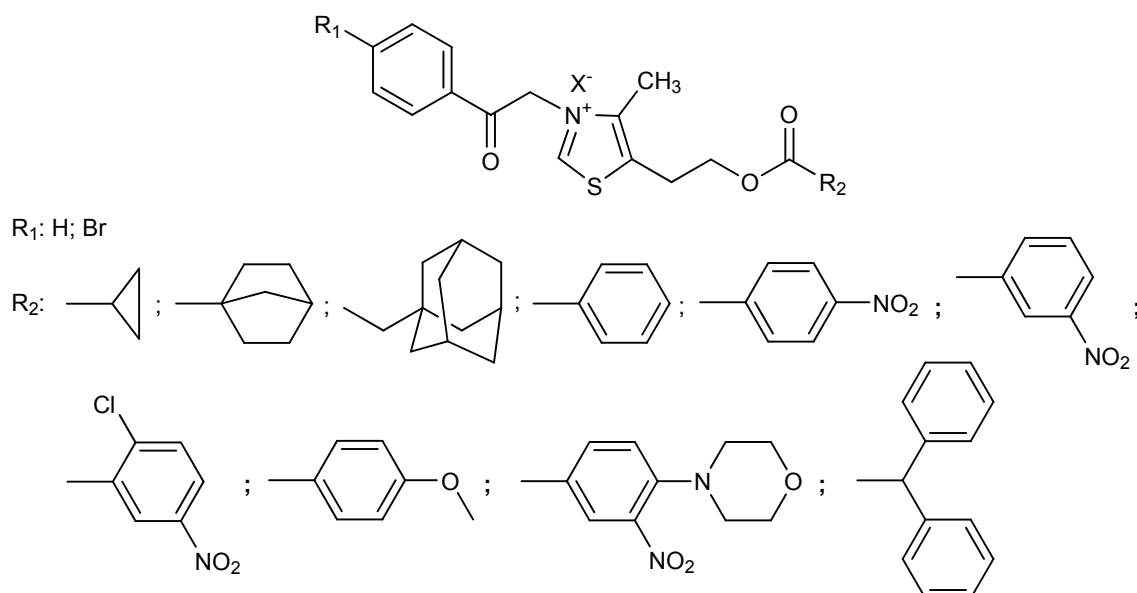
The presence of the azomethine groups in the structure of the organic compounds can endow them various excellent properties such as good thermal and environmental stability, mechanical strength, nonlinear optical properties, semiconducting and liquid crystalline properties, ability to form metal chelates. The incorporation two or more reactive groups into the such compounds makes it possible to use their as monomers for obtain heat-resistant polymeric materials with low dielectric constants and the values of optical loss. A major drawback associated with polyazomethines (PAMs), which were obtained by interaction of diamine with dialdehyde, is their limited solubility in most of the common organic solvents. Alternatively, PAMs can be obtained by using of azomethine-containing compounds (like bis-diols, bis-phenols, etc.). The incorporation of the flexible ether linkages and isomeric fragments in a polymer backbone imparts higher segmental mobility to the polymers and reduces density packing of their polymer chains and so simultaneously enhances their solubility and reduces their glass transition temperatures. The introduction of fluorine atoms into the polymers structure enhances thermal stability and chemical resistance, as well as allows reducing their dielectric constant, the refractive index, optical and dielectric losses.

The aim of this study was to synthesis isomeric core-fluorinated dihydroxyl-substituted azomethine-containing monomers with 1,4-tetrafluorobenzene (TFB) or 4,4'-octafluorobiphenylene (OFB) dioxyphenylene central units as monomers for preparation of aromatic PAMs.

New azomethine-containing monomers **6-9** were synthesized by a condensation reaction between diamines **1-4** and 2-hydroxybenzaldehyde **5** according to the following scheme:







Встановлено, що сполуки, які досліджувались, здатні проявляти інгібувальну дію на бутирилхолінестеразу. Наявність атома бром у *para*-положенні фенацільного фрагменту не є суттєвим для інгібування. Найслабший інгібувальний вплив продемонструвала естерна похідна з циклопропанільним фрагментом, тоді як сполуки з біцикло[2,2,1]гептан-1-ільним, 1-адамантилетильним, фенільним, 4-нітрофенільним, 3-нітрофенільним, 2-хлор-5-нітрофенільним, 4-метоксифенільним та 4-морфоліно-3-нітрофенільним фрагментами мають значення IC<sub>50</sub> в інтервалі від 1 мкМ до 20 мкМ. Ефективним інгібітором бутирилхолінестерази з низьким мікромаларним значенням IC<sub>50</sub> та значною селективністю перед ацетилхолінестеразою виявилась сполука з дифенілметильним замісником. Шляхом облаштування інгібітора в область активного центру ензиму (AutoDock 4.2, PDB код ензиму 4BDS) отримано модель ензим-інгібіторного комплексу, в якому цей інгібітор взаємодіє з амінокислотними залишками аніонного, естеразного та оксианіонного центрів. Результати проведеного нами дослідження демонструють перспективність *N*-заміщених солей тiazолу та інших структурних тiazолових аналогів вітаміну В<sub>1</sub> як потенційних інгібіторів бутирилхолінестерази.

### Література

1. Reid G. A. Butyrylcholinesterase-knockout reduces brain deposition of fibrillar  $\beta$ -amyloid in an Alzheimer mouse model / G. A. Reid, S. Darvesh. // *Neuroscience*. – 2015. – Vol. 298. p. 424–435.
2. Undurti N. Das. Acetylcholinesterase and butyrylcholinesterase as possible markers of low-grade systemic inflammation / Undurti N. Das. // *Med Sci Monit*. – 2007. – Vol. 13, № 12. – p. 214–221.
3. Mkrtychyan G. Molecular mechanisms of the non-coenzyme action of thiamin in brain: biochemical, structural and pathway analysis. / G. Mkrtychyan, V. Aleshin, Y. Parkhomenko, T. Kaehne et al. // *Scientific reports*. – 2015. – Vol. 5. p. 12583.
4. Alspach J. D. Inhibition of acetylcholinesterase by thiamine. A structure-function study. / J. D. Alspach, L. L. Igraham. // *Journal of medicinal chemistry*. – 1977. – Vol. 20, № 1. – p. 161–164.
5. Петров С. А. Влияние тиамин и его производных на активность ацетилхолинэстеразы мозга и крови белых мышей / С. А. Петров, Н. Л. Розанов, Д. В. Тищенко. // *Укр. биохим. журн.* — Т. 59. – 1987. – № 3. – С. 76–79.

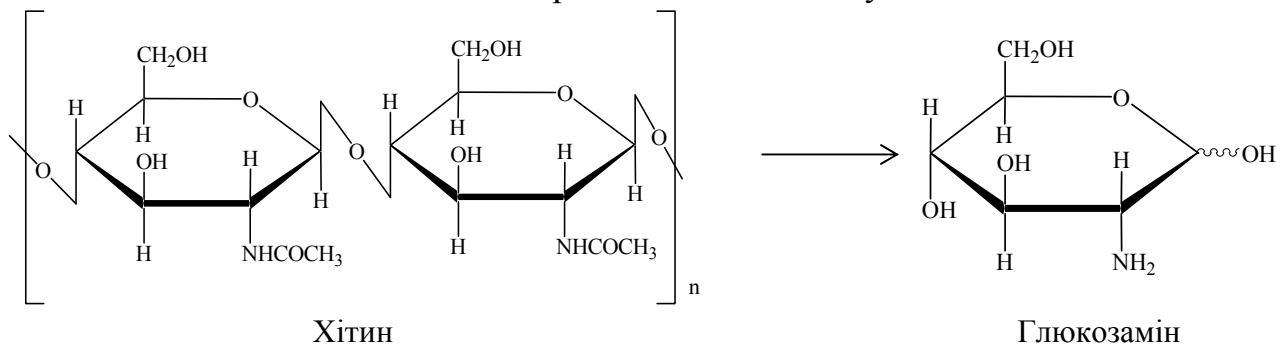
## ГЛЮКОЗАМІН З ПРИРОДНОЇ СИРОВИНИ

Національний педагогічний університет імені М.П. Драгоманова  
м. Київ, вул. Пирогова, 9

Хімічні аспекти отримання біологічно активних органічних речовин стосуються не тільки синтезу цих речовин. Актуальними залишаються проблеми виділення таких речовин з природної сировини, пошук нових відновлювальних природних ресурсів, біодеградуючих матеріалів.

Значний інтерес для хіміків як відновлювальний природний ресурс становить природний біополімер хітин – за розповсюдженням у природі він є другим після целюлози. Загальна репродукція хітину в світовому океані оцінюється в 2,3 млрд. т на рік. Це може забезпечити світовий потенціал виробництва цього біополімеру у кількостях 150-200 тис. т в рік. Найбільш доступним для промислового освоєння джерелом хітину є панцирі промислових ракоподібних. Можливо також використання кальмарів і вищих грибів, комах. Уже сьогодні хітин і його похідне хітозан широко використовують у різних галузях промисловості, медицині. Мономером хітину є глюкозамін (2-аміно-2-дезоксид-*D*-глюкопіраноза), який у свою чергу має величезне значення для кістково-хрящової системи людини: міститься в синовіальній рідині і в хрящах, є універсальним попередником і будівельним блоком всіх необхідних суглобових мастил і тканин амортизаторів (гіалуронова кислота, хондроїтин сульфат, протеоглікани). На основі глюкозаміну створено ряд лікарських препаратів. Тому було досліджено можливість отримання глюкозаміну гідролізом хітину, отриманого з різних природних джерел: панцирів креветок, підмору бджіл, висушених шампінйонів.

Схема одержання глюкозаміну



На першій стадії депротейнізацією і демінералізацією отримали хітин. Для отримання глюкозаміну очищений хітин обробляли хлоридною кислотою 2,5 годин при нагріванні. Отриманий розчин знебарвлювали вугіллям (1 година при 60° С). Фільтрат випарювали у вакуумі при 50 °С. Кристали глюкозаміну гідрохлориду промивали 95% спиртом. Вихід продукту становив 70% (з панцирів креветок). Будову глюкозаміну підтвердили методами ЯМР-спектроскопії та хромато-мас спектроскопії.

**СЕНСИБІЛІЗАЦІЯ ТИТАН(IV) ОКСИДУ  
1,5-ДИГІДРОКСИ-9,10-АНТРАХІНОНОМ**<sup>1</sup>Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича<sup>2</sup>Ягелонський університет (м. Краків, Польща)

Похідні 9,10-антрахінону (рис. 1) є одними з найважливіших класів органічних сполук, що знайшли застосування в різноманітних галузях промисловості. Їх використовують для отримання органічних барвників, пігментів, люмінофорів, для синтезу лікарських і природних сполук, антибіотиків, в якості каталізаторів, аналітичних реагентів, антиоксидантів, засобів захисту рослин, фоторезистів тощо. Достатньо велика кількість сполук антрахінонового ряду міститься в рослинах, тваринах, а також мікроорганізмах, серед них природні антибіотики антрацикліни та кідиміцини.

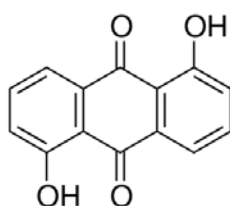


Рис. 1. 1,5-дигідрокси-9,10-антрахінон (антраруфін)

У зв'язку з цим все більше зростає інтерес до похідних антрахінону як сполук, перспективних для багатопланового використання. Це пов'язано в першу чергу також з можливістю застосування їх як сенсibilізаторів, які використовуються в напівпровідниковому фотокаталізі для створення ефективних світлочутливих систем. Підбір комплексу матеріалів "широкозонний оксидний напівпровідник –  $\text{TiO}_2$ /барвник-сенсibilізатор" дозволяє оптимізувати процеси електронного переносу в системі та використати основні переваги фотокаталізатора  $\text{TiO}_2$  – дешевизну і безпечність матеріалів та технологій.

В даній роботі показана можливість використання барвника 1,5-дигідрокси-9,10-антрахінону (антраруфіну) як барвника-сенсibilізатора Титан(IV) оксиду, вивчено його сенсibilізуюча здатність.

Фотокаталітичні системи, які складаються із барвника і напівпровідника ( $\text{B/TiO}_2$ ), були виготовлені шляхом обробки суспензій Титан(IV) оксиду спиртовим розчином барвника за кімнатної температури з наступним повільним видаленням розчинника. Щоб ці матеріали можна було використовувати в середовищах, які добре розчиняють барвник, наприклад в спиртових, вони захищалися плівкою поліепоксипропілкарбазолу (ПЕПК), яка наносилась із бензольних розчинів цього полімеру. Встановлено, що при вмісті ПЕПК на  $\text{TiO}_2$  0,02-0,2 мг/г плівка запобігає вимиванню барвника із гетероструктури, не заважаючи при цьому здійсненню фотокаталітичного процесу між розчинником, напівпровідником і адсорбованим на ньому барвником.

З метою встановлення впливу барвника на  $\text{TiO}_2$ , вивчення оптичних властивостей та з'ясування поведінки системи барвник/ $\text{TiO}_2$  проведено спектральні дослідження антраруфіну у розчині й у гетероструктурі. Зіставлення спектрів погли-

нання розчину барвника та спектрів поглинання синтезованих гетероструктур засвідчує батохромний зсув у видиму область на 38 – 40 нм.

При додаванні до ацетонового розчину антраруфіну нанорозмірного  $\text{TiO}_2$  відбувається зменшення інтенсивності флуоресценції барвника, тобто відбувається його затухання, причому інтенсивність його зменшується від  $7 \cdot 10^6$  в.о. до  $0,5 \cdot 10^6$  в.о. Це говорить про сильний вплив напівпровідника, а отже, і про міцну взаємодію між барвником і напівпровідником. Відбувається суттєвий зсув Стокса у батохромну область (з 416 нм до 578 нм (для чистого барвника) та до 580 нм для системи барвник/напівпровідник) (рис. 2). Зсув зафіксовано на 162 нм (164 нм у випадку з колоїдним  $\text{TiO}_2$ ) у видиму область.

Відомо, що сам фотокаталізатор Титан(IV) оксид володіє значеннями фотоструму в області поглинання (330 – 410 нм). Аналіз результатів фотоелектрохімічного методу дослідження показав, що завдяки нанесенню антраруфіну на  $\text{TiO}_2$  суттєво збільшується область поглинання напівпровідника (рис. 2).

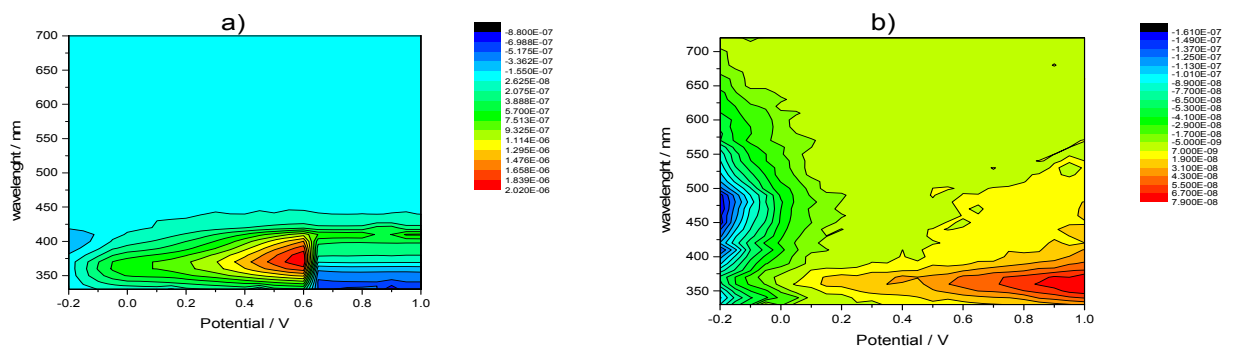


Рис. 2. Двохвимірні проекції на площину: а) Титан(IV) оксид Р 25 немодифікований барвником; б) Титан(IV) оксид, модифікований барвником антракуїном

Отже, синтезовано гетероструктури на основі  $\text{TiO}_2$  та барвника антракуїну, визначено їх спектри поглинання, які засвідчують суттєвий їх зсув у видиму область. З'ясовано, що барвник антракуїн володіє фотосенсибілізуючою здатністю і суттєво збільшує область поглинання  $\text{TiO}_2$  в діапазоні від 400 нм до 700 нм.

УДК 54-328:543.06

Кухельна Н.В.

## ЗАСТОСУВАННЯ ГЕТЕРОПОЛІКИСЛОТ У ЯКІСНОМУ ТА КІЛЬКІСНОМУ АНАЛІЗІ

*Національний педагогічний університет імені М.П.Драгоманова*

Комплексні сполуки посідають одне з чільних місць у дослідженнях якісного та кількісного аналізу неорганічних сполук. Особливе місце серед них належить гетерополікислотам, які можна розглядати як продукт часткового або повного заміщення атомів Оксигену оксигеновмісних кислот на залишки інших кислот. Найчастіше зустрічаються подібні заміщення в кислотних залишках ортофосфатної, сульфатної, арсенатної, ортосилікатної кислот на залишки сульфідної, молібдатної, вольфраматної кислот.

Деякі з цих комплексів мають характерні забарвлення, що є незамінним у фотометричних дослідженнях. Так, комплекси тетратримодібдатоортофосфат-

ної, тетратримолібдатортоарсенатної та тетратримолібтанортосилікатної кислот мають жовте забарвлення, а їх відновлені форми – синє. Саме на утворенні таких забарвлених комплексів гетерополікислот базуються фотометричні методи визначення P, Si, As та інших елементів.

Тривалий час на нашій кафедрі проводились дослідження вмісту фосфатів у питній воді, воді прісних водойм та у мийних засобах. Ці визначення стали складовою навчального процесу і передбачені курсами "Хімія навколишнього середовища", "Фізико-хімічні методи дослідження", "Фізико-хімічний аналіз", а також стали предметом наукових досліджень студентів.

Так, отримані нами результати дослідження вмісту фосфатів та поліфосфатів у мийних засобах вказують на їх наявність у складі пральних порошків: "Ушастый нянь", "Ariel", "Rex", та рідких мийних засобів лінії "GALA".

Тривалі спостереження за складом питної води у водогонах м. Києва, засвідчують, що вміст у ній фосфатів знаходиться на межі ГДК -3,5 мг/л. Разом з тим, у водогони цілого ряду населених пунктів поблизу Києва (Ірпінь, Буча, Гостомель, Ворзель, Немішаєве) надходить вода, що за вмістом фосфатів перевищує ГДК у 8 разів. Такий стан речей можна пояснити тим, що водопостачання цих міст забезпечується за рахунок підземних вод, а піщані ґрунти, що характерні для цієї місцевості, не затримують надходження до водоносних шарів фосфатів, які надходять у великій кількості із мийних засобів, через стокові ями.

Дослідження вмісту фосфатів у водах Дніпра упродовж 3 років засвідчує стабільну тенденцію до їх збільшення, навіть без сезонних коливань. Довготривалі спостереження дають змогу стверджувати, що джерелом надходження фосфатів до річок є мийні засоби, що потрапляють через каналізаційні стоки, а це призводить до процесів евтрофікації, бурхливого розвитку синьо-зелених водоростей і отруєння продуктами їх життєдіяльності води.

УДК 546.17+541.49+577.15/17

**Москаленко О.В.,  
Суховєєв В.В., Циганков С.А..**

## **ХАРАКТЕРИСТИКА ТОКСИКОЛОГІЧНИХ ПОКАЗНИКІВ ОРГАНОДИТІОФОСФАТІВ МЕТАЛІВ ЯК ПРИСАДОК ДО ОЛИВ**

*Ніжинський державний університет імені Миколи Гоголя,  
вул. Графська, 2, м. Ніжин, Україна*

Пошук та впровадження ефективних поліфункціональних присадок до олив є актуальною задачею сучасної нафтохімії. Це обумовлено в першу чергу підвищенням надійності в експлуатації вузлів та механізмів. Але крім експлуатаційних характеристик вони повинні мати низьку токсичність з метою запобігання негативного впливу на оточуюче середовище. Одними із перспективних присадок є металокомплекси на основі похідних дитіофосфатної кислоти.

Для оцінки токсикологічних показників обрано органодитіофосфати металів загальної формули:



де R: CH<sub>3</sub>(I); n-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>(II); n-C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>(III); ізо-C<sub>3</sub>H<sub>7</sub>(IV); трет-C<sub>4</sub>H<sub>9</sub>(V); цикло-C<sub>6</sub>H<sub>11</sub>(VI);  
M: Mo; Cu; Co; Ni; Zn.

Прогнозування можливої токсичності органодиніофосфатів металів (I–VI) здійснено за допомогою комп'ютерного моделювання. Для цього використано програму GUSAR [1].

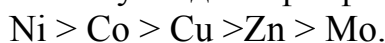
Встановлено, що синтезовані речовини належать, як правило, до 4–5 класів токсичності за класифікацією К.К. Сидорова [2]. Так, аномально низьку дозу  $LD_{50}$  виявив лише метилдиніофосфат молібдену при підшкірному введенні, яка може складати 15,34 мг/кг маси щурів (2 клас токсичності), а при внутрішньо-черевному – 42,92 мг/кг (3 клас). Аномально високі дози  $LD_{50}$  виявив *n*-бутилдиніофосфат молібдену при пероральному введенні (5022 мг/кг) та підшкірно (4157 мг/кг), а також циклогексилдиніофосфат молібдену при пероральному введенні (5930 мг/кг).

Органодиніофосфати купруму, кобальту, ніколу та цинку можуть бути віднесені до 4 чи 5 класу токсичності, бо  $LD_{50}$  для цих металохелатів може коливатися в межах від 361,2 до 607,9 мг/кг маси щурів.

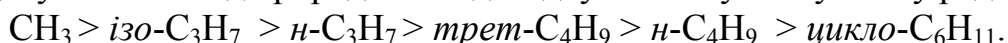
Зменшення токсичності метилдиніофосфатів металів залежно від природи центрального атома відбувається у ряді:



тоді як при пероральному введенні *n*-бутилдиніофосфатів – у наступному:



Зменшення токсичності при пероральному введенні органодиніофосфатів молібдену залежно від природи ліганда відбувається у наступному ряді:



#### Література

1. Gusar online [Електронний ресурс]. – Режим доступу : <http://pharmaexpert.ru/GUSAR/acutoxpredict.html>. – Назва з екрану (08.09.2016).
2. Сидоров К.К. // Токсикология новых промышленных химических веществ. – М. : Медицина, 1979. – Вып. 13. – С. 47–51.

УДК 547.859

**Огородник О. Г.,  
Янченко В.О., Демченко А. М.**

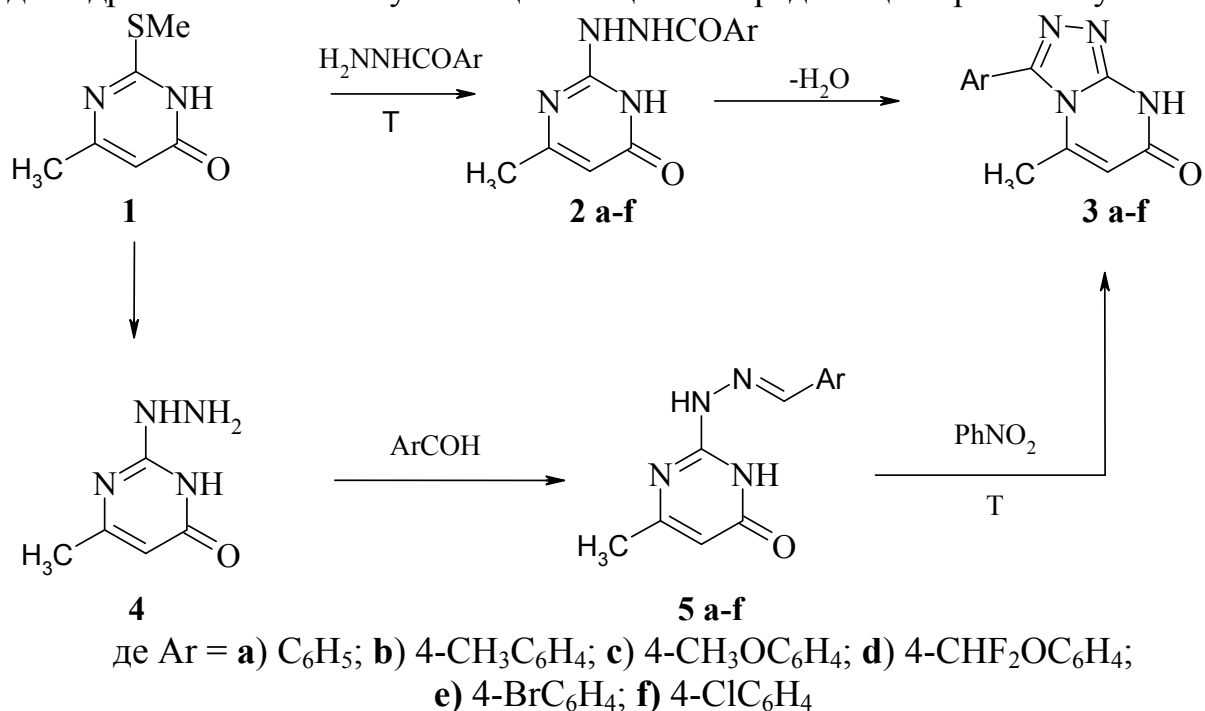
### СИНТЕЗ ТА АНАЛЬГЕЗУЮЧА АКТИВНІСТЬ ПОХІДНИХ ТРИАЗОЛОПРИМІДИНУ

*Чернігівський національний педагогічний університет імені Т.Г. Шевченка  
м. Чернігів, вул. Гетьмана Полуботка, 53, м. Чернігів. Україна  
antyt666@gmail.com*

Відомо, що ядро піримідину входить до складу вітамінів, антибіотиків, барбітуратів, піримідинових сульфамідів, похідних урацилу та ряду інших біологічно активних сполук. Мабуть, практична цінність сполук які містять піримідиновий фрагмент не вичерпується наведеними прикладами й до кінця ще не розкрита.

Нами показано, що сплавлення еквімолярних кількостей 2-метилтіо-6-метилпіримідин-4-ону **1** з гідразидами відповідних карбонових кислот при температурі 180 °С в інертному середовищі супроводжується інтенсивним виділенням метилмеркаптану та приводить до утворення відповідних гідразидопохідних **2 a-f**. Останні спонтанно циклізуються у відповідні похідні триазолопіримідинів **3 a-f**.

Біциклічні сполуки **3 a-f** також було отримано зустрічним синтезом через відповідні гідразони **5 a-f** з наступною циклізацією в середовищі нітробензену.



Будова синтезованих сполук доведена елементним аналізом та даними ПМР-спектроскопії.

Виявлено, що сполуки **3 a-c** проявляють високий рівень анальгезуючої активності, яка перевищує рівень препарату порівняння кеторолак.

УДК 547.854.4

**Онищенко Т.О., Суховєєв В.В., Демченко А.М.**

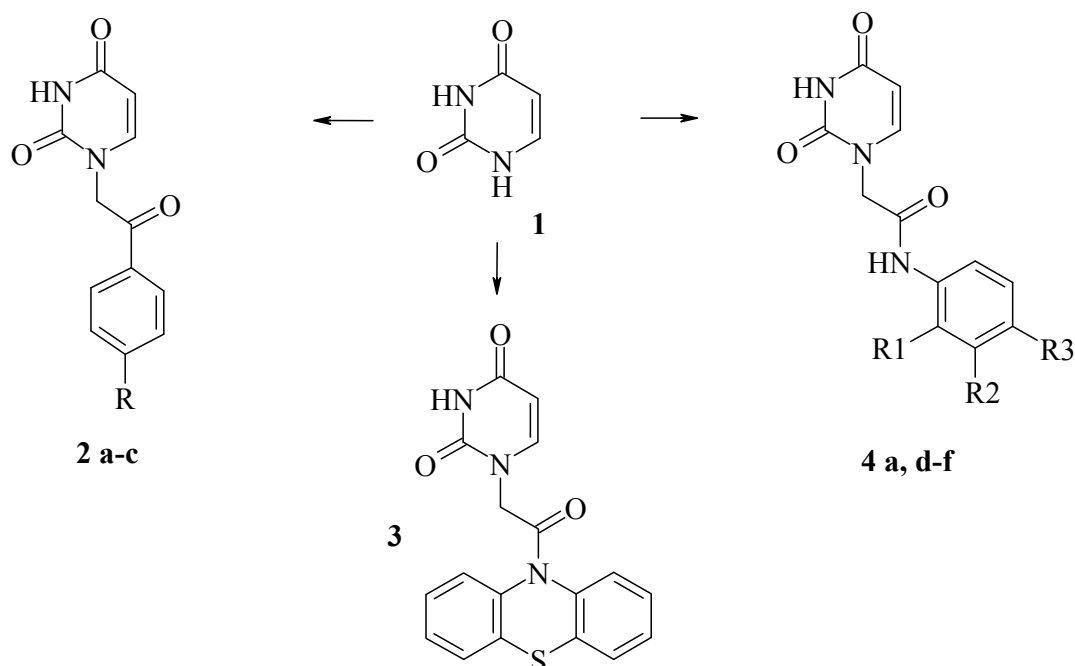
### СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ НОВИХ ПОХІДНИХ УРАЦИЛУ

*Ніжинський державний університет імені М. Гоголя*

У медичній практиці знайшли застосування такі похідні урацилу, як: *фторурацил* або 5-фтор-1Н,3Н-піримідин-2,4-діон (протипухлинний препарат з групи антиметаболітів) [1]; *метилурацил* або 6-метилурацил (стимулятор лейкопоезу) [2]; *калію оротат* або урацил-4-карбонат калію (анаболічний засіб) [3] та *фторафур* або N<sup>7</sup>-(2-фуранідил)-5-фторурацил (цитостатичний протипухлинний хімотерапевтичний лікарський засіб) [4]. Крім того, оротова кислота є вітаміном В<sub>13</sub> [5]. Тому синтез нових похідних урацилу та дослідження їх фізіологічної дії є перспективним напрямком експериментальних досліджень.

Нами показано, що урацил (**1**) легко ацилується α-хлорацетанілідами з утворенням відповідних похідних за першим атомом Нітрогену гетероциклу. Реакція відбувається в присутності калій карбонату у співвідношенні 1 до 3 у сухому ацетонітрилі, що дозволяє одержати сполуки (**2a-c**, **3** та **4a, d-f**) за схемою:





де R = а) Н, b) Cl, с) Br, d) CH<sub>3</sub>, e) OCH<sub>3</sub>, f) OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>.

Склад та будову синтезованих сполук підтверджено елементним аналізом та даними ЯМР <sup>1</sup>Н-спектроскопії.

Прогнозування фармакологічної активності зазначених речовин проведено за допомогою комп'ютерної програми Prediction of Activity spectra for Substances [6]. Знайдено, що сполуки (**2–4**) з вірогідністю 77,7–86,3% можуть бути ефективними як Mannotetraose 2- $\alpha$ -N-acetylglucosaminyltransferase inhibitor та з вірогідністю 80,0–85,9% виявляти антиекземну активність. Загалом, сполука (**2a**) є найбільш перспективною щодо пошуку нових поліфункціональних лікарських препаратів. Так, з вірогідністю 70,6–79,1% вона може бути ефективною як Nicotinic  $\alpha_2\beta_2$  receptor antagonist, N-methylhydantoinase (ATP-hydrolysing) inhibitor, 27-Hydroxycholesterol 7 $\alpha$ -monooxygenase inhibitor, Testosterone 17 $\beta$ -dehydrogenase (NADP<sup>+</sup>) inhibitor, Nicotinic  $\alpha_6\beta_3\beta_4\alpha_5$  receptor antagonist, Pterin deaminase inhibitor, Isopenicillin-N epimerase inhibitor, Chloride peroxidase inhibitor. Сполука (**3**) з великою імовірністю може бути ефективною як Anaphylatoxin receptor antagonist (93,3%) та Glycosylphosphatidylinositol phospholipase D inhibitor (74,6%).

Прогнозування можливої токсичності здійснено за допомогою комп'ютерного моделювання. Для цього використано програму GUSAR [7].

Встановлено, що синтезовані речовини належать до 4–5 класів токсичності за класифікацією К.К. Сидорова [8]. Найменш токсичними є (**2c**) та (**4f**) при підшкірному введенні препарату (2741 та 3500 мг/кг маси щурів відповідно), сполука (**4e**) при внутрішньовенному введенні (820 мг/кг маси щурів) та (**4a**) при введенні перорально (7042 мг/кг маси щурів).

### Література

1. Фторурацил. Режим доступу: <https://ru.wikipedia.org/wiki/5-%D0%A4%D1%82%D0%BE%D1%80%D1%83%D1%80%D0%B0%D1%86%D0%B8%D0%BB>.
2. Метилурацил. Режим доступу: <https://uk.wikipedia.org/wiki/%D0%9C%D0%B5%D1%82%D0%B8%D0%BB%D1%83%D1%80%D0%B0%D1%86%D0%B8%D0%BB>

3. Калия оротат. Режим доступу: <http://www.wiki-meds.ru/lekarstvennie-preparati/kaliya-orotat-9302.htm>
4. Фторафур. Режим доступу: <http://encyclopaedia.bid/%D0%B2%D0%B8%D0%BA%D0%B8%D0%BF%D0%B5%D0%B4%D0%B8%D1%8F/%D0%A4%D1%82%D0%BE%D1%80%D0%B0%D1%84%D1%83%D1%80>
5. Оротовая кислота. Режим доступу: [https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9E%D1%80%D0%BE%D1%82%D0%BE%D0%B2%D0%B0%D1%8F\\_%D0%BA%D0%B8%D1%81%D0%BB%D0%BE%D1%82%D0%B0](https://ru.wikipedia.org/wiki/%D0%9E%D1%80%D0%BE%D1%82%D0%BE%D0%B2%D0%B0%D1%8F_%D0%BA%D0%B8%D1%81%D0%BB%D0%BE%D1%82%D0%B0)
6. Комп'ютерна програма Prediction of Activity spectra for Substances. Режим доступу: <http://pharmaexpert.ru/PASSonline/predict.php>. – Назва з екрана.
7. Gusar online [Електронний ресурс]. – Режим доступу : <http://pharmaexpert.ru/GUSAR/acutoxpredict.html>. – Назва з екрану (08.09.2016).
8. Сидоров К.К. // Токсикология новых промышленных химических веществ. – М. : Медицина, 1979. – Вып. 13. – С. 47–51.

УДК 547.786.541.521.54.057

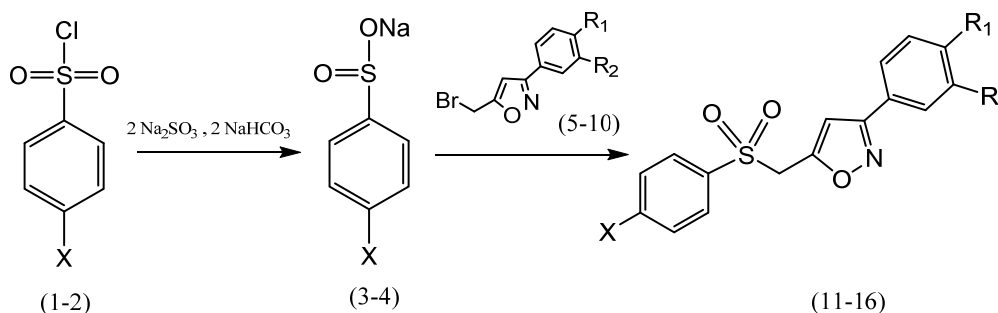
**Павлюк О.В.,  
Безуглий Ю.В., Кашковський В.І.**

## НОВІ ІЗОКСАЗОЛОВМІСНІ СУЛЬФОПОХІДНІ ЦИКЛОПЕНТАНУ, СИНТЕЗОВАНІ РЕАКЦІЯМИ МЕТАТЕЗИСУ З ЗАКРИТТЯМ ЦИКЛУ

*Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України*

Реакції метатезису із закриттям циклу є унікальним шляхом створення нових карбоциклічних систем, що у поєднанні з подальшою функціоналізацією або гідруванням дозволяє синтезувати різноманітні похідні циклоалканів і, зокрема, циклопентану. Підвищений інтерес до циклопентанових похідних зумовлений їх наявністю в таких природних біологічно активних речовинах як стероїди [1], секвітерпени [2], пиретроїди [2], простогландини [3] та антибіотики [4]. З іншого боку, велика кількість похідних ізооксазолів проявляють біологічну дію і використовуються в якості лікарських препаратів [5, 6]. Раніше [7] нами була встановлена принципова можливість одержання нових похідних у молекулах яких одночасно присутні, як ізооксазольний цикл, так і циклопентановий фрагмент. Для розширення низки відомих похідних такого типу з метою їх подальшої функціоналізації для отримання потенційно біологічно активних продуктів, нами були синтезовані нові сульфони ізооксазольного ряду (**11–16**) за схемою 1.

Схема 1



X=  $\text{CH}_3$ , Cl

(5), (11)  $\text{R}_1 = \text{OC}_2\text{H}_5$ ,  $\text{R}_2 = \text{H}$ , X=  $\text{CH}_3$

(8), (14)  $\text{R}_1 = \text{H}$ ,  $\text{R}_2 = \text{H}$ , X= Cl

(6), (12)  $\text{R}_1 = \text{OC}_3\text{H}_7$ ,  $\text{R}_2 = \text{H}$ , X=  $\text{CH}_3$

(9), (15)  $\text{R}_1 = \text{OC}_2\text{H}_5$ ,  $\text{R}_2 = \text{H}$ , X= Cl

(7), (13)  $\text{R}_1 = \text{OCH}_3$ ,  $\text{R}_2 = \text{OC}_2\text{H}_5$ , X=  $\text{CH}_3$

(10), (16)  $\text{R}_1 = \text{OCH}_3$ ,  $\text{R}_2 = \text{OCH}_3$ , X= Cl

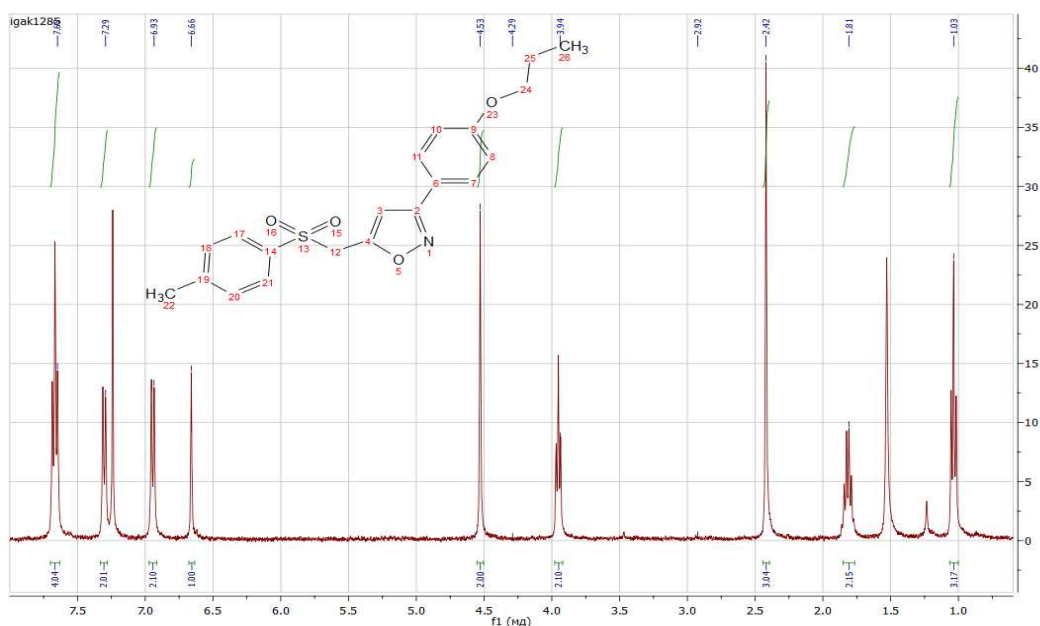
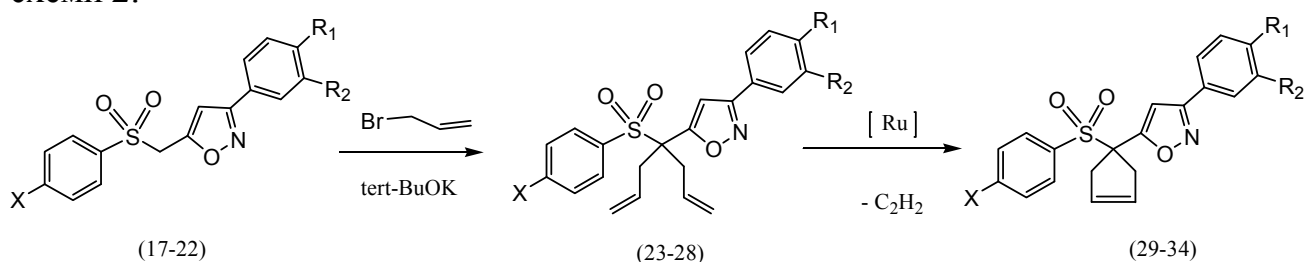


Рис. 1

З вихідних сульфонілхлоридів (1–2) були отримані відповідні солі сульфінних кислот (3–4). При взаємодії останніх з ізооксаловмісними бромідами (5–10) було синтезовано низку нових сульфонів ізооксазольного ряду з активною метиленовою групою (11–16). Взаємодію проводили при кип'ятінні водно-спиртової суміші сульфінатів та відповідних ізооксазолівмісних бромідів (5–10) протягом 2 годин. Цільові сульфони (11–16) були отримані з виходами 70–83%.

Будова отриманих сполук підтверджена даними ЯМР спектроскопії на ядрах  $^1\text{H}$  (рис 1).

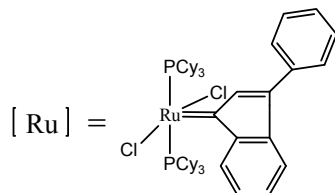
Було встановлено, що кращий результат алкілювання ароматичних сульфонів (11-16) дає взаємодія з 2,5 еквівалентами бромистого алілу в розчинах ТГФ у присутності *tert*-бутілату калію. Взаємодію проводили в абсолютних умовах згідно схеми 2:



X= CH<sub>3</sub>, Cl

(17), (23), (29) R<sub>1</sub> = OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, R<sub>2</sub> = H, X= CH<sub>3</sub> (18), (24), (30) R<sub>1</sub> = OC<sub>3</sub>H<sub>7</sub>, R<sub>2</sub> = H, X= CH<sub>3</sub> (19), (25), (31) R<sub>1</sub> = OCH<sub>3</sub>, R<sub>2</sub> = OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, X= CH<sub>3</sub>

(20), (26), (32) R<sub>1</sub> = H, R<sub>2</sub> = H, X= Cl (21), (27), (33) R<sub>1</sub> = OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, R<sub>2</sub> = H, X= Cl (22), (28), (34) R<sub>1</sub> = OCH<sub>3</sub>, R<sub>2</sub> = OCH<sub>3</sub>, X= Cl



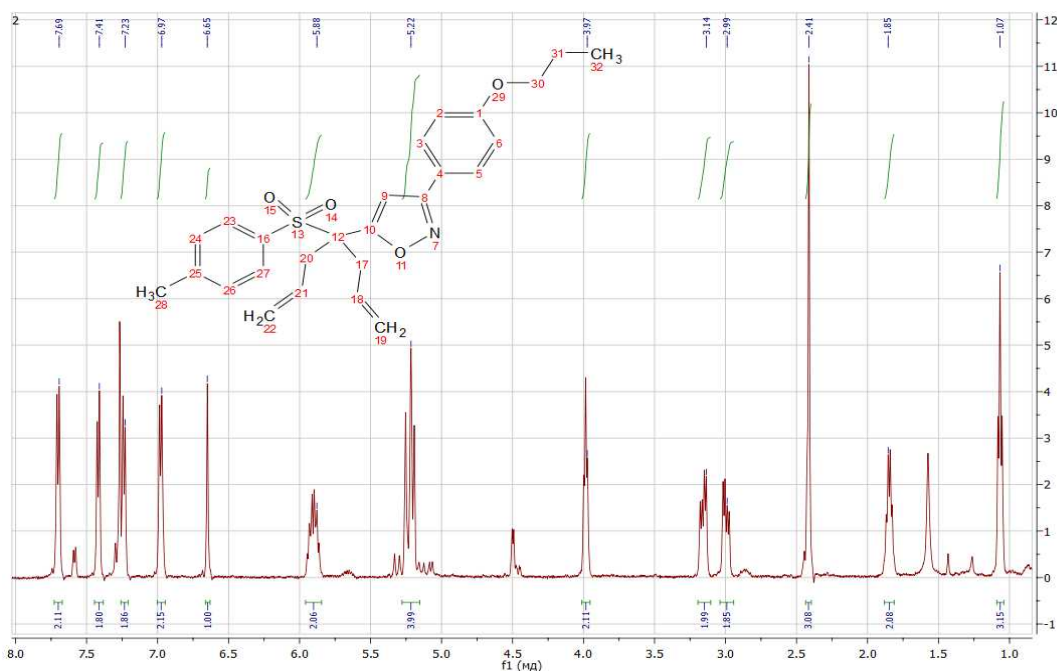
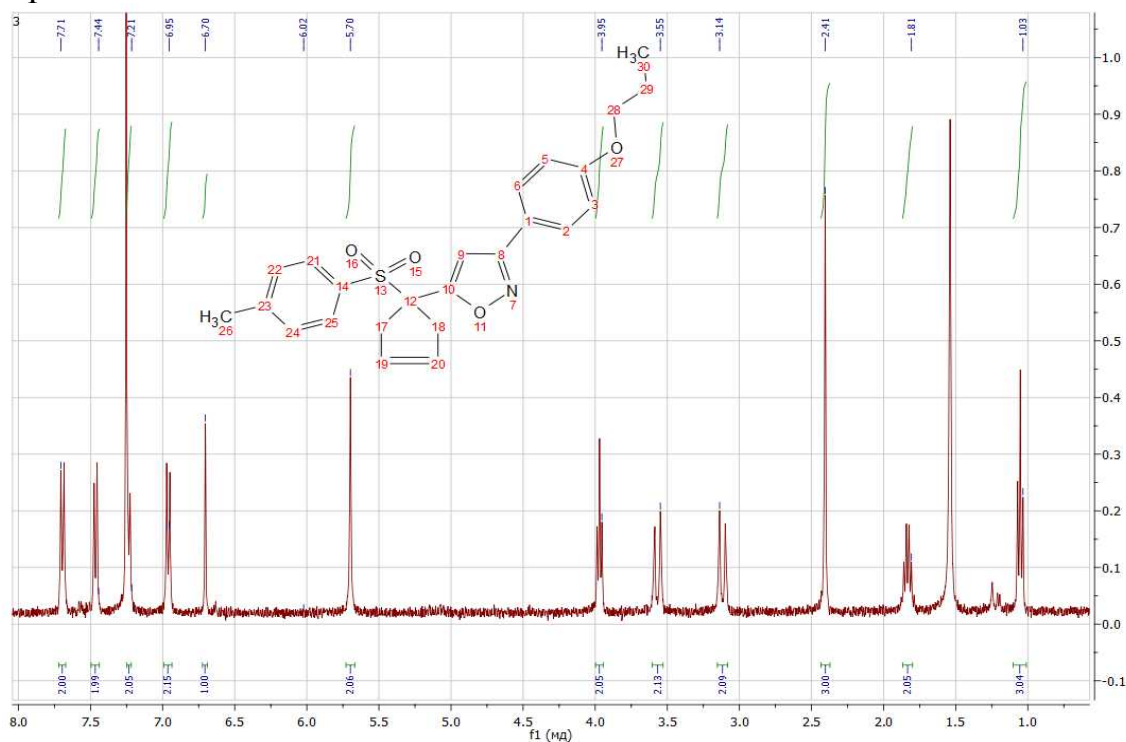


Рис. 2

Будова сполук (**23–28**) підтверджена даними ЯМР спектроскопії на ядрах  $^1\text{H}$ . На успішне проходження реакції алкілювання вказує зникнення сигналів 2 протонів метиленової групи вихідних сульфонів в області 4,52-4,59 м.ч. та поява сигналів алільних замісників при 5,89 м.ч., 5,20 м.ч., 2,97-3,14 м.ч. (Рис.2)

Реакцією метатезису із закриттям циклу було одержано низку нових циклопентенільмисних сульфонів ізooksазольного ряду (**29–34**) (Схема 2). Реакцію проводили за кімнатної температури під дією 5% мольних індоніліденового катализатора [Ru] першого покоління на розчині діалільних похідних (**23–28**) у дихлорметані.



Нові циклопентенільні похідні ізooksазольного ряду були отримані з виходами 74-82%. Продукти реакції були віділені за допомогою колонкової хромато-

рафії. Будова нових циклопентенілвмісних сполук (**29–34**) підтверджена даними ЯМР спектроскопії на ядрах  $^1\text{H}$  (рис. 3). На проходження реакції метатезису із закриттям циклу вказує зникнення сигналів чотирьох протонів кінцевих  $\text{CH}_2$ -груп алільних замісників в області 5,20 м.ч. та поява сигналу двох ванільних протонів при 5,69 м.ч, які вказують на утворення циклопентенового кільця:

Таким чином, у результаті проведених досліджень були підібрані оптимальні умови для отримання діалькенільних сульфопохідних ізооксазолу та одержано низку нових сульфопохідних циклопентанів ізооксазольного ряду реакціями метатезису із закриттям циклу.

### Литература

1. Heasley B. // Current Organic Chemistry. -2014. –Vol. 18. – № 6. – 614.
2. Wilson, R. M.; Danishefsky, S. J. J // Org. Chem. – 2007. – 72. – 4293-4305
3. Das, S.; Chandrasekhar, S.; Yadav, J. S.; Grée, R. Chem. Rev. – 2007, – 107, 3286
4. Fülöp, F. Chem. Rev. – 2001, – 101, – 2181.
5. Marcia A. Kielhofner, MD. Trimethoprim- Sulfamethoxazole: Pharmacokinetics, Clinical Uses, and Adverse Reactions// Tex Heart Inst J. – 1990, – 17(2), – p. 86–93.
6. Peter BB Jones, Douglas HN White. Reappraisal of the clinical use of leflunomide in rheumatoid arthritis and psoriaticarthritis.// J. Open Access Rheumatology: Research and Reviews. – 2010, – 3, – P 53-71.
7. Павлюк О. В., Безуглий Ю. В., Кашковський В.І. //Фундаментальні та прикладні дослідження в сучасній хімії. Матеріали III Міжнародної заочної науково-практичної конференції молодих учених. – 2016. – 98-101.

УДК 547.792.3

<sup>1</sup>Паладич Д.Л., <sup>1</sup>Суховєєв В.В., <sup>2</sup>Демченко А.М.

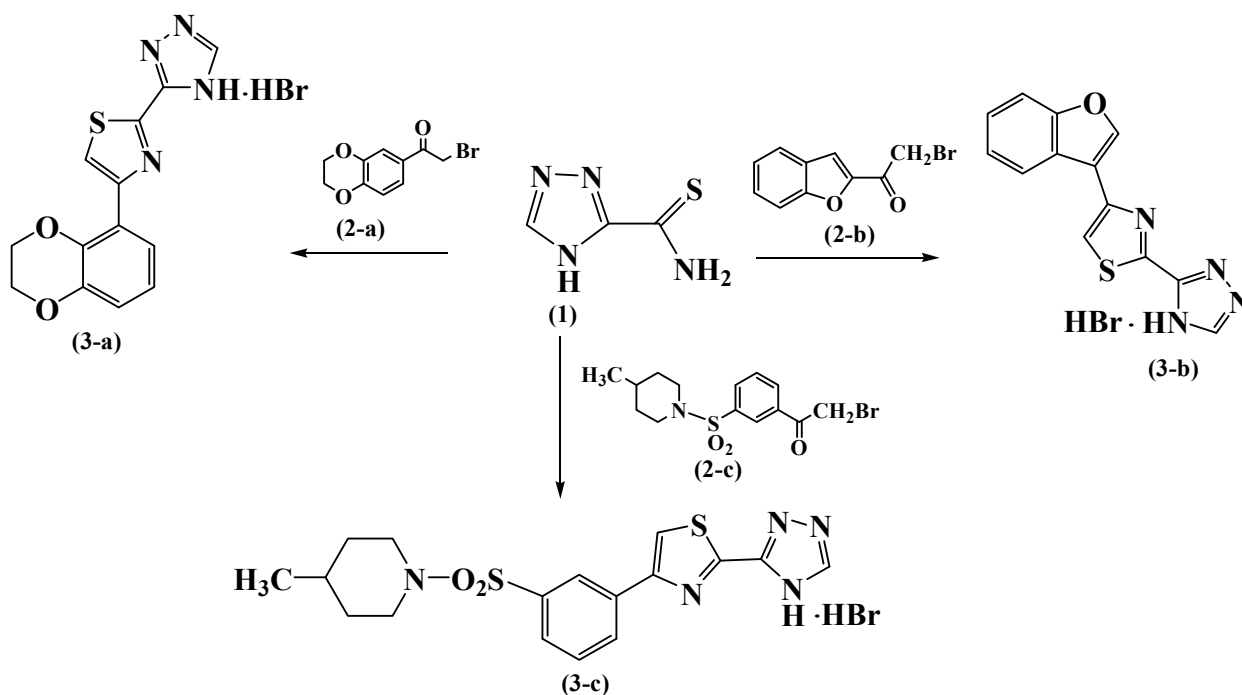
## СИНТЕЗ НОВИХ ПОХІДНИХ 1,2,4-ТРИАЗОЛО-3-КАРБОКСИТІОАМІДУ ТА ДОСЛІДЖЕННЯ ЇХ ДЕЯКИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ

<sup>1</sup>Ніжинський державний університет імені Миколи Гоголя;

<sup>2</sup>ДУ "Інститут фармакології і токсикології АМН України"

Гетероциклічні тіоаміди та триазоли широко використовують в органічному синтезі, бо вони відіграють важливу роль у хімії природних сполук [1]. Функції, що виконують ці сполуки, досить широкі – від барвників, стабілізаторів емульсій, каталізаторів біосинтезу, до нуклеотидів [1, 2]. Тому синтез нових похідних 1,2,4-триазоло-3-карбокситіоаміду та дослідження їх в якості білдинг-блоків для створення нових поліфункціональних фармацевтичних засобів, має не лише науковий, а й практичний характер.

Сполуки (**3a-c**) були одержані нами за класичним методом Ганча конденсацією тіоаміду (**1**) [3] із заміщеними ароматичними та гетероциклічними галогенкетонами (**2a-c**) в ізопропанолі чи етанолі за температур їх кипіння за наступною схемою:



Склад та будову гетероциклічних карбокситіоамідів (**3a-c**) підтверджено елементним аналізом та даними ЯМР  $^1\text{H}$ -спектроскопії.

Прогнозування можливої фармакологічної активності серед синтезованих сполук здійснено за допомогою комп'ютерного моделювання. Для цього використано програму PASS (Prediction of Activity spectra for Substances) версії 1.703 [4].

Встановлено, що сполуки (**3a-c**) можуть мати широкий спектр фармакологічної активності, зокрема бути: ліками проти хвороби Альцгеймера (вірогідність в межах 82,7–85,6%); саркоми кісток (80,2–85,1%); антагоністом інтерлейкіну 5 (81,1–88,7%), виражати антипротозойний (86,5–90,6%) та протизапальний (79,9–89,8%) ефекти, а також можуть знайти застосування в якості ліків від нейродегенеративних захворювань (сполука 3a – 93,3%, а сполука 3c – 90,1%) та як антагоніст рецепторів ГАМК (сполука 3a – 87,5%, а сполука 3b – 90,0%) тощо.

Прогнозування можливої токсичності серед похідних 1,2,4-тріазоло-4-карбокситіоамід здійснено за допомогою комп'ютерного моделювання. Для цього використано програму GUSAR online, яка включає останні досягнення в області QSAR моделювання: узгодженість прогнозу, оцінка застосованості області, внутрішні та зовнішні перевірки моделей і чітка інтерпретація отриманих результатів [5].

Згідно з отриманими результатами всі сполуки належать до 4 та 5 класів токсичності за класифікацією К.К. Сидорова [6].

Токсичність досліджуваних речовин розраховано в залежності від сумарної енергії зв'язків в молекулі речовин:

$$DL_{50} = 0,00065 * E_{зв} + 1,570 \text{ (г/кг)},$$

де  $E_{зв} = \sum E_{зві} n_i$ , де  $E_{зв}$  – сумарна енергія зв'язків в молекулі (Ккал/моль);  $n_i$  – кількість зв'язків даного виду в молекулі речовини;  $E_{зві}$  – енергія зв'язку даного виду, що визначається по таблиці стандартних енергій зв'язків [7].

Встановлено, що токсичність сполук (**3a-c**) коливається в межах від 3,32 до 3,62.

Отже, синтезовані сполуки можуть бути використані в якості білдинг-блоків для створення нових лікарських засобів.

### Література

1. Триазоли. Точка доступу: <https://uk.wikipedia.org/wiki>
2. Тіоаміда. Точка доступу: <https://pt.wikipedia.org/wiki/Тіоаміда>
3. Пат. DE2411823 (A1). Verwendung von 1,2,4-triazol-3-carboxamiden und thiocarboxamiden als antivirenmittel / Witkowski J.T., Robins R.K. – № 19730340332 19730312. – Bibliographic data 26.09.1974
4. Комп'ютерна програма Prediction of Activity spectra for Substances. [Електронний ресурс] : Назва з екрану. – Режим доступу : <http://pharmaexpert.ru/PASSonline/predict.php>.
5. Gusar online [Електронний ресурс]. – Режим доступу : <http://pharma-expert.ru/GUSAR/acutoxpredict.html>. – Назва з екрану (09.04.2016).
6. Сидоров К.К. О классификации токсичности ядов при парентеральных способах введения/ К.К. Сидоров // Токсикология новых химических веществ. – М.: Медицина, 1973. – Вып. 13. – С. 47-57.
7. Пат. РФ, G01N33/00. Способ определения величины острой токсичности химических веществ по данным энергии связи в молекуле / Трушков В.Ф.; Клабукова Е.Р – № 2164684. – Заяв. 27.01.1998. – Опубликовано. 27.03.2001

УДК 547.821.3

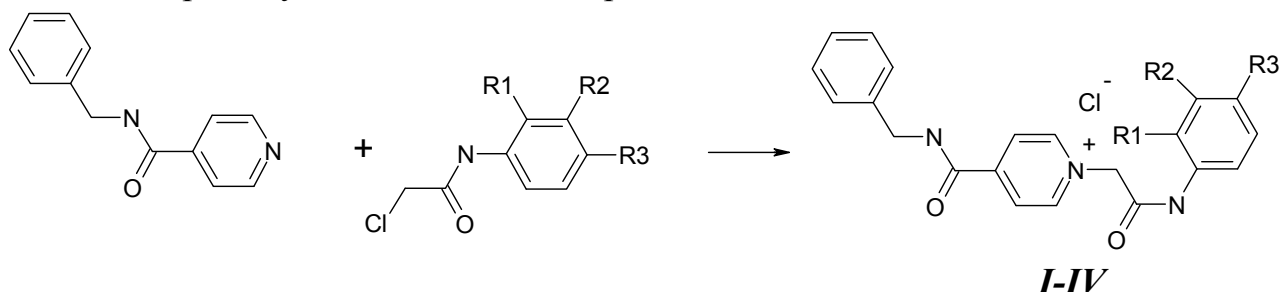
Полевиченко С.І., Бондар О.С.,  
Курмакова І.М., Демченко А.М.

## СИНТЕЗ ЧЕТВЕРТИННИХ СОЛЕЙ ПІРИДИНІЮ З ПРОТИМІКРОБНОЮ АКТИВНІСТЮ ПО ВІДНОШЕННЮ ДО СУЛЬФАТВІДНОВЛЮВАЛЬНИХ БАКТЕРІЙ

*Чернігівський національний педагогічний університет імені Т.Г. Шевченка*

Серед четвертинних солей піридинію відомі сполуки з високою протимікробною активністю щодо корозійно агресивних бактерій, зокрема сульфатвідновлювальних. Наявність зазначеної активності є перспективним для дослідження та використання сполук в якості інгібіторів мікробної корозії.

Нові четвертинні солі (**I-IV**) одержано шляхом алкілювання відповідних похідних піридину заміщеними  $\alpha$ -хлорацетанілідами:



**I:** R<sub>1</sub> = -H; R<sub>2</sub> = -H; R<sub>3</sub> = -Cl;

**II:** R<sub>1</sub> = -H; R<sub>2</sub> = -H; R<sub>3</sub> = -OMe;

**III:** R = -Me; R<sub>2</sub> = -H; R<sub>3</sub> = -Me; **IV:** R<sub>1</sub> = -Me; R<sub>2</sub> = -Me; R<sub>3</sub> = -H;

Сполуки являють собою кристалічні речовини білого кольору з жовтуватим відтінком. Перекристалізацію речовин проводили з використанням 2-пропанолу. Вихід становить 75 – 80 %.

Чистота сполук підтверджена хроматомас-спектрометричним аналізом (LC/MSD) на приладі серії Agilent 1200 з масспектрометричним детектором Mass Quad G1956B (Agilent Technologies inc.). Будова речовин доведена ЯМР  $^1\text{H}$  спектроскопією (Bruker-300), розчинник  $\text{DMSO-d}^6$ .

Одержані сполуки пригнічують метаболічну активність сульфатвідновлювальних бактерій родів *Desulfovibrio* sp., *Desulfomicrobium* sp. та накопичувальної культури, виділеної нами з біоплівки металевих поверхонь очисних споруд м. Чернігова. Сполука **IV** захищає сталь СтЗпс від мікробної корозії, індукованої сульфатвідновлювальними бактеріями штаму *Desulfovibrio* sp. М-4.1, на 97,2%.

УДК 547-304.2

**Полищук В.М.,\* Буряк Д.В.,  
Гайдай А.В., Левандовский И.А.**

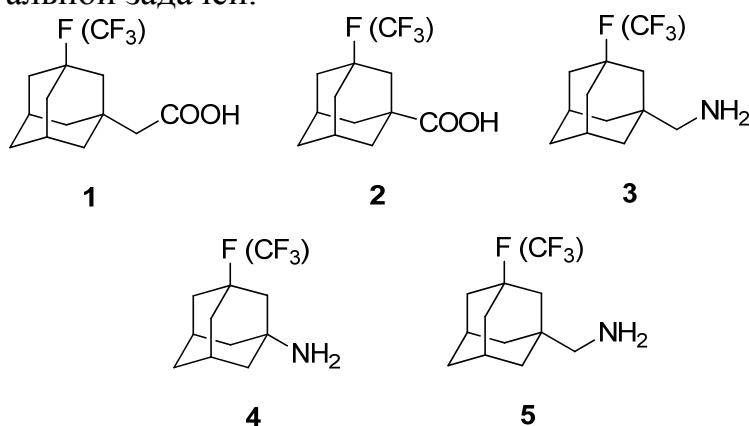
## СИНТЕЗ ФТОРСОДЕРЖАЩИХ БИЛДИНГ-БЛОКОВ НА ОСНОВЕ АДАМАНТАНА

НТУ Украины "Киевский политехнический институт им.И.Сикорского"  
03056, Киев, просп. Победы, 37

Производные каркасных углеводородов нашли применение в медицине. Наиболее распространенными являются производные адамантана, которые используются для профилактики и лечения вируса гриппа, болезней ЦНС, герпеса, а также для модификации биологической активности препаратов на основе природных соединений или пептидов.

Эффективность адамантансодержащих препаратов обусловлена сочетанием в одной молекуле гидрофильных полярных групп, которые увеличивают растворимость вещества в воде и обеспечивают связывание с соответствующим сайтом клетки-мишени, и липофильного фрагмента, помогающего ей проникать через биологические барьеры организма (гемато-энцефалический и кишечный).

Низкая эффективность некоторых из существующих лекарств обусловлена именно низкой биодоступностью, поэтому синтез новых веществ-аналогов с более липофильными (гидрофобными), чем адамантановый каркас, фрагментами является актуальной задачей.



Так, известно, что введение атомов фтора в молекулу повышает ее гидрофобность и часто положительно влияет на фармакокинетику в целом. Поэтому, нами были синтезированы амины и кислоты (**1-5**), не описанные в литературе, которые могут быть использованы в качестве билдинг-блоков для создания новых лекарственных средств.



## СИНТЕЗ, БУДОВА ТА ВЛАСТИВОСТІ КООРДИНАЦІЙНИХ СПОЛУК КАДМІЮ З ДЕЯКИМИ ГІДРАЗИДАМИ БЕНЗЕНОВИХ КИСЛОТ У СПІВВІДНОШЕННІ М:L=1:3

*ДВНЗ "Ужгородський національний університет"*

Біологічні властивості гідрозидів карбонових кислот відомі ще з минулого століття, що і обумовлює їх широке використання у медицині. Відповідно, зазначені речовини привертають до себе пильну увагу дослідників в області координаційної хімії. Адже синтез і дослідження координаційних сполук мікроелементів з біоактивними органічними лігандами є одним із перспективних шляхів знаходження нових високоефективних біологічно активних препаратів.

Актуальність дослідження реакцій комплексоутворення вказаних лігандів з іонами Cd(II) обумовлена необхідністю розвитку стереохімічних уявлень про будову координаційних сполук хімії  $4d^{10}$ -елементів з поліфункціональними лігандами, а також вивченням їх біоактивності.

Метою дослідження є синтез та ідентифікація координаційних сполук Кадмію з деякими бензгідрозидами (гідрозидом бензенової (ГБК), 2-хлорбензенової (Г2-СБК), 3- (Г3-НБК) та 4-нітробензенової кислот (Г4-НБК)), визначення їх складу і будови, виявлення координації донорних атомів, вивчення їх фізико-хімічних властивостей та біологічної активності.

Координаційні сполуки отримано із гарячих етанольних чи водно-етанольних розчинів солі Кадмію (хлориду або нітрату) з досліджуваними бензгідрозидами при молярному співвідношенні М:L=1:3. Контролюючи умови проведення реакції комплексоутворення (рН середовища, час нагрівання розчину), отримано 8 координаційних сполук наступного складу:  $[Cd(ГБК)_2] \times (NO_3)_2$ ,  $[Cd(Г2-СБК)_2] \times (NO_3)_2$ ,  $[Cd(Г3-НБК)_2] \times (NO_3)_2$ ,  $[Cd(Г4-НБК)_2] \times (NO_3)_2$ ,  $[Cd(ГБК)_2] \times Cl_2$ ,  $[Cd(Г2-СБК)_2] \times Cl_2$ ,  $[Cd(Г3-НБК)_2] \times Cl_2$ ,  $[Cd(Г4-НБК)_2] \times Cl_2$ . Емпіричний склад отриманих комплексів запропоновано на основі результатів елементного аналізу, який проведено на вміст Кадмію, Нітрогену, Карбону, Хлору та Гідрогену.

Для вивчення будови синтезованих координаційних сполук було досліджено електропровідність їх розчинів, використано методи ЯМР ( $^1H$ ) та ІЧ-спектроскопічного аналізу і квантово-хімічні розрахунки з використанням програмного пакету "HyperChem-8.0.8".

Встановлено, що синтезовані сполуки Кадмію з бензгідрозидами є трьохіонними електролітами, значення молекулярної електропровідності їх розчинів коливається в межах  $(227,6 \pm 0,6) - (252,0 \pm 0,3) \text{ ом}^{-1} \times \text{см}^2$ . В утворенні стійких комплексів беруть участь три молекули органічного ліганду, координаційне число центрального іону рівне 6. Показано, що у слабкокислому середовищі (рН=4-5) усі досліджувані нами бензгідрозиди з іоном Кадмію утворюють координаційні сполуки у амідогідрозидній формі. Гетерокоординаційне хелатне оточення центрального атому відбувається за рахунок трьох атомів О (C=O) та трьох атомів N (NH<sub>2</sub>) гідрозиду. У зовнішній координаційній сфері знаходяться два іони відповідного кислотного залишку (нітрат- чи хлоридіони).

Проведені квантово-хімічні розрахунки показали, що у складі досліджуваних

координаційних сполук Кадмію переважає ковалентно-іонна складова координаційних зв'язків між центральним іоном та лігандом, ефективний заряд  $\text{Cd}^{2+}$  становить близько +1,9. Врахування ентропії системи показало, що гідрозиди бензенових кислот координуються до центрального атому металу як плоскі молекули.

Синтезовані координаційні сполуки Кадмію з бензгідрозидами апробовано на їх біологічну активність. Антибактеріальні властивості досліджено *in vitro* методом паперових дисків на твердих поживних середовищах. Виявлено, що визначувані сполуки проявляють бактерицидні властивості по відношенню до наступних штамів мікроорганізмів: *Acinetobacter baumannii*, *Pseudomonas aeruginosa*, *Escherichia coli*, *Staphylococcus aureus*, *Klebsiella oxytoca*, *Enterobacter cloacae*, *Proteus mirabilis*, *Sarcina flava*, *Streptococcus pneumoniae*, *Bacillus subtilis* і *Salmonella typhimurium* (зона затримки росту більше 20 мм) та бактерицидну дію до культур *Klebsiella pneumoniae* MRSA (зона затримки росту знаходиться в межах 20 мм з повторним ростом мікроорганізмів після 72 годин).

УДК 541.49:577.15/17:547.732:632.954

**Романенко Х.В.,**  
Єфтенська Р.І., Лявинець О.С.

## ФОСФОНІЄВІ СОЛІ ПОХІДНИХ 3,4-ДИГІДРОПІРИМІДИН-2-ОНУ ЯК ІНГІБІТОРИ ВІЛЬНО-РАДИКАЛЬНИХ РЕАКЦІЙ

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

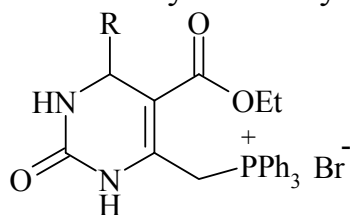
Інгібітори знаходять широке застосування в багатьох галузях промисловості для захисту від окиснення різних органічних речовин, сумішей, виробів, а також вуглеводневого палива, мастил, технічних і харчових жирів, органічних розчинників тощо.

З точки зору пошуку нових антиоксидантних систем викликають зацікавлення похідні 3,4-дигідропіримідин-2-ону, які синтезують шляхом багаторічного перетворення, що базується на реакції циклоконденсації Біджинеллі.

Для оцінки інгібіторних властивостей досліджуваних сполук використовуються модельні системи ініційованого рідиннофазного окиснення кумену за низьких температур і розкладу гідропероксидів.

Мета даної роботи – вивчення впливу на розклад гідропероксиду кумену (ГПК) та ініційоване окиснення кумену похідних 3,4-дигідропіримідин-2-ону, які містять у 6-му положенні дигідропіримідинового циклу трифенілфосфонійметильну групу та відрізняються будовою замісника у 4-ому положенні.

Для дослідження використані наступні сполуки:



R:  $\text{CH}_3$  (I),  $\text{C}_6\text{H}_5$  (II), *m*- $\text{C}_6\text{H}_4\text{Br}$  (III), *n*- $\text{C}_6\text{H}_4\text{NO}_2$  (IV)

Розклад ГПК проводили за температури 363 К в розчині диметилформаміду (ДМФА) в атмосфері карбон (IV) оксиду.

Досліджуваний процес за даних умов описується таким рівнянням:

$$W = k_{\text{еф}} [\text{ГПК}].$$

Значення ефективних констант швидкості розкладу ГПК наведені в табл. 1. За присутності сполуки **I** швидкість розкладу ГПК практично не змінюється. При додаванні сполук **II-IV** спостерігається зменшення константи швидкості розкладу ГПК, яке найбільше у випадку сполуки **IV** (*n*-нітрофенільний замісник) (майже у 5 разів порівняно з контрольним дослідом).

Таблиця 1

Значення ефективної константи швидкості розкладу ГПК залежно від будови внесеної добавки.  $T = 363 \text{ K}$ ;  $V_{\text{ДМФА}} = 10 \text{ мл}$ ;  $[\text{сполуки}] = 1 \cdot 10^{-3} \text{ моль/л}$

№ п/п	Сполука	$k_{\text{еф}} 10^2, \text{ хв}^{-1}$
1	-	3,40
2	<b>I</b>	3,30
3	<b>II</b>	2,00
4	<b>III</b>	1,70
5	<b>IV</b>	0,70

Отже, електроноакцепторні (галогени, нітрогрупа) замісники у 4-ому положенні дигідропіримідинового циклу підвищують здатність похідних 3,4-дигідропіримідин-2-ону сповільнювати розклад гідропероксиду кумену.

Наступний етап наших досліджень – вивчення антиоксидантних властивостей сполук **I-IV** у реакції ініційованого окиснення кумену.

Досліди проводилися за температури 343 K, концентрація ініціатора азоізобутиронітрилу (АІБН) складала  $1 \cdot 10^{-2} \text{ моль/л}$ , концентрація інгібітора змінювалася у межах  $(2,5 \div 10) \cdot 10^{-4} \text{ моль/л}$ . Для підвищення розчинності похідних 3,4-дигідропіримідин-2-ону з трифенілфосфонійметильним угрупованням у кумені до останнього додавали ДМФА.

Поглинання кисню при ініційованому окисненні кумену за даних умов відбувається без періоду індукції. Значення швидкості досліджуваного процесу за присутності сполук **I-IV** наведені в табл. 2.

Таблиця 2

Значення величин швидкості поглинання кисню та швидкості ініційованого окиснення кумену залежно від будови внесеної добавки.  $V_{\text{кумену}} = 9,5 \text{ мл}$ ;  $V_{\text{ДМФА}} = 0,5 \text{ мл}$ ;  $[\text{АІБН}] = 1 \cdot 10^{-2} \text{ моль/л}$ ;  $[\text{ІнН}] = 1 \cdot 10^{-3} \text{ моль/л}$ ;  $T = 343 \text{ K}$ .

№	Сполука	Швидкість поглинання кисню, $W(\text{O}_2) \cdot 10^3, \text{ мл/с}$	Швидкість ініційованого окиснення кумену, $W_{\text{ок}} \cdot 10^4, \text{ моль/л} \cdot \text{с}$
1	-	2,8	7,5
2	<b>I</b>	2,7	7,2
3	<b>II</b>	1,6	4,3
4	<b>III</b>	1,1	2,9
5	<b>IV</b>	0,7	1,9

Як видно з табл. 2, сполука **I** практично не впливає на процес ініційованого окиснення кумену. За наявності сполук **II-IV** спостерігається сповільнення процесу. Сповільнююча здатність досліджених похідних 3,4-дигідропіримідин-2-ону в процесі окиснення кумену зростає у такому порядку: **II** < **III** < **IV**.

Уведення у фенільний радикал у 4-ому положенні дигідропіримідинового циклу електроноакцепторних замісників підвищує антиоксидантну здатність похідних 3,4-дигідропіримідин-2-ону, які містять у 6-ому положенні трифеніл-

фосфонієве угруповання, в реакції ініційованого окиснення кумену. Одержані результати добре узгоджуються з результатами розкладу ГПК у присутності сполук **I-IV** (табл. 1).

Оскільки найбільшою сповільнюючою дією володіє сполука **IV**, то було досліджено ініційоване окиснення кумену за різних її концентрацій. Результати наведені в табл. 3.

Таблиця 3.

Значення величин швидкості поглинання кисню та швидкості окиснення кумену залежно від концентрації сполуки **IV**.  $V_{\text{кумену}} = 9,5$  мл;  $V_{\text{ДМФА}} = 0,5$  мл;  $[\text{АІВН}] = 1 \cdot 10^{-2}$  моль/л;  $T = 343$  К.

№	$[\text{IV}] \cdot 10^4$ , моль/л	Швидкість поглинання кисню, $W(\text{O}_2) \cdot 10^3$ , мл/с	Швидкість ініційованого окиснення кумену, $W_{\text{ок}} \cdot 10^4$ , моль/л·с
1	-	2,8	7,5
2	2,5	1,4	3,8
3	5,0	1,1	3,0
4	10,0	0,7	1,9

Зі збільшенням концентрації сполуки **IV** швидкість ініційованого окиснення кумену закономірно зменшується. Період індукції за даних умов відсутній.

Можна зробити висновок, що похідні 3,4-дигідропіримідин-2-ону, які містять у 6-ому положенні трифенілфосфонієве угруповання, не здатні до обриву ланцюга за рахунок взаємодії з вільними радикалами. Їх сповільнююча дія в процесі ініційованого окиснення кумену зумовлена сповільненням розкладу проміжного гідропероксиду кумену.

УДК 547.587.51+547.304.4

Руснак О.В., Ходарев В.В., Скрипська О.В.

### НОВІ ПОХІДНІ 3-(4-АЦЕТИЛФЕНІЛ)КУМАРИНУ

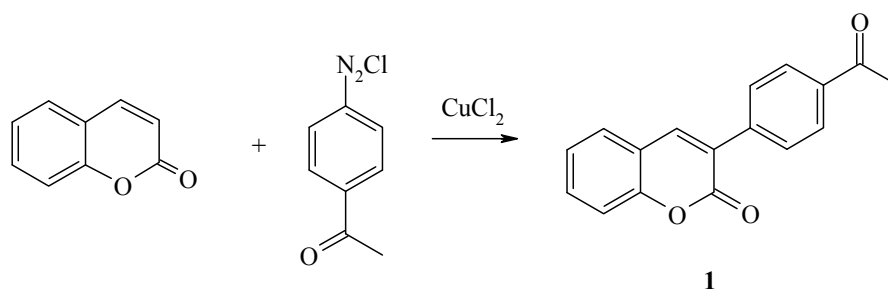
*Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича*

Похідні кумарину є структурною основою значної кількості природних сполук, які володіють широким спектром фармакологічних властивостей, а також входять до складу багатьох синтетичних біологічно активних речовин [1, 2]. Для досліджень біоактивності представляють інтерес похідні 3-арилкумарину, які містять у четвертому положенні фенільного радикалу різні гетероциклічні фрагменти. Такі системи характеризуються антимікробною дією [3].

Перспективним реагентом для органічного синтезу є 3-(4-ацетилфеніл)-кумарин. Наявність ацетильної групи надає широкі можливості для молекулярного дизайну 3-арилкумарину, зокрема, для конструювання нових ансамблів гетероциклів.

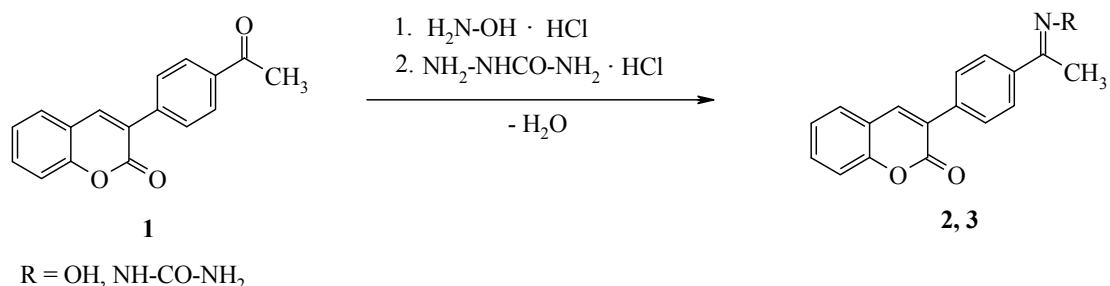
Метою нашої роботи є одержання нових функціональних похідних на основі 3-(4-ацетилфеніл)кумарину **1**, які можуть претендувати на перспективне місце в ряду сполук з вираженою біоактивністю.

Синтез вихідної сполуки здійснено реакцією арилювання кумарину 4-ацетилфенілдіазоній хлоридом у водно-ацетоновому середовищі за наявності каталітичної кількості купрум(II) хлориду [4].

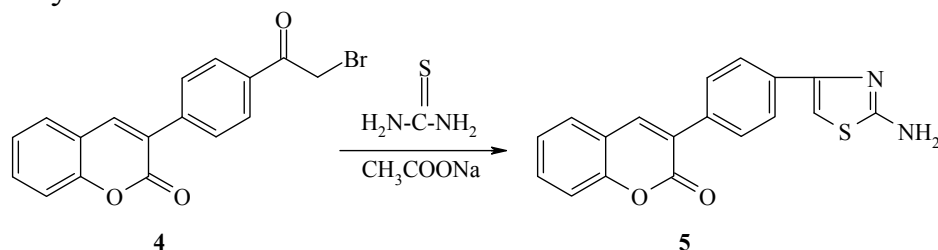


Для сполуки **1**, як кумариновмісного метилкетону, в залежності від умов, реакції можуть протікати як по карбонільній групі, так і по метильній групі ацетилу. Крім того, можливі реакції циклізації за участю обох реакційних центрів.

Нами проведено реакції 3-(4-ацетилфеніл)кумарину **1** за участю карбонільної групи ацетилу з сполуками, які містять первинну аміногрупу: з гідроксиламін гідрохлоридом та семікарбазид гідрохлоридом, у результаті чого отримано відповідні оксим **2** та семікарбозон **3**. Реакції протікають при кип'ятінні реагентів у етанолі за наявності натрій ацетату.



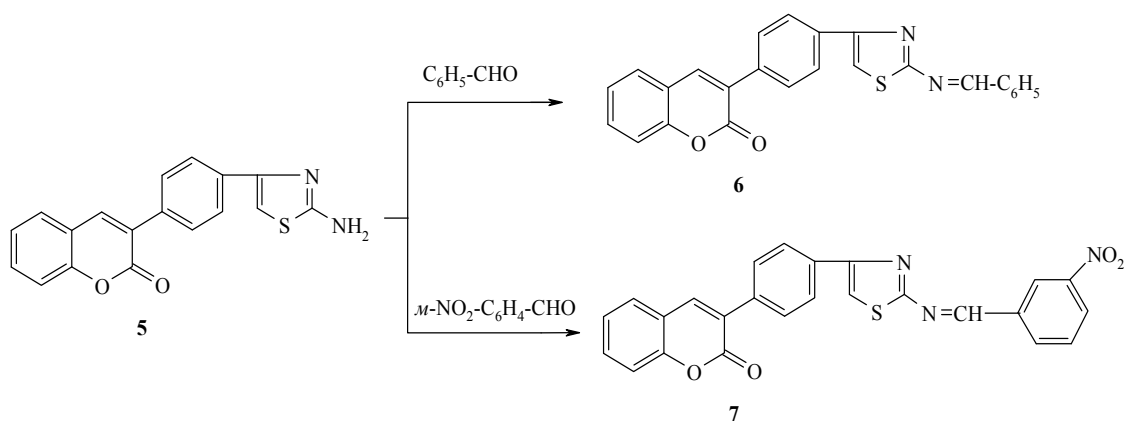
Бромовання 3-(4-ацетилфеніл)кумарину бромом в середовищі крижаної оцтової кислоти за 85-90°C проходить по метильній групі ацетилу з утворенням  $\alpha$ -бромкетону **4**.



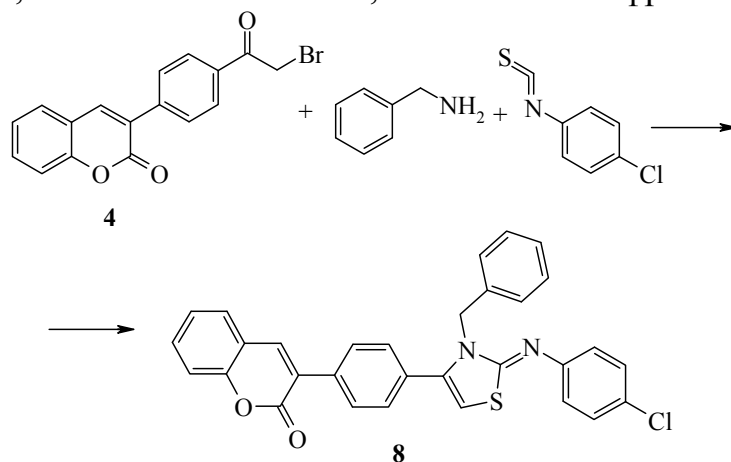
Використання синтетичного потенціалу бромацетильної групи 3-(4-бромацетилфеніл)кумарину **4** в реакції з тиосечовиною за присутності натрій ацетату дало можливість одержати кумариновмісний тiazол – 3-[4-(2-аміно-1,3-тіазол-4-іл)феніл]кумарин **5**.

Наявність у сполуці **5** тіазольного циклу підтверджується смугами поглинання в області 1540-1550 $\text{cm}^{-1}$ . Поглинання зв'язку C=O в кумариновому фрагменті виявляється при 1716  $\text{cm}^{-1}$ . Конденсацією сполуки **5** з ароматичними альдегідами: бензальдегідом, *m*-нітробензальдегідом в етанолі, що містить каталітичні кількості піперидину, синтезовано відповідні основи Шиффа **6** і **7**.

Інтерес до синтезу сполук, які містять тіазольний цикл зумовлений тим, що вони володіють широким спектром біологічної активності. І тому препаративно привабливим є синтез тіазольних систем з кумариновим фрагментом, як потенційних біопрепаратів [5, 6].



Ми також дослідили взаємодію  $\alpha$ -бромкетону **4** з бензиламіном та 4-хлорофенілізотіоціанатом, що протікає при нагріванні в ацетонітрилі з утворенням сполуки **8**, яка містить 2-іміно-1,3-тіазоліновий фрагмент.



Індивідуальність одержаних сполук підтверджено методом тонкошарової хроматографії, склад – результатами кількісного елементного аналізу, а будова – даними вимірів ІЧ та ЯМР  $^1\text{H}$  спектрів.

Дослідження антимікробної та фунгіцидної дії на штамах мікроорганізмів *S.typhimurium* 4414, *P.mirabilis* 410, *S.aureus* ATCC 25923, *P.aeruginosa* ATCC 27853, *B.subtilis* ATCC 6633, *C.albicans* та *S.cerevisiae* 61 показали, що деякі із синтезованих речовин виявляють значну активність.

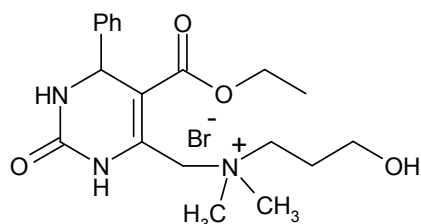
### Література

1. Машковский М.Д. Лекарственные средства. – М.: Новая волна, 2000. – Т. 1.–544 с; Т.2.–608 с.
2. Растительные лекарственные средства / Под. ред. Н.П. Максютинной. – К.: Здоровье, 1985. – 280 с.
3. Скрипська О.В. Синтез та антимікробна активність нітрогеновмісних гетероциклічних сполук з кумариновим фрагментом / О.В. Скрипська, Бліндер, О.В. Єленіч [та ін.] // Фармац. журн. – 2013. – №6. – С. 69-77.
4. Skripskaya O.V. Synthesis of Nitrogen Heterocycles Underlain by Application of 3-(4-acetylphenyl)-2H-coumarin / O.V. Skripskaya, N.O. Feilo, A.O. Neshchadin [et al.] // Russ. J. Org. Chem. – 2013. Vol. 49, No. 11. – P. 1655-1660.
5. Pavurala S. Synthesis of 3-(2-(4,5-Dihydro-3,5-diphenylpyrazol-1-yl)thiazol-4-yl)-2H-chromen-2-one Derivatives via Multicomponent Approach / S. Pavurala, R.R. Vedula // Synt. Commun. – 2014. – Vol. 44. – P. 583-588.
6. Penta S. An efficient improved one-pot synthesis of thiazolo[2,3-c][1,2,4]triazol-5-yl)-2H-chromen-2-one derivatives via multi-component approach / S. Penta, R.R. Vedula // Indian. J. Chem. – 2014. – Vol. 53B. – P.115-119.

## ВПЛИВ АМОНІЙНОГО ПОХІДНОГО 3,4-ДИГІДРОПРИМІДИН-2-ОНУ НА ФОТООКИСНЕННЯ НАНОЧАСТИНОК CdTe

Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича

Пролонгування фотостабільності наночастинок розширює сфери їх використання. Відтак досліджено фотодеградацію наночастинок CdTe у подвійному водно-органічному розчиннику. Як інгібітор фотоокиснення використано бромід 4-(феніл)-5-етоксикарбоніл-6-(диметилгідроксипропіламонію)метил-3,4-дигідропіримідин-2-ону (I):



Його ефективність порівняно з іонолом (II).

Суспензію наночастинок CdTe (30 нм) у подвійному розчиннику складу ДМСО – вода ( $\phi(\text{ДМСО})=0.5$ ) за наявності обраних сполук і без них опромінювали лазером (405 нм). Типова кінетична крива зміни інтегральної інтенсивності люмінесценції отриманих суспензій наведена на рис. 1. Встановлено, що використання сполуки (I), взятої у концентрації 0,08 – 5 ммоль/л, суттєво сповільнює падіння інтегральної інтенсивності фотолюмінесценції під час опромінювання порівняно із іонолом, взятим у тих самих концентраціях. Зокрема, глибина падіння інтегральної інтенсивності фотолюмінесценції під час фотоокиснення упродовж 1 год. суспензії наночастинок кадмій телуриду у подвійному розчиннику вода – ДМСО за наявності сполуки (I) у вказаних концентраціях за  $T=293\text{ K}$  не перевищує 25%.

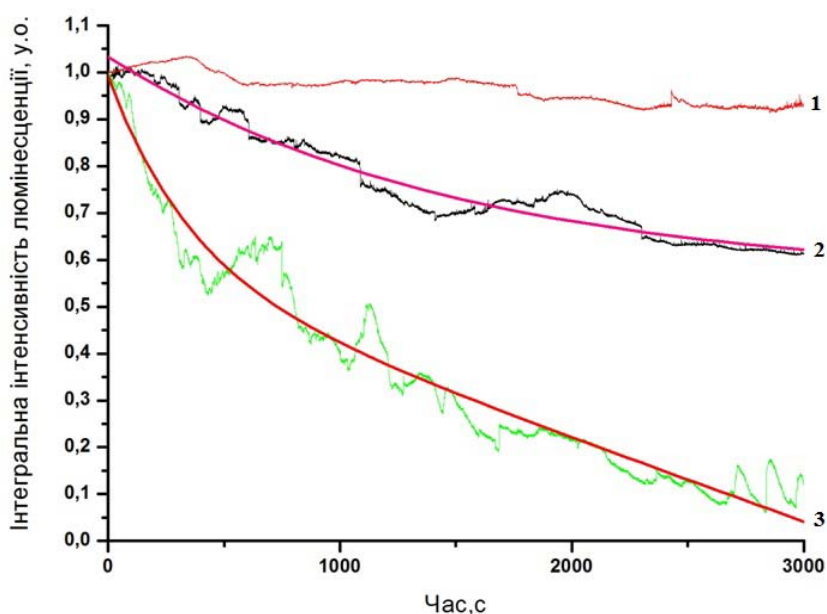


Рис. 1. Кінетична крива зміни інтегральної інтенсивності люмінесценції отриманих суспензій CdTe.  $[\text{In}]=5\text{ ммоль/л}$ . In: крива 1 – I; 2 – II; 3 – без інгібітору.

Інгібуючий вплив сполуки (I) на фотоокиснення суспензії наночасток кадмій телуриду пов'язуємо з лактам-лактимною таутомерією та позитивним зарядом на атомі Нітрогену. Таутомерія забезпечує утворення неактивних радикалів, які зупиняють вільно радикальне окиснення досліджуваної системи. Позитивний заряд на атомі Нітрогену сполуки (I) забезпечує "захист" негативно зарядженої наночасточки CdTe.

Крім того, встановлено, що за  $T=286$  К спостерігається повне гальмування падіння інтегральної інтенсивності фотолюмінесценції під час фотоокиснення суспензії наночасток кадмій телуриду за наявності сполуки (I), взятої у концентрації 5 ммоль/л, у подвійному водно-органічному розчиннику. Цей факт пов'язуємо зі зростанням в'язкості досліджуваної системи за знижених температур. Також з'ясовано, що у воді та ДМСО, взятих як індивідуальні розчинники наночасток, ще в більшій мірі відбувається фотостабілізація, ніж у їх суміші.

УДК 577.23

<sup>1</sup>Семеніхін А.В., <sup>2</sup>Михайленко Н.Ф., <sup>1</sup>Суховєєв В.В.

### ПОЛІФЕРМЕНТНА АКТИВНІСТЬ ЧИННИКА СПРЯЖЕННЯ $CF_1$ , ІЗОЛЬОВАНОГО З ХЛОРОПЛАСТІВ ШПІНАТУ

<sup>1</sup>Ніжинський державний університет імені М. Гоголя

<sup>2</sup>Інститут ботаніки ім. М.Г. Холодного НАН України

Чинник спряження  $CF_1$  є водорозчинною частиною АТРсинтазного комплексу фотосинтетичних (тилакоїдних) мембран хлоропластів, який складається з п'яти типів субодиниць у стехіометричному співвідношенні  $\alpha:\beta:\gamma:\delta:\epsilon \sim 3:3:1:1:1$  [1] і містить каталітичні і регуляторні центри, що беруть участь у світлозалежному синтезі і гідролізі АТР [2]. Після відокремлення від мембрани чинник  $CF_1$  втрачає здатність каталізувати синтез АТР, але зберігає АТРазну активність. При цьому ізольований  $CF_1$  є латентною АТРазою і каталізує гідроліз АТР лише після активації теплом або в результаті впливу окислювальних реагентів, оксианіонів, спиртів і деяких детергентів [2, 3].

Нещодавно було показано, що ізольована  $CF_1$ -АТРаза проявляє також карбоангідразну активність, значно прискорюючи взаємоперетворення форм вугільної кислоти  $CO_2 + H_2O \leftrightarrow HCO_3^- + H^+$  [4,5,6]. Хоча функціональне значення цієї активності для роботи комплексу АТРсинтази лишається невизначеним, було висунуте припущення щодо її участі у перенесенні протонів крізь  $CF_1$ -АТразу, спряженому з процесами світлозалежного синтезу або гідролізу АТР [4, 6].

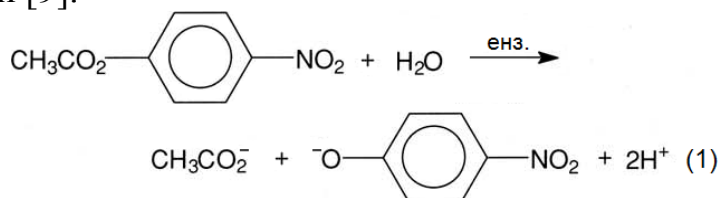
Існує принаймні шість різних форм карбоангідраз (позначених як  $\alpha$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ ,  $\epsilon$ ,  $\zeta$ ). Локалізація деяких ізоформ КА лишається невідомою. У хлоропластах, крім великої кількості  $\beta$ -карбоангідрази 1 ( $\beta$ -КА1), виявлені  $\beta$ -КА5 і  $\alpha$ -КА4 в тилакоїдних мембранах, а в стромі –  $\alpha$ -КА1 [7]. Відомо, що, на відміну від  $\beta$ -КА,  $\alpha$ -форми ензиму здатні каталізувати гідроліз низки естерів, тобто проявляють естеразну активність. Наявність естеразної активності у складі мітохондріальної  $F_1$ -АТРази була встановлена більш 35 років тому [8].

З метою повнішої характеристики КА, пов'язаної з АТРсинтазним комплексом хлоропластів, у зазначеній роботі була визначена естеразна активність ізольованої  $CF_1$ -АТРази та вивчена дія на цю активність специфічних інгібіторів карбоангідраз – ацетазоламиду і етоксизоламиду.



Процедури виділення хлоропластів із свіжого листа шпинату, визначення концентрації протеїну, оцінка чистоти отриманого препарату CF<sub>1</sub> та його субдиничного складу за результатами нативного та за наявності ДДС натрію електрофорезів проводили за методиками [4–6].

АТРазну активність ізольованого ензиму стимулювали прогріванням та визначали згідно [5]. Естеразну активність ізольованого ензиму CF<sub>1</sub>, визначали при 25 °С у розчині за швидкістю гідролізу *n*-нітрофенілового естеру (*n*-НФЕ) ацетатної кислоти [9]:



На рис.1 приведені експериментальні дані з впливу гідрофільного інгібітора КА – ацетазоламіду (АА) на швидкість гідролізу *n*-НФЕ в присутності ізольованого чинника CF<sub>1</sub>.

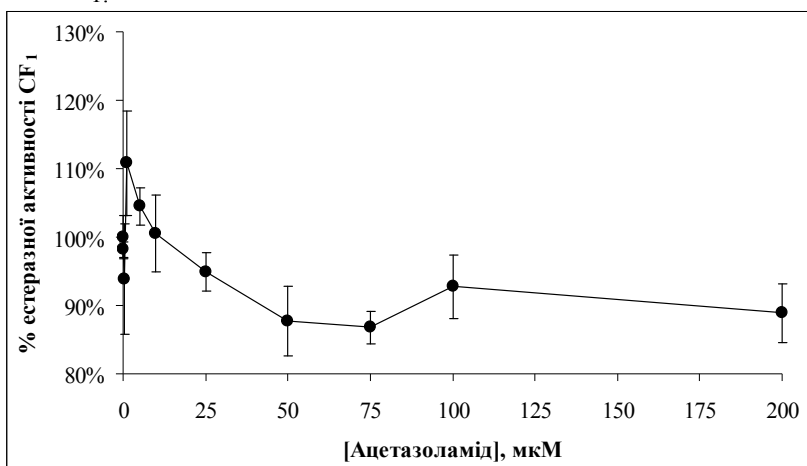


Рис. 1 Вплив ацетазоламіду на естеразну активність ізольованого чинника спряження CF<sub>1</sub>

Залежність естеразної активності CF<sub>1</sub> від концентрації ліпофільного інгібітора КА – етоксизоламіду (ЕА) (рис. 2) не є монотонною.

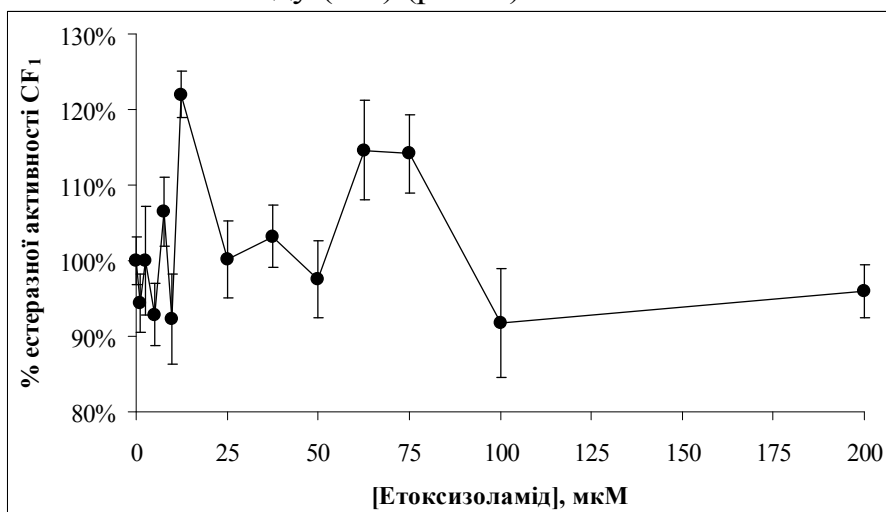


Рис. 2 Вплив етоксизоламіду на естеразну активність ізольованого чинника спряження CF<sub>1</sub>.

У діапазоні протестованих концентрацій ЕА на кривій залежності швидкості реакції гідролізу *n*-НФЕ від концентрації інгібітора спостерігалось принаймні 2

ділянки, у яких зростання ензиматичної активності чергувалося з її зменшенням. Естеразна активність  $CF_1$  також немонотонно змінювалася і в залежності від концентрації АА (рис.1). Така кінетична поведінка свідчить про наявність у складі ензиму декількох центрів, при зв'язуванні з якими АА або ЕА стимулюють або пригнічують естеразну активність.

Таким чином, визначення естеразної активності ізольованого чинника спряження  $CF_1$  у розчині показало, що поряд зі здатністю прискорювати гідроліз АТР та каталізувати перетворення форм карбонатної кислоти [4, 6] цей комплекс також пришвидшує розклад нітрофенілових естерів. Ці функції  $CF_1$  залежать від наявності в середовищі специфічних сульфаніламідних інгібіторів карбоангідраз.

Отримані в даній роботі результати дозволяють зробити припущення про те, що карбоангідразна активність каталітичної частини АТРсинтазного комплексу, наявність якої була встановлена нами раніше [4, 6], може бути пов'язана з карбоангідразою  $\alpha$ -типу, оскільки цей тип КАЗ виявляє естеразну активність.

### Література

1. Tiedge H., Lünsdorf H., Schäfer G., Schairer H.U. Subunit stoichiometry and juxtaposition of the photosynthetic coupling factor 1: Immunoelectron microscopy using monoclonal antibodies // Proc. Natl. Acad. Sci. USA. –1985. – 82, № 23. – P. 7874–7878.
2. Malyan A.N. Nuncatalytic nucleotide binding sites: Properties and mechanism of involvement in ATP synthase activity regulation // Biochemistry (Moscow). – 2013. – 78, № 13. – P. 1512–1523. doi: 10.1134/S0006297913130099
3. Groth G., Strotmann H. New results about structure, function and regulation of the chloroplast ATP synthase ( $CF_0CF_1$ ) // Physiol. Plant. – 1999. – 106, № 1. – P. 142–148. doi: 10.1034/j.1399-3054.1999.106120.x
4. Semenihin A.V., Zolotareva O.K. Carbonic anhydrase activity of integral-functional complexes of thylakoid membranes of spinach chloroplasts // Ukr. Biochem. J. – 2015. – 87, № 3. – P. 47–56. doi: 10.15407/ubj87.03.047
5. Хомочкін А.П., Семеніхін А.В., Золотарьова О.К. Дія інгібіторів карбоангідрازی на ензиматичну активність ізольованої тилакоїдної  $CF_1$  АТФази // Доповіді НАН України. – 2016. – № 1. – С. 92–98. doi: 10.15407/dopovidi2016.01.092
6. Семеніхін А.В. Карбоангідразна активність чинника спряження  $CF_1$ , ізольованого з хлоропластів шпинату. Доповіді НАН України. – 2014. – № 9. – С. 141 – 145.
7. Fabre N., Reiter I.M., Becuwe-Linka N., Genty B., Rumeau D. Characterization and expression analysis of genes encoding  $\alpha$  and  $\beta$  carbonic anhydrases in Arabidopsis // Plant Cell Environ. – 2007. – 30, № 5. – P. 617–629. doi: 10.1111/j.1365-3040.2007.01651.x
8. Ягужинский Л.С., Гудзь Т.И., Верховский А.Б. Эстеразная активность олигомицинчувствительной АТРаза митохондрий // Биохимия. – 1978. – 43, № 11. – С. 2058–2063.
9. Ефимцева Э.А., Челпанова Т.И. Активность эстераз в тканях различных отделов желудочно-кишечного тракта северного оленя // Сельскохозяйственная биология. – 2007. – № 6. – С. 77–80.

УДК 547.857.4

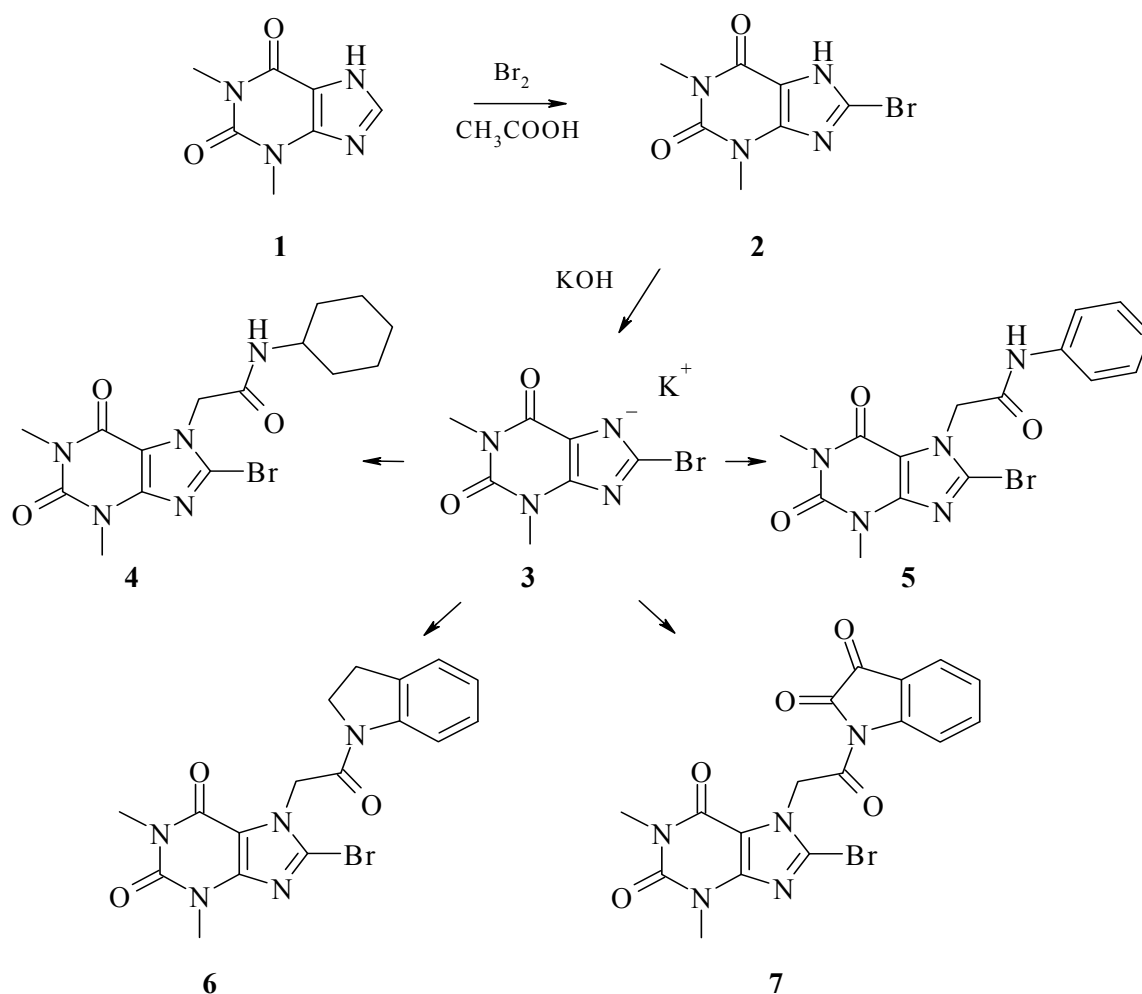
Суховєєв В.В., Демченко А.М., Коваленко Ю.С.

### СИНТЕЗ ТА ВЛАСТИВОСТІ НОВИХ ПОХІДНИХ 8-БРОМТЕОФІЛІНУ

*Ніжинський державний університет імені М. Гоголя*

Похідні теофіліну мають широкий спектр фізіологічної дії, включаючи фармакологічну активність [1, 2]. Тому синтез нових похідних 8-бромтеофіліну і дослідження їх фізіологічної активності та токсичності має не лише науковий, а й практичний інтерес.

У продовження роботи [3] нами синтезовані нові амідні за схемою:



Бромовання теофіліну (1) еквімолярною кількістю броду здійснено в ацетатній кислоті. При взаємодії 8-бромтеофіліну (2) з калій гідроксидом одержана його калієва сіль (3). Зазначена сіль, під назвою Бротеофін, була на фармацевтичному ринку України в якості протипухлинного засобу [4].

Синтез гетероциклічних амідів (4-7) нами здійснено при взаємодії відповідних  $\alpha$ -хлорацетанілідів зі сполукою (3) в середовищі ацетонітрилу за участі сухого поташу.

Склад та будову амідів (4-7) підтверджено елементним аналізом та даними ЯМР  $^1\text{H}$ -спектроскопії.

Прогнозування фармакологічної активності сполук (4-7) проведено за допомогою комп'ютерної програми Prediction of Activity spectra for Substances [5]. Знайдено, що сполуки (4-6) з вірогідністю 72,5–77,3% можуть бути інгібіторами фосфодіестерази АМФ, сполуки (6, 7) 78,3–79,4% – антагоністами рецептора анафілатоксину (78,3–79,4%). Крім того, сполука (5) з вірогідністю 73,4% може виявляти радіосенсібілізуючі властивості, а сполука (6) – діуретичну активність (76,6%) та з вірогідністю 72,1% може бути використана для лікування нейродегенеративних захворювань.

Гостру токсичність досліджуваних речовин розраховано в залежності від сумарної енергії зв'язків в молекулі речовин:

$$DL_{50}=0,00065 \cdot E_{\Sigma} + 1,570 \text{ (мг/кг)},$$

$$E_{\Sigma} = \sum E_{\Sigma i} \cdot n_i,$$

де  $E_{\Sigma i}$  – сумарна енергія зв'язків в молекулі (Ккал/моль);  $n_i$  – кількість зв'язків

даного виду в молекулі речовини;  $E_{зв}$  – енергія зв'язку даного виду, що визначається по таблиці стандартних енергій зв'язків [6].

Встановлено, що токсичність сполук (4-7) коливається в межах від 4,22 до 4,68.

### Література

1. Перцева Т. О., Онищенко Т. С. Теофілін у лікуванні хворих на бронхіальну астму // Український пульмонологічний журнал. – 2000. – № 3. – С. 67–69. Режим доступу: <http://www.ifp.kiev.ua/doc/staff/theophil.htm>. – Назва з екрана.
2. Дослідження залежності антигіпоксичної активності від хімічної структури в ряду похідних 7-п-метилбензил-8-заміщених теофіліну / А. В. Таран, О. П. Матвійчук, Б. А. Самура, М. І. Романенко, Л. В. Євсєєва // Український біофармацевтичний журнал. – 2011. – № 5. – С. 26–30.
3. Янченко В.О. Синтез та властивості похідних 8-бромтеофіліну / В.О. Янченко, А.М. Демченко, В.В. Суховєєв, Я.В. Автуніч // Фундаментальні та прикладні дослідження в сучасній хімії : матеріали I Міжнародної заочної науково-практичної конференції молодих учених (Ніжин, 11 квітня 2014 р.) / за заг. ред. В.В.Суховєєва. – Ніжин : НДУ ім. Миколи Гоголя, 2014. – С. 214–219.
4. Калієва сіль 8-бромтеофіліну (бroteофін), що має протипухлинну та протиметастазну дію. Режим доступу: <http://uapatents.com/2-23324-kaliehva-sil-8-bromteofilinu-broteofin-shho-maeh-protipukhlinnu-ta-protimetastaznu-diyu.html>. – Назва з екрана.
5. Комп'ютерна програма Prediction of Activity spectra for Substances. Режим доступу: <http://pharmaexpert.ru/PASSonline/predict.php>. – Назва з екрана.
6. Пат. РФ, G01N33/00. Способ определения величины острой токсичности химических веществ по данным энергии связи в молекуле / Трушков В.Ф.; Клабукова Е.Р – № 2164684; заяв. 27.01.1998; опубл.13.09.1999.

УДК 542.97:547.9

**Ткаченко Т.В., Каменських Д.С.,  
Євдокименко В.О., Кашковський В.І.**

### РОСЛИННА БІОМАСА – АЛЬТЕРНАТИВНЕ ДЖЕРЕЛО ПАЛИВА

*Інститут біоорганічної хімії та нафтохімії НАН України,  
Харківське шосе, 50, Київ, 02160, Україна  
tkachenko\_tatyana@mail.ru, kash-vik@yandex.ua*

На сьогоднішній день важливим альтернативним енергетично-сировинним джерелом є біомаса і, в тому числі, відходи біологічного походження, з яких можна одержувати продукцію, що має практичне застосування майже в усіх галузях народного господарства. Для енергетики це рідкі і тверді біопалива – паливні брикети і пілети, біоспирти та біогаз; для харчової і переробної промисловостей – харчові ферменти, сорбіт, ксиліт, лактолі; для сільського господарства – кормові добавки, засоби захисту рослин і тварин; для хімічної промисловості – індивідуальні хімічні речовини такі, як фурфурол, ароматичні альдегіди, ацетон, лимонна та молочна кислоти, крохмаль, оцтова кислота та інше. Наведений широкий спектр різноманітних речовин та жорсткі екологічні норми вказують на те, що переробка біомаси потребує створення відповідних технологій, оптимізованих на принципах мало- або безвідходних процесів. Це цілком можливо за умови, що такі базові підходи дадуть можливість одержувати необхідні продукти із різноманітної сировини

в сполученні зі специфічними для кожного конкретного випадку підходами. Це, значною мірою, проявляється в умовах ринкової економіки, коли комплексна переробка рослинної сировини набуває особливого значення і доцільності. Тому, саме розробка і створення гнучкої технології з одержанням кількох продуктів дозволять не тільки більш глибоко переробляти сировину, утилізувати відходи, але й виробляти конкурентоздатну продукцію у відповідності до попиту.

Як показує практика, сьогодні найбільш прийнятним шляхом є пошук та підбір високоефективних каталізаторів, які прискорюють хімічні перетворення, збільшують вихід цільового продукту і зменшують шкідливі викиди. Такий підхід є обґрунтованим тоді, коли технологічне рішення відносно доступне, ефективне і враховує сучасні вимоги.

Для прикладу, якщо детально розглядати переробку целюлозовмісної сировини, то її головна складність полягає у тому, що вихідна деревина являє собою складний водонерозчинний комплекс з целюлози, геміцелюлози і лігніну. У даному випадку застосовувати лише підхід дії гідролітичних агентів не є доцільним. Це пов'язано з тим, що окремі молекули целюлози за рахунок водневих зв'язків утворюють стійкі інертні структури, подібні кристалам. Тому у даному випадку перед застосуванням хімічних реагентів необхідно провести попередню підготовку сировини. Нині цією стадією є метод вибухового автогідролізу, який забезпечує практично повне розволокнення вихідної біомаси на основні складові, і дає можливість вже працювати з індивідуальними речовинами. Розділення вихідної сировини на складові відбувається за рахунок різкого скиду тиску після її короткочасної (від декількох секунд до декількох хвилин) обробки відповідного матеріалу водяною парою в інтервалі температур 180-260 °C і тисках насиченої пари 1,2-3,4 МПа. В результаті відбувається розділення обробленого матеріалу на три основні компоненти: лігнін, целюлозу і геміцелюлози. Це має непересічне значення для інтенсифікації подальшої роботи з рослинною біомасою, оскільки після розділення її складових переробці підлягають індивідуальні компоненти.

Виявлено, що перед ферментацією продуктів автогідролізу доротовидного проса їх необхідно піддавати додатковому очищенню від фуфрфурулу, який утворюється при термобаричній обробці, і який є інгібітором розвитку мікроорганізмів. За результатами ферментації дротовидного проса, обробленого в умовах автогідролізу, вихід бутанолу становив 3,0 г/л. У той же час світові досягнення знаходяться на рівні 2,0-2,5 г/л. Такі результати дають підстави сподіватися на позитивний результат, що може відкрити шлях для створення сучасної технології одержання надзвичайно важливого продукту для різних галузей народного господарства.

**УДК 631.413:543.62**

**Хаданович А.В.**

## **КОМПЛЕКСООБРАЗОВАНИЕ ИОНОВ СВИНЦА (II) С НЕОРГАНИЧЕСКИМИ ЛИГАНДАМИ В ПОЧВАХ**

*УО "Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины"*

Тяжелые металлы относят к основным группам техногенных загрязняющих веществ биосферы и представляют опасность для человека и других представителей биоты когда накапливаются в организме в токсических концентрациях. Изу-

чение процессов и механизмов сорбции ТМ почвами и взаимодействия их ионов с почвенными компонентами имеет большое значение для науки и практики.

Катионы металлов реагируют с компонентами почвенного раствора, состав которого сложен и включает большой набор ионов и молекул. Формы нахождения двухвалентных ионов металлов в почве определяются закономерностями комплексообразования их с ионами, преобладающими в почвенном растворе, и которые оказывают заметное влияние на подвижность металлов в почве, образуя растворимые комплексы. В результате сорбции гидратированных катионов почвы образуются как внешне-, так и внутрисферные поверхностные комплексные соединения. Образованию последних способствует присутствие на поверхности почвенных частиц функциональных групп основной природы. На поверхности почвенных частиц находятся функциональные группы различной химической природы, их кислотноосновные свойства изменяются в широких пределах – от сильных кислот (сульфогруппы) до сильных оснований (амино- и сульфгидрильные группы). Таким образом, реализация того или иного механизма взаимодействия гидратированных катионов с поверхностью почвенных частиц в значительной степени зависит от состава поверхностных функциональных групп [1]. Попадая на поверхность почв, тяжелые металлы, как правило, закрепляется в верхних гумусовых горизонтах, где они присутствуют в различных формах: в водорастворимой, ионообменной и непрочно адсорбированной. Аккумуляция поступающих в почву химических соединений зависит от таких свойств почвы, как механический состав, содержание гумуса, карбонатность, рН, емкость поглощения непосредственно связана сводным режимом [2]. Доля водорастворимой формы обычно невелика, однако при сильном загрязнении абсолютное количество водорастворимых тяжелых металлов становится экологически опасным фактором [3]. Одним из приоритетных загрязнителей является свинец, который склонен к комплексообразованию со многими органическими лигандами. Степень его закомплексованности достигает 80 %.

В качестве объекта исследований были отобраны образцы дерново-палевых подзолистых слабоподзоленных почв на лессовидных связных супесях, подстилаемых моренными суглинками в Гомельском районе. В почвенных образцах определяли основные агрохимические показатели: уровень рН почвенного раствора – потенциометрическим методом; общее содержание гумуса – по методу Тюрина. Принцип метода основан на окислении органического вещества почвы хромовой кислотой до образования углекислоты. Определение подвижного фосфора, подвижного калия проводили по стандартным методикам [4]. Определение содержания подвижных форм соединений металла проводили с применением вытяжки с использованием 1 М хлороводородной кислоты и буферного раствора ацетата аммония с рН 4,8 методом атомно-абсорбционной спектроскопии с пламенной атомизацией [5]. Сорбцию ионов свинца изучали в диапазоне вносимых концентраций металлов в почву –  $10^{-4}$  до  $5 \cdot 10^{-3}$  моль/л.

Исследуемые почвы характеризовались следующими показателями: рН – 5,72 единицы, сумма поглощенных оснований - 6,8 мг-экв/100 г; емкость катионного обмена – 9,5 мг-экв/100 г, гумус – 2,4 %, содержание подвижного фосфора – 18,2 мг-экв/100 г; подвижного калия - 6,2 мг-экв/100 г.

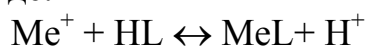
В ходе проведения сорбционного эксперимента проводили контроль уровня рН почвенного раствора, определяли процент поглощения катионов свинца (II) почвой, установлены равновесные концентрации определяемых элементов (табл. 1).

Таблица 1

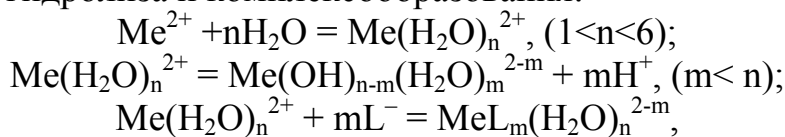
Параметры сорбции ионов свинца дерново-подзолистой почвой

С <sub>исх.</sub> (моль/л)	С <sub>равн.</sub> (моль/л)	С <sub>погл.</sub> (моль/л)	рН	[ОН <sup>-</sup> ] <sub>(моль/л)</sub>
10 <sup>-4</sup>	6,6·10 <sup>-6</sup>	9,3·10 <sup>-5</sup>	5,7	5·10 <sup>-9</sup>
10 <sup>-3</sup>	8,5·10 <sup>-5</sup>	9,2·10 <sup>-4</sup>	5,4	2,5·10 <sup>-9</sup>
2·10 <sup>-3</sup>	2·10 <sup>-4</sup>	1,8·10 <sup>-3</sup>	5,2	1,6·10 <sup>-9</sup>
5·10 <sup>-3</sup>	5,7·10 <sup>-4</sup>	4,4·10 <sup>-3</sup>	4,4	2,5·10 <sup>-10</sup>

От величины рН зависит подвижность и доступность растениям практически всех элементов питания. Концентрация водородных ионов в растворе является одним из наиболее важных факторов, определяющих равновесие реакции образования комплекса. Это обусловлено тем, что большинство органических реагентов и полифункциональных сорбентов (в том числе и почвы) относятся к слабым кислотам. Если ограничиваться рассмотрением диссоциации сорбента и гидролиза иона металла только по первой ступени, то схему комплексообразования можно представить в виде:



В равновесном растворе поведение катионов металлов определяет процессы гидратации, гидролиза и комплексообразования:



где Me<sup>2+</sup> – катион двухвалентного металла; L<sup>-</sup> – однозарядный анион (лиганд).

Расчет концентрации комплексного иона проводили по формуле:

$$[\text{ML}] = \frac{[\text{M}] \cdot [\text{L}]^y}{[\text{B}]},$$

где [M] – концентрация изучаемого иона металла (моль/л); [L] – концентрации лигандов (моль/л); B – константа нестойкости комплекса.

В таблице 2 представлены расчетные данные по возможному содержанию гидроксокомплексных изучаемого катиона:

Таблица 2

Содержание гидроксокомплексов свинца (II) (моль/л)

С <sub>внес.</sub>	[Pb(OH) <sup>+</sup> ]	[Pb(OH) <sub>2</sub> ]	[Pb(OH) <sub>3</sub> <sup>-</sup> ]
10 <sup>-4</sup>	3,8·10 <sup>-12</sup>	2,6·10 <sup>-20</sup>	1,8·10 <sup>-28</sup>
10 <sup>-3</sup>	1,9·10 <sup>-11</sup>	6,7·10 <sup>-20</sup>	2,2·10 <sup>-28</sup>
2·10 <sup>-3</sup>	2,4·10 <sup>-11</sup>	5,2·10 <sup>-20</sup>	1,1·10 <sup>-28</sup>
5·10 <sup>-3</sup>	9,4·10 <sup>-12</sup>	3,3·10 <sup>-21</sup>	1,1·10 <sup>-30</sup>

Концентрации гидроксокомплексов свинца (II) в почвенных пробах колебались в интервале от 1,9·10<sup>-11</sup> до 1,1·10<sup>-30</sup> моль/л. Рассчитанные значения существования свинца в виде [Pb(OH)<sub>3</sub><sup>-</sup>] и [Pb(OH)<sub>2</sub>] по свидетельствуют о ничтожном вкладе данных форм в общее содержание соединений в почвенном растворе. Так как при сорбции ионов металлов происходило закисление растворов, существование гидроксокомплексных существенно снижалось.

## Литература

1. Минкина, Т.М. Техногенное загрязнение почв тяжелыми металлами. Учебное пособие. / Т.М. Минкина, В.С. Крыщенко, А.П. Самохин, О.Г. Назаренко. – Ростов н / Д: Изд-во "Копицентр", 2003. – 76 с.
2. Соколов, О.А. Атлас распределения тяжелых металлов в объектах окружающей среды. / А. Соколов, В. А. Черников. – Пушкино: ОНТИ ПНЦ РАН, 1999. – 164с.
3. Алексеев, Ю.В. Тяжелые металлы в почвах и растениях / Ю.В. Алексеев – Л.: Агропромиздат, 2007. – 401 с.
4. Минеев, В. Г. Практикум по агрохимии / В.Г. Минеев [и др.]; под ред. В.Г. Минеева. – Москва: МГУ, 1989. – С.56 – 66.
5. Садовникова, Л.К. Использование почвенных вытяжек при изучении соединений тяжелых металлов / Л.К. Садовникова // Химия в сельском хозяйстве. – 1997. –№ 2. – С. 37 – 40.

УДК 547.745'853.7'854.9:543.422.4

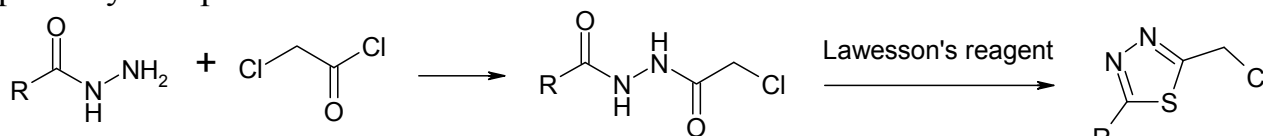
Ходаченко О.М.

### СИНТЕЗ 2-ХЛОРМЕТИЛ-5-АЛКИЛ-[1,3,4]ТИАДИАЗОЛІВ

*Чернігівський національний педагогічний університет імені Т.Г. Шевченка*

Речовини, що містять в своєму складі фрагмент 1,3,4-тіадіазолу, широко використовуються як в сільському господарстві, так і в медичній практиці. Синтез речовин, що містять в своєму складі декілька гетероциклів, являє собою ще більший інтерес як з точки зору біологічної активності, так і в хімічному плані. Тому свою роботу ми присвятили синтезу саме 2-хлорметил-5-алкіл-[1,3,4]тіадіазолів, оскільки ці речовини можна використовувати в якості алкілюючих агентів і вводити 1,3,4-тіадіазольний фрагмент в різноманітні системи.

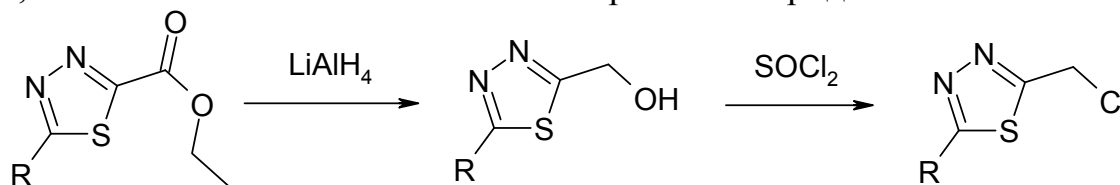
Синтез проводили на основі гідразидів відповідних карбонових кислот. Спочатку гідразиди ацилювали хлорацетилхлоридом, потім циклізували, використовуючи реактив Лавессона.



R=Me, Et, Pr, *i*-Pr, *c*-Pr

Одержані сполуки стійкі за низьких температур, але не витримують тривалого нагрівання. Очистку проводили методом колонкової хроматографії. До недоліків цього методу слід віднести невисокі виходи (25-34%) цільових продуктів.

Другий спосіб, що був нами застосований дає значно вищі виходи (74-88%) цільових речовин. Синтез проводили виходячи із естерів 1,3,4-тіадіазол-2-карбонових кислот. Естери спочатку відновлювали до спиртів літій алюмогідридодом, а потім замінювали Оксиген на Хлор тіонілхлоридом.



R=Me, Et, Pr, *i*-Pr, *c*-Pr



Синтезовані 2-хлорметил-5-алкіл-[1,3,4]тіадіазоли є аналогами вже відомих біологічно-активних речовин, мають функціональну групу та можуть бути використані для подальших перетворень. Структура всіх синтезованих сполук була доведена результатами ПМР-спектроскопії та мас-спектрометрії.

УДК 546.17+546.21+546.22

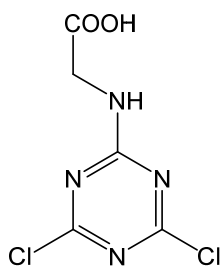
Циганков С.А., Суховєєв В.В., Швидко О.В.

## ПОШУК НОВИХ ФАРМАКОЛОГІЧНИХ ПРЕПАРАТІВ НА ОСНОВІ ЦІАНУРХЛОРИДУ

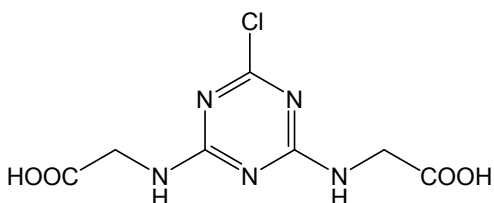
*Ніжинський державний університет імені Миколи Гоголя,  
вул. Графська, 2, м. Ніжин, Україна, vistss@gmail.com*

Дослідження останніх років показало, що похідні ціанурхлориду знаходять широке застосування в органічному синтезі. Це пов'язано з його високою реакційною здатністю та можливістю синтезу на його основі сполук з широким спектром активностей. Встановлено, що похідні ціанурхлориду виявляють антиокиснювальні властивості, антимікобактеріальну дію, активні відносно як типових, так і атипичних штамів МБТ. Серед похідних ціанурхлориду відомі сполуки з гербіцидною, фунгіцидною, пестицидною та інсектицидною дією.

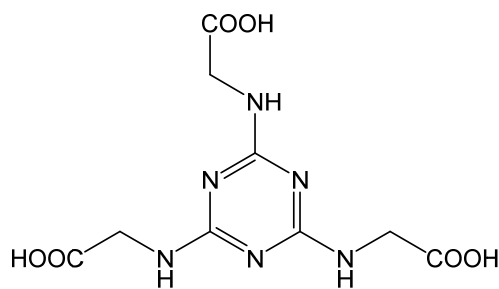
Пошук нових фармакологічних засобів, серед похідних ціанурхлориду, є актуальним завданням сучасної хімії. Метою зазначеної роботи є дослідження можливої фармакологічної дії ряду похідних моно-, ди-, та тризаміщених ціанурхлориду.



(4,6-дихлоро-1,3,5-триазин-2-іл)глїцин



2,2'-((6-хлоро-1,3,5-триазин-2,4-дііл)біс(азанеділ))діоцтова кислота



2,2',2''-((1,3,5-триазин-2,4,6-трііл)тріс(азанеділ))тріоцтова кислота

Склад та хімічна будова сполук доведена методом ЯМР<sup>1</sup>Н спектроскопії.

Прогнозування можливої фармакологічної активності одержаних сполук здійснено за допомогою комп'ютерного моделювання. Для цього використано програму PASS (Prediction of Activity spectra for Substances) версії 1.703.

Зпрогнозовано можливу фармакологічну активність та токсичність одержаних сполук. Знайдено, що досліджувані сполуки з досить високою вірогідністю (73–91%) можуть бути ефективними в якості Proteasome ATPase inhibitor, Phthalate 4,5-dioxygenase inhibitor, Glycosylphosphatidylinositol phospholipase D inhibitor, 4-Hydroxyphenylacetate 3-monoxygenase inhibitor, Carboxypeptidase Taq inhibitor, 3-Hydroxybenzoate 6-monoxygenase inhibitor, Creatininase inhibitor, ADP-thymidine kinase inhibitor, Fragilysin inhibitor, Benzoate-CoA ligase inhibitor, Aspartate-phenylpyruvate transaminase inhibitor, Pseudolysin inhibitor, 2-Hydroxyquinoline 8-monoxygenase inhibitor, NADPH peroxidase inhibitor, Acylcarnitine hydrolase

inhibitor, Fibrolase inhibitor, Fructose 5-dehydrogenase inhibitor, Phobic disorders treatment.

Прогнозування можливої токсичності здійснено за допомогою програми GUSAR.

Встановлено, що синтезовані сполуки належать до 4 та 5 класів токсичності за класифікацією К.К. Сидорова.

УДК 547.793

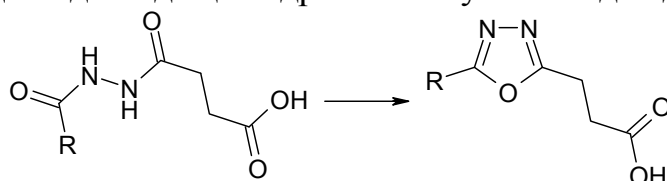
Чередніченко А.С.,  
Макей О.П., <sup>1</sup>Толмачов А.О.

### СИНТЕЗ 5-АЛКІЛЗАМІЩЕНИХ-1,3,4-ОКСАДІАЗОЛ-2-ІЛПРОПАНОВИХ КИСЛОТ

*Чернігівський національний педагогічний університет імені Т.Г. Шевченка,  
м. Чернігів, вул. Гетьмана Полуботка, 53*  
<sup>1</sup>*Науково-виробничий комплекс Укроргсинтез,  
м. Київ, вул. Червоноткацька, 67*

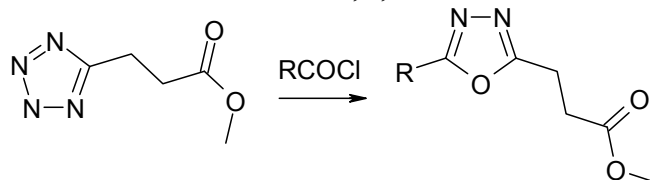
Серед похідних 1,3,4-оксадіазолів зустрічається достатня кількість сполук, що демонструють широкий діапазон біологічної активності. Зокрема, для сполук цього ряду характерні протиракова, протизапальна активність, фунгіцидна, гербіцидна, знеболювальна, антибактеріальна та протикорозійна дія.

Переважає більшість описаних у літературі сполук була синтезована шляхом гетероциклізації відповідних діацилгідразинів за участі водовіднімаючих засобів.

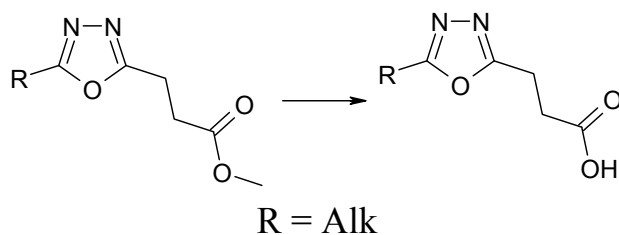


У ряді випадків автори публікацій стикалися зі складністю виділення деяких сполук, що містили аліфатичні замісники у п'ятому положенні оксадіазольного циклу.

Нами було виявлено, що досить зручним препаративним методом синтезу 5-алкілзаміщених-1,3,4-оксадіазол-2-ілпропанових кислот є варіант, в основі якого лежить взаємодія метил 3-(2H-тетразол-5-іл)пропаноату з аліфатичними ацилпохідними. У результаті термічної модифікації проміжних N-ацилпохідних були виділені естери 5-алкілзаміщених-1,3,4-оксадіазол-2-ілпропанових кислот.



Останньої стадією було здійснення гідролізу естерів, кінцевим продуктом якого стали цільові кислоти, що містили аліфатичні замісники у п'ятому положенні гетероцикла.



Таким чином, нам вдалося отримати оксидіазолвмісні пропанові кислоти з виходами 60-70%.

УДК 547-386

**Швидко О.В., Циганков С.А., Суховєєв В.В.**

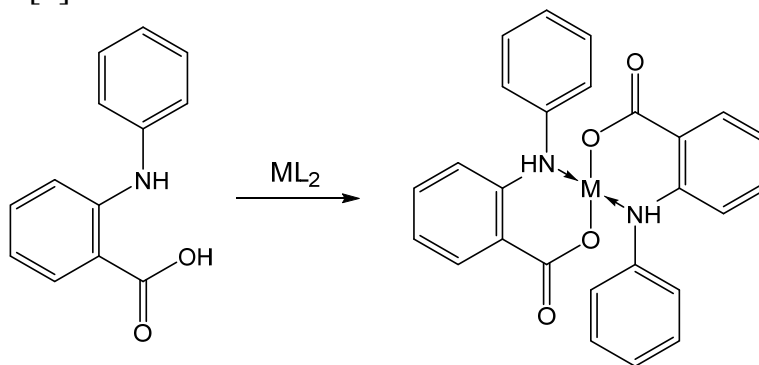
## ПОХІДНІ *o*-АМІНОБЕНЗОЙНОЇ КИСЛОТИ ЯК ПОТЕНЦІЙНІ ФАРМАКОЛОГІЧНІ ПРЕПАРАТИ

*Ніжинський державний університет імені Миколи Гоголя,  
м. Ніжин, вул. Графська, 2. vistss@gmail.com*

У ряді наших робіт, наприклад [1–2], виявлено каталіз обриву ланцюгів окиснення похідними амінобензойних кислот, що веде до гальмування процесів окиснення індивідуальних органічних сполук.

У продовження роботи [3] нами досліджено фармакологічну активність металохелатів перехідних і постперехідних металів на основі *o*-амінобензойної кислоти. Мала токсичність та широкий спектр фармакологічної дії дозволяє використовувати похідні *o*-амінобензойної кислоти у медичній практиці як високоефективні препарати.

З метою систематичних досліджень можливої фармакологічної активності металохелатів на основі *o*-амінобензойної кислоти нами одержані металокомплекси за схемою [4]:



де М = Mn (*a*), Cu (*b*), Sn (*c*).

Будову синтезованих сполук підтверджено даними елементного аналізу та ЯМР-спектроскопії.

Прогнозування можливої фармакологічної активності одержаних сполук здійснено за допомогою комп'ютерного моделювання. Для цього використано програму PASS (Prediction of Activity spectra for Substances) версії 1.703 [5]. Як еталон використали *o*-амінобензойну кислоту та відомий нестероїдний протизапальний препарат – мефенамінову кислоту (N-(2,3-диметилфеніл)-антранілову кислоту) [6].

Зпрогнозовано можливу фармакологічну активність та токсичність одержаних сполук. Знайдено, що досліджувані сполуки з досить високою вірогідністю

(70–90%) можуть бути ефективними в якості Aspulvinone dimethylallyltransferase inhibitor, NADPH peroxidase inhibitor, Arylacetonitrilase inhibitor, Taurine dehydrogenase inhibitor, 2-Hydroxymuconate-semialdehyde hydrolase inhibitor, Ubiquinol-cytochrome-c reductase inhibitor, Dehydro-L-gulonate decarboxylase inhibitor, Testosterone 17beta-dehydrogenase (NADP+) inhibitor, 5-O-(4-coumaroyl)-D-quinic acid 3'-monooxygenase inhibitor, Glutamyl endopeptidase II inhibitor, Aspartate-phenylpyruvate transaminase inhibitor, Phobic disorders treatment.

Прогнозування можливої токсичності здійснено за допомогою комп'ютерного моделювання. Для цього використано програму GUSAR [7].

Встановлено, що синтезовані сполуки належать до 4 класу токсичності за класифікацією К.К. Сидорова [8].

#### Література

1. Циганков С.А., Суховєєв В.В., Москаленко О.В., Суховєєв О.В. // "Теорія і практика сучасного природознавства". – Т 33. – Збірник наукових праць. – Херсон: ПП Вишемирський В.В. – 2011. С. 115–117. – 260 с.
2. Циганков С.А., Москаленко О.В., Суховєєв О.В. // Праці Всеукраїнської науково-практичної конференції "Актуальні питання природничих наук та методики викладання (до 70 річниці з дня народження науковця і педагога І.І. Кочерги)". – Ніжин. – 2012. – С. 43–44.
3. Суховєєв О.В., Ковтун Г.О., Суховєєв В.В та ін. // Праці III Всеукраїнської конференції "Домбровські хімічні читання". – Тернопіль, 2007. – С.157.
4. Суховєєв В.В. Нітрогено-, сульфуро- та оксигеновмісні металохелати: синтез, хімотологічні та біологічні властивості : дис. ... докт. хім. наук : 02.00.13 / Суховєєв Володимир Володимирович ; ІБОНХ. – К., 2009. – 378 с.
5. Комп'ютерна програма Prediction of Activity spectra for Substances. [Електронний ресурс]. – Режим доступу : <http://pharmaexpert.ru/PASSonline/predict.php>. – Назва з екрану (08.09.2016).
6. Mefenamic acid [Електронний ресурс]. – Режим доступу : [https://en.wikipedia.org/wiki/Mefenamic\\_acid](https://en.wikipedia.org/wiki/Mefenamic_acid). – Назва з екрану (12.09.2016).
7. Gusar online [Електронний ресурс]. – Режим доступу : <http://pharmaexpert.ru/GUSAR/acutoxpredict.html>. – Назва з екрану (08.09.2016).
8. Сидоров К.К. // Токсикология новых промышленных химических веществ. – М. : Медицина, 1979. – Вып. 13. – С. 47–51.

## Зміст

<b>М.В.Аношенко, Т.М.Базиліук</b> Підсилення міжфазних шарів в системах на основі полімерів та кополімерів стиролу	10
<b>Баранова Т.О., Суховєєв В.В., Демченко А.М.</b> Синтез та властивості нових похідних тиміну	13
<b>Барановський В.С., Симчак Р.В., Яцюк В.М., Гришук Б.Д.</b> Синтез та біологічна активність арилзаміщених $\alpha$ -імінотіокарбонатопропанамідів	14
<b>Богатиренко В. А., Процик Н. М.</b> Використання добавок модифікованих кремнеземів у складі бурових силікатних розчинів	16
<b>Булденко В.М., Труш В.В., Драпайло А.Б., Кальченко В.І., Вовк А.І.</b> Взаємодія людського сироваткового альбуміну з тіакаліксареном та його похідними	17
<b>Гавій В.М., Суховєєв В.В.</b> Вплив передпосівної обробки насіння на формування кореневої системи сої	19
<b>Гаголкіна З.О., Лобко Є.В., Клепко В.В., Кокозей В.М.</b> Діелектричні та механічні властивості сітчастих поліуретанів з введеними <i>in situ</i> гетерополярними комплексами Ca/Cu, Sr/Cu та Cu/Cd	22
<b>Головатюк В.М., Безуглий Ю.В., Кашковський В.І., Бражко О.А.</b> Дизайн та синтез нових спіроциклічних 1,2-діарилпіразолідин-3,5-діонів	24
<b>Гречка І.А., Суховєєв В.В., Демченко А.М.</b> Синтез та властивості нових похідних теофіліну	25
<b>Демченко А.М., Суховєєв В.В., Круподер Т.О.</b> Синтез та властивості нових похідних 8-гідроксихіноліну	27
<b>Дроздова Н.И., Силиванова А.И.</b> Потенциометрическое исследование процессов гидроксокомплексообразования ионов цинка в растворах состава $Zn^{2+} - SO_4^{2-} - H_2O - ЭДТА$	28
<b>Зульфигаров А.О., Потаскалов В.А., Андрийко А.А.</b> Исследование процесса пиролиза природного графита, модифицированного комплексным соединением 2Co-Ni с триэтаноломином	30
<b>Kalinin I.V.</b> Antioxidant properties of folic acid intoxication during by cadmium	33
<b>Качан С.В.</b> Хімічні форми біоелементів у ґрунтах і ґрунтових розчинах	34
<b>Качоровская О.П., Трачевский В.В., Гребенюк А.Г.</b> Условия образования внешнесферных и разнолигандных комплексов кобальта(III) по данным ЯМР	35
<b>Клімко Ю.Є., Семенова І.Г.</b> Конденсація адамантоїлізотіоціанатів з 2-амінотіазолом	36
<b>Klimko Yu.E., Pisanenko D.A., Gaidai O.V.</b> Corrosion-protecting properties of some quaternized n-arylnicotinamides. Synthesis and quantum mechanical studies	37

<b>Кобаса І.М., Кондратьєва І.В., Курек С.С.</b> Сенсибілізація титан(IV) оксиду цвітер-іонним барвником у фотокаталітичному процесі окиснення йодид іонів	38
<b>Kobzar Ya.L., Tkachenko I.M., Shekera O.V., Shevchenko V.V.</b> Synthesis of isomeric core-fluorinated dihydroxyl-substituted azomethine-containing monomers	39
<b>Кобзар О.Л., Очеретнюк А.Д., Вовк А.І.</b> N-фенацилтіазолієві солі як інгібітори бутирилхолінестерази	40
<b>Ковтун О.М., Скрипник А.О.</b> Глюкозамін з природної сировини	42
<b>Кондратьєва І.В., Кобаса І.М., Мацик В.</b> Сенсибілізація титан(IV) оксиду 1,5-дигідрокси-9,10-антрахіноном	43
<b>Кухельна Н.В.</b> Застосування гетерополікислот у якісному та кількісному аналізі	44
<b>Москаленко О.В., Суховєєв В.В., Циганков С.А..</b> Характеристика токсикологічних показників органодитіофосфатів металів як присадок до оливо	45
<b>Огородник О. Г., Янченко В.О., Демченко А. М.</b> Синтез та анальгезуюча активність похідних триазолопіримідину	46
<b>Онищенко Т.О., Суховєєв В.В., Демченко А.М.</b> Синтез та властивості нових похідних урацилу	47
<b>Павлюк О.В., Безуглий Ю.В., Кашковський В.І.</b> Нові ізооксазоловмісні сульфопохідні циклопентану, синтезовані реакціями метатезису з закриттям циклу	49
<b>Паладич Д.Л., Суховєєв В.В., Демченко А.М.</b> Синтез нових похідних 1,2,4-триазоло-3-карбокситіоаміду та дослідження їх деяких властивостей	52
<b>Полевиченко С.І., Бондар О.С., Курмакова І.М., Демченко А.М.</b> Синтез четвертинних солей піридинію з протимікробною активністю по відношенню до сульфатвідновлювальних бактерій	54
<b>Полищук В.М.,* Буряк Д.В., Гайдай А.В., Левандовский И.А.</b> Синтез фторсодержащих билдинг-блоков на основе адамантана	55
<b>Роман Л.Ю.</b> Синтез, будова та властивості координаційних сполук кадмію з деякими гідроксидами бензенових кислот у співвідношенні M:L=1:3	56
<b>Романенко Х.В., Єфтенєєва Р.І., Лявинець О.С.</b> Фосфонієві солі похідних 3,4-дигідропіримідин-2-ону як інгібітори вільно-радикальних реакцій	57
<b>Руснак О.В., Ходарев В.В., Скрипська О.В.</b> Нові похідні 3-(4-ацетилфеніл)кумарину	59
<b>Стратійчук А.О., Чобан А.Ф., Кушнір О.В., Халавка Ю.Б.</b> Вплив амонійного похідного 3,4-дигідропіримідин-2-ону на фотоокиснення наночастинок CdTe	62

<b>Семеніхін А.В., Михайленко Н.Ф., Суховєєв В.В.</b> Поліферментна активність чинника спряження $CF_1$ , ізольованого з хлоропластів шпинату	63
<b>Суховєєв В.В., Демченко А.М., Коваленко Ю.С.</b> Синтез та властивості нових похідних 8-бромтеофіліну	65
<b>Ткаченко Т.В., Каменських Д.С., Євдокименко В.О., Кашковський В.І.</b> Рослинна біомаса – альтернативне джерело палива	67
<b>Хаданович А.В.</b> Комплексообразование ионов свинца (II) с неорганическими лигандами в почвах	68
<b>Ходаченко О.М.</b> Синтез 2-хлорметил-5-алкіл-[1,3,4] тіадіазолів	71
<b>Циганков С.А., Суховєєв В.В., Швидко О.В.</b> Пошук нових фармакологічних препаратів на основі ціанурхлориду	72
<b>Чередніченко А.С., Макей О.П., Толмачов А.О.</b> Синтез 5-алкілзаміщених-1,3,4-оксадіазол-2-ілпропанових кислот	73
<b>Швидко О.В., Циганков С.А., Суховєєв В.В.</b> Похідні <i>o</i> -амінобензойної кислоти як потенційні фармакологічні препарати	74

# ДЛЯ НОТАТОК





III МІЖНАРОДНА НАУКОВО-ПРАКТИЧНА КОНФЕРЕНЦІЯ

## "Координаційні сполуки: синтез і властивості"

*(присвячується пам'яті члена-кореспондента НАН України,  
професора Г.О.Ковтуна)*

Відповідальний за випуск – **Сухов'єєв В. В.**  
Комп'ютерний набір, верстка та макетування **Циганков С. А.**

---

Підписано до друку 05.10.2016 р.

Формат 60×80×16.

Папір офсетний.

Гарнітура Times New Roman.

Ум. друк. арк. 4,59

Тираж 100 прим.

Замовлення № 151

---



Видавництво  
Ніжинського державного університету  
імені Миколи Гоголя.  
м. Ніжин, вул. Воздвиженська, 3/4  
(04631)7-19-72  
E-mail: [vidavn\\_ndu@mail.ru](mailto:vidavn_ndu@mail.ru)

Свідоцтво про внесення до Державного реєстру  
суб'єкта видавничої справи ДК № 2137 від 29.03.05 р

