

А.Б. Бектұров атындағы Химия ғылымдары  
институты» Акционерлік қоғамы

**«Нәзік органикалық синтез-2021»  
ғылыми конференциясы  
МАТЕРИАЛДАР**

3 қыркүйек 2021 жыл, Алматы



*Конференция:  
атақты химик, ҚР ҰҒА академигі  
Піралиев Қалдыбай Жайлауұлының  
80-жылдық мерейтойына арналады*



«ТОНКИЙ ОРГАНИЧЕСКИЙ СИНТЕЗ-2021». СБОРНИК МАТЕРИАЛОВ

Акционерное общество  
«Институт химических наук им. А.Б. Бектурова»

Научная конференция

# «Тонкий органический синтез-2021»

## МАТЕРИАЛЫ

3 сентября 2021 года

*Конференция посвящается:  
80-летию со дня рождения известного химика, академика НАН РК  
Пралиева Калдыбая Джайловича*

Алматы, 2021

Бас редактор

«А.Б. Бектұров атындағы Химия ғылымдары институты» АҚ бас директоры Фишер Д.Е.

Жауапты редактор

Химия ғылымдарының докторы, профессор Ю В.К.

Құрастырған:

Химия ғылымдарының докторы Ахметова Г.С., Жарқынбек Т.Е.

ҚР ҰҒА академигі, химия ғылымдарының докторы, профессор Қалдыбай Жайлауұлы Пірәлиевтің 80 жылдық мерейтойына арналған "Нәзік органикалық синтез-2021" конференциясының тезистер мен баяндамалар жинағы.

Главный редактор

Фишер Д.Е., Генеральный директор АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова»

Ответственный редактор

Доктор химических наук, профессор Ю В.К.

Составители:

Доктор химических наук Ахметова Г.С., Жарқынбек Т.Е.

Сборник тезисов докладов конференции «Тонкий органический синтез-2021», посвященный 80-летию Юбилею академика НАН РК, доктора химических наук, профессора Калдыбая Джайловича Пралиева.

ISBN

© АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова», 2021

*Издание подготовлено к печати при финансовой поддержке КН МОН РК,  
ПЦФ BR10965255*

## ҚАЛДЫБАЙ ЖАЙЛАУҰЛЫ ПІРӘЛИЕВКЕ – 80!

С.М. Киров атындағы Қазақ мемлекеттік университеті химия факультетінің түлегі, көрнекті ғалым **Қалдыбай Жайлауұлы Пірәлиевтің** бүкіл еңбек жолы «А.Б.Бектұров атындағы Химия ғылымдары институты» АҚ-мен байланысты. Мұнда ол 56 жыл бойы қарапайым зертханашыдан Қазақстан Республикасы Ұлттық Ғылым Академиясының академигіне дейін өсті. Қазіргі уақытта ҚР ҰҒА академигі Қ.Ж.Пірәлиев - Қазақ КСР Министрлер Кеңесі сыйлығының (1986 ж.), Қ.И. Сәтпаев сыйлығының (2000 ж.), ғылым, техника және білім саласындағы Қазақстан Республикасының Мемлекеттік сыйлығы» (2003 ж.), «Қазақстан Республикасының тәуелсіздігіне 10 жыл» медалімен (2001 ж.), «Қазақстан Республикасының ғылымының даму жолындағы сіңірген еңбегі үшін» төсбелгілерімен (2002 ж.) марапатталды.

Оның ғылыми қызығушылығының шеңбері органикалық химия және дәрілік заттар химиясы, стереохимия, гетероциклді қосылыстардың конформациялық анализі және нәзік органикалық синтезі, жаңа отандық зиянсыз, әрі әсерлігі өте жоғары дәрілік заттар жасау мақсатында нәзік органикалық құрылым мен биологиялық белсенділік арасындағы тәуелділікті анықтау.

ҚР ҰҒА академигі Пірәлиев Қ.Ж. - белсенді, жемісті жұмыс істейтін, ғылыми идеялар туғызатын және шығаруға қабілетті және Қазақстанды фармацевтикалық индустриясы бәсекеге қабілетті ел ретінде көру - АРМАНЫ бар. ҚР ҰҒА академигі Пірәлиев Қ.Ж. халықаралық дәрежеде танылған дәрілік заттардың нәзік органикалық синтезі мен химиясының теориясы және практикасында 1000-нан астам ғылыми еңбектерде жарық көрді, оның ішінде 7 монография, 300 өнертабыс үшін қорғалған құжаттар, олардың арасында 20 ҚР және РФ патенті мен жетекші шет елдердегі 3 патенті болып табылады. Оның мектебінің зерттеу нәтижелері Web of Science және Scopus мәліметтер базасында индекстелген ғылыми журналдарда жарияланған. Академик Қ.Ж. Пірәлиев 4 препараттың – анальгетик *Просидол*, анестезиялы және аритмияға қарсы агент *Казкаин*, антидепрессант *Цефедрин* және гипертониялық *Клофебукал* препаратының авторы.

Оның жетекшілігімен 8 докторлық және 27 кандидаттық және 2 кандидаттық диссертация қорғалды.

Вся трудовая деятельность выдающегося ученого, выпускника химического факультета Казахского Государственного университета им С.М. Кирова Калдыбая Джайловича Пралиева связана с АО «Институт химических наук им А.Б.Бектурова». Здесь за 56 лет работы он прошел путь от рядового лаборанта до академика НАН РК. В настоящее время академик НАН РК Пралиев К. Д. является лауреатом премии Совета Министров КазССР (1986 г.), премии им. К.И. Сатпаева (2000 г.), Государственной премии Республики Казахстан» (2003 г.) в области науки, техники и образования, награжден медалью «Қазақстан Республикасының 10 жылдығына» (2001 г.), нагрудным знаком «За заслуги в развитии науки Республики Казахстан» (2002 г.).

Круг его научных интересов лежит в области органической химии и химии лекарственных веществ, стереохимии, конформационном анализе и тонком органическом синтезе гетероциклических соединений, установлении зависимости между тонкой химической структурой и биологической активностью с целью выявления и создания новых безвредных и высокоэффективных отечественных лекарственных средств.

Академик НАН РК Пралиев К.Д. – активный, плодотворно работающий ученый, генерирующий и способный генерировать научные идеи, и имеющий МЕЧТУ – увидеть Казахстан страной с конкурентноспособной фармацевтической промышленностью. Крупный вклад академика НАН РК Пралиева К.Д. в теорию и практику тонкого органического синтеза и химию лекарственных веществ, получивший международное признание, нашел свое отражение в более 1000 научных публикациях, в том числе в 7 монографиях, более 300 охранных документах на предмет изобретения, из которых 20 патентов РК и РФ и 8 патентов ведущих зарубежных стран, результаты исследований его школы опубликованы в научных журналах, индексируемых в базе Web of Science и Scopus. Академик Пралиев К.Д. является автором 4 лекарственных препаратов – анальгетика Просидол, анестетика и антиаритмика Казкаин, антидепрессанта Цефедрин и гипертензивного препарата Клофебукал.

По его руководством защищены 8 докторских и 27 кандидатских и 2 PhD диссертаций.

СОДЕРЖАНИЕ

<b>АБДИЮСУПОВ Г.Г., КАДИРБЕКОВ К.А., АБЮРОВ А.Ж., ЖОЛДЫБАЕВ С.</b> Антидетонационные свойства бензинов в присутствии композиционных смесей на основе алкил-трет-алкиловых эфиров.....	9
<b>АГАТАЕВА А.А., ДЖУСИПБЕКОВ У.Ж., ЧЕРНЯКОВА Р.М., КАЙЫНБАЕВА Р.А.</b> Исследование процесса сорбции катионов серебра гексацианоферратом железа .....	10
<b>АНУАРБЕКОВА И.Н., СЫЧЕВА Е.С., МУКАНОВА М.С., ЕРЖАНОВ К.Б.</b> Ростстимулирующая активность дитиокарбаматов бис-(3-аминопропил)амин.....	12
<b>АПАЗОВ Н.О., ДИЯРОВА Б.М., БАЗАРБАЕВ Б.М., ДЖИЕМБАЕВ Б.Ж.</b> Күріш және мұнай қалдықтарын бірге өңдеуде байланыстырушы желатинді қосу арқылы түйіршіктелген белсендірілген көмір алу .....	13
<b>АРИПБАЙ Е.А., БАЖЫҚОВА К.Б., ТКАЧЕВ А.В.</b> Жаңа азобициклононан-9-ондар синтезі.....	16
<b>БАЖЫҚОВА К.Б., ЕРГАЛИЕВА Э.М., ЛАНГЕР П.</b> Синтезы на основе 3,5-замещенного тетрагидропиран-4-она .....	18
<b>БЕКТЕНОВ Н.А., КАМБАРОВА Э.А., МУРЗАКАСЫМОВА Н.С.</b> Создание новых полифункциональных ионообменников и их применение.....	19
<b>БЕРГАНАЕВА Г.Е., ИСКАКОВА Т.К.</b> Биспидин туындылардың фармакологиялық белсенділігі .....	21
<b>БЕРГАНАЕВА Г.Е., ИСКАКОВА Т.К.</b> Бициклы пиразолиндердің синтезі және қасиеттері .....	22
<b>ЕРГАЛИЕВА Э.М., ВОЛОГЖАНИНА А.В., КАЮКОВА Л.А., БАЙТУРСЫНОВА Г.П., ГУБЕНКО М.А.</b> Квантово-химический расчет молекулярной структуры и колебательных частот 3-(1h-бензо[d]имидазол-1-ил)-n'-(тозилокси)пропанамидамида с применением метода dft.....	23
<b>ЕРГОЖИН Е.Е., ЧАЛОВ Т.К., КОВРИГИНА Т.В., ХАКИМБОЛАТОВА К.Х., МЕЛЬНИКОВ Е.А.</b> Изучение сорбционной способности полифункциональных анионитов по отношению к ионам железа .....	27
<b>ЖАРҚЫНБЕК Т.Е., ТЕН А.Ю., АЛТЫНБЕКОВА И.Э., ПРАЛИЕВ К.Д., Ю В.К.</b> Модификация различных оксифосфонатов ацетатом марганца .....	29
<b>ЖУНУСБЕКОВА Н.М., ИСКАКОВА Т.К., ЧИНИБАЕВА Н.С., КУСАИНОВА Г.К., ХУДАЙБЕРГЕНОВ Н.С.</b> Получение сорбционного материала для извлечения ионов металлов из водных растворов	30
<b>ЖУСУПОВА А.И., АЙТУАРОВА А.Ш., КАСЫМОВА Д.Т., ЖУМАЛИЕВА Г.Т., НУРБОСЫНОВА С.Б., МУРЗАГУЛОВА К.Б., ЖУСУПОВА Г.Е.</b> Фармакогностическое изучение некоторых лекарственных растений, произрастающих в алматинской области.....	31
<b>ЖҮСПБЕКОВ Ө.Ж., НҮРҒАЛИЕВА Г.О., ШАКИРОВА А.Қ., БАЯХМЕТОВА З.К.</b> Түрлендірілген гуминді препараттардың шөлейттену үдерісіне оңтайлы әсері .....	32
<b>ИСА А.Б., БЕЙСЕНБАЕВ О.К., АХМЕДОВ У.К.</b> Применение мицеллярно-полимерного заводнения для повышения нефтеотдачи пластов...	34
<b>ИСА А.Б., БЕЙСЕНБАЕВ О.К., АХМЕДОВ У.К.</b> Госсиполовая смола – ценное сырье для переработки.....	36
<b>ИСАЕВА У.Б., ПРАЛИЕВ К.Д., ДАТХАЕВ У.М., ОМЫРЗАКОВ М.Т., СЕЙЛХАНОВ О.Т., АХМЕТОВА Г.С.</b> N-бензилпиперидиновые сложные эфиры фторбензойных кислот спротивоинфекционнымдействием.....	38
<b>ИСКИНЕЕВА А.С., ФАЗЫЛОВ С.Д., БУРКЕЕВ М.Ж., САРСЕНБЕКОВА А., МУСТАФАЕВА А., ПУСТОЛАЙКИНА И., БАКИРОВА Р.Е.</b> Клатратные комплексы включения витаминов и их физико-химические и биологические свойства .....	39
<b>КАЛУГИН С.Н.</b> Производные тетрагидропирана (оксана): синтез и применение.....	40

<b>КАЮКОВА Л.А., ВОЛОГЖАНИНА А.В., ПРАЛИЕВ К.Д., БАЙТУРСЫНОВА Г.П., ЕРГАЛИЕВА Э.М., КУРМАНГАЛИЕВА А.Б.</b>	
Зависимость региоселективности <i>para</i> -нитрофенилсульfoxлорирования β -амино-пропиоамидоксимов от строения субстрата .....	46
<b>КИМ Ю.Ю., ТЕН А.Ю., ПРАЛИЕВ К.Д., Ю В.К.</b>	
Поиск оптимальных условий аминифосфорилирования различных пиперазинов, имдазола и бензимидазола.....	49
<b>КИЧАТОВ К.Г., ПРОСОЧКИНА Т.Р., ВОРОБЬЕВА И.С.</b>	
Разработка цифрового двойника процесса алкилирования бензола пропиленом.....	50
<b>КОМАРОВА Е.В.</b>	
Кинетика термического инициирования полимеризации стирола.....	51
<b>КОМАРОВА Е.В., НИКИТИНА А.П., ТРАПЕЗНИКОВА Е.Ф., ЕРМАКОВ В.Е.</b>	
Направления использования тяжелой смолы пиролиза .....	53
<b>КОШЕТОВА Ж.А., Ю В.К., ПИРӘЛИЕВ Қ.Д., МАЛМАКОВА А.Е., ЖУМАНОВА Н.А., БАКТЫБАЕВА Л.К., ДАУЛЕТ Г.</b>	
Синтетикалық гемостимуляторларды іздеу.....	55
<b>КУЗЬМИНА А.А., ЦУКЕРМАН М.В., АСЫЛХАНОВ Ж.С., КАЛУГИН С.Н., ЕРЖАНОВ К.Б., АБИЛОВ Ж.А.</b>	
Синтез новых производных оксана.....	56
<b>ҚАЙЫҢБАЕВА Р.А., ҚОЖАБЕКОВА Н.Н., СҰЛТАНБАЕВА Г.Ш., АҒАТАЕВА А.А., ЧЕРНЯКОВА Р.М., ЖҮСПБЕКОВ Ө.Ж.</b>	
Қышқыл және хитозанмодифицирленген сорбенттердің сорбциялық қасиеттері .....	58
<b>ҚАЛДЫБАЕВА А.Б., МАЛМАКОВА А.Е., ТОКСЕИТОВА А.Д., Ю В.К., ПРАЛИЕВ К.Д., ЛИ Т.</b>	
β-циклодекстриновые комплексы диалкил[(3-(1 <i>h</i> -имидазол-1-ил)пропиламино)(3-фторфенил)метил]фосфонатов как стимуляторы роста пшеницы.....	61
<b>ЛУТФУЛЛИНА А.Р., БАЙГУЗИНА А.Р.</b>	
Реакция циклогексанола с органическиминитрилами в присутствииCuBr <sub>2</sub> .....	62
<b>МАКСАТОВА А.М., ПИРӘЛИЕВ К.Д., ДАТХАЕВ У.М., ОМЫРЗАКОВ М.Т., АХМЕТОВА Г.С.</b>	
Микробқа қарсы тиімділігі жоғары айр-2 препаратын синтездеу және әзірлеу .....	64
<b>МАКСАТОВА А.М., ПИРӘЛИЕВ К.Д., ДАТХАЕВ У.М., ОМЫРЗАКОВ М.Т., АХМЕТОВА Г.С.</b>	
Фторқұрамдас пиперидиндердің алмастырылған туындылары қатарынан инфекцияға қарсы препараттарды іздеу .....	65
<b>МУКАНОВА М.С., СЫЧЕВА Е.С., ЯЩУК К.В., МАШИНА О.А.</b>	
Синтез тиоангидридов на основе 1,2,3-бензотриазола и 2,4-дигидроксопиримидина .....	66
<b>МУЛДАХМЕТОВ З.М., ГАЗАЛИЕВ А.М., ЖИВОТОВА Т.С., ЖАКИНА А.Х., ВАСИЛЕЦ Е.П., АРНТ О.В., КУДРЯВЦЕВА Е.В., ӘЛЖАНҚЫЗЫ А.</b>	
Композиты на основе гуминовой кислоты.....	67
<b>МУХАМЕДОВА Р.Ф., БОЙКО Г.И., ЛЮБЧЕНКО Н.П.</b>	
Сополимеры малеинового ангидрида с различной функциональной активностью .....	71
<b>НУРГАЛИЕВА Г.О., ДЖУСИПБЕКОВ У.Ж., БАЯХМЕТОВА З.К., ШАКИРОВА А.К.</b>	
Получение и применение гуминовых композиционных материалов .....	72
<b>НУРКЕНОВ О.А., КИШКЕНТАЕВА А.С., НУРМАГАНБЕТОВ Ж.С., ФАЗЫЛОВ С.Д., ГАЗАЛИЕВ А.М.</b>	
Синтез 1,2,3-триазолсодержащего производного алкалоидов лупинина и цитизина.....	74
<b>ОМАРОВА Р.А., БОШКАЕВА А.К., ПРАЛИЕВ К.Д., АХМЕТОВА Г.С., БЕКЕЖАНОВА Ф.А.</b>	
Теоретические основы моделирования новых соединений пиперидина .....	75
<b>ОМИРЗАКОВА Н.К., ДАТХАЕВ У.М., КИЕКБАЕВА Л.Н., АХТАЕВА Н.З., БОШКАЕВА А.К.</b>	
Особенности строения растения <i>ewersmanni Bunge</i> из семейства <i>Leontice</i> .....	77
<b>ПАНЬШИНА С. Ю., БАКИБАЕВ А. А.</b>	
Новые методы синтеза и превращения бициклических бисмочевин под действием	78



оксиэтилилендидисфоновой кислоты .....	
<b>САМОЙЛОВ Н.А.</b>	
Математическое моделирование процесса гидроочистки дизельного топлива как сложной многокомпонентной реакционной системы.....	79
<b>САМОЙЛОВ Н.А.</b>	
Особенности математического моделирования сложных реакционных систем по кинетическим характеристикам.....	82
<b>СУЛТАНБАЕВА Г.Ш., ДЖУСИПБЕКОВ У.Ж., КУСАИНОВА М.Ж., КАЙЫНБАЕВА Р.А., КОЖАБЕКОВА Н.Н.</b>	
Изучение процесса сорбции сульфат-ионов кислото- и хитозанмодифицированными цеолитами.....	85
<b>СЫРМАНОВА К.К., КОВАЛЕВА А.Е., КАЛДЫБЕКОВА Ж.Б., БАЙЖАНОВА Ш.Б.</b>	
Применение ультразвука в регенерации отработанных моторных масел.....	87
<b>СЫРМАНОВА К.К., АЛИПБЕКОВА Ж.К., КАЛДЫБЕКОВА Ж.Б., БАЙЖАНОВА Ш.Б., БОТАШЕВ Е.Т., АГАБЕКОВА А.Б.</b>	
Перспективы применения резиновой крошки тоо «эко-шина» в качестве компонента асфальтобетонных смесей дорожном строительстве.....	90
<b>СЫЧЕВА Е.С., МУКАНОВА М.С., СЕЙЛХАНОВ О.Т., ЕРЖАНОВ К.Б.</b>	
Современные перспективы применения регуляторов роста растений в сельском хозяйстве	93
<b>ТУЛЕУОВ Б.И., ТЕМИРГАЗИЕВ Б.С., КОЖАНОВА А.М., ЖАНАРБЕК А., МЕНДИБАЕВА А.Ж., АДЕКЕНОВ С.М.</b>	
Новые производные эрдистерона с заданными свойствами.....	96
<b>ТУРЕБЕКОВА Г.З., БЕЙСЕНБАЕВ О.К., ПУСУРМАНОВА Г.Ж.</b>	
Химическая модификация синтетических каучуков природными минералами.....	97
<b>ТУСУПКАЛИЕВ Е.А., БАИМБЕТОВ М.Н., ЖУМАГАЛИЕВ С.Ж., ХАКИМБУЛАТОВА К.Х.</b>	
Масс-спектрометрическое исследование некоторых важных мономеров, входящие в цепь без изменения массы.....	100
<b>ТУСУПКАЛИЕВ Е.А., МУКАНОВА М.С., ХАКИМБОЛАТОВА К.Х., БАИМБЕТОВ М.Н., КАЙНАРБАЕВА Ж.Н., ЖУМАГАЛИЕВ С.Ж.</b>	
Масс-спектрометрическое поведение некоторых производных пиррола при ионизации электронами .....	102
<b>УМЕРЗАКОВА М.Б., САРИЕВА Р.Б., <u>КРАВЦОВА В.Д.</u></b>	
Композиционные материалы на основе арилалициклическихсополиимидов с различными добавками с улучшенными свойствами .....	105
<b>ФАЗЫЛОВ С.Д., НУРКЕНОВ О.А., БУРКЕЕВ М.Ж., САРСЕНБЕКОВА А., ПУСТОЛАЙКИНА И., ЖУМАГАЛИЕВА Т.</b>	
Синтез и изучение наноструктурированныхсупрамолекулярных производных алкалоида анабазина .....	106
<b>ХАРЛАМОВА Т.В.</b>	
Ультразвуковая активация в синтезе производных 9,10-антрахинона.....	107
<b>ХАРЛАМОВА Т.В.</b>	
Анализ структура-фунгицидная активность в ряду производных антрахинона содержащих фрагмент циклической карбоновой кислоты .....	109
<b>АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ.....</b>	111



## АНТИДЕТОНАЦИОННЫЕ СВОЙСТВА БЕНЗИНОВ В ПРИСУТСТВИИ КОМПОЗИЦИОННЫХ СМЕСЕЙ НА ОСНОВЕ АЛКИЛ-ТРЕТ-АЛКИЛОВЫХ ЭФИРОВ

Абдюсупов Г.Г., Кадирбеков К.А., Абюров А.Ж., Жолдыбаев С.

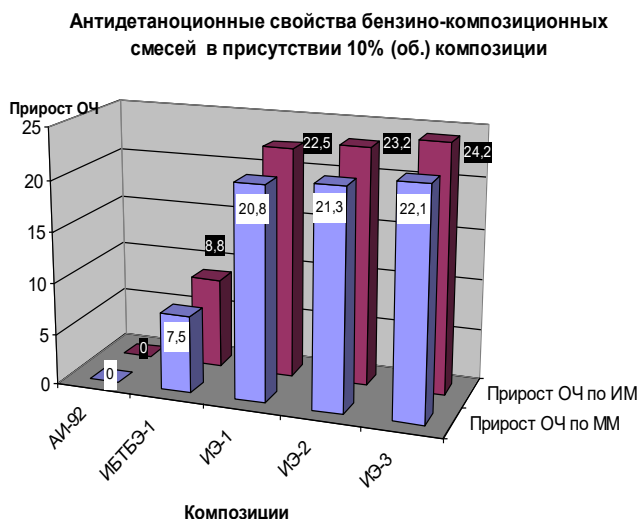
г. Алматы, АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова», e-mail: [gaziz\\_86@inbox.ru](mailto:gaziz_86@inbox.ru)

Анализ имеющихся литературных данных по синтезу алкил-трет-алкиловых эфиров (АТАЭ) показывает, что они затрагивают в основном закономерности и технологические особенности получения МТБЭ в жидкой фазе. Однако его производство усложняется тем, что в качестве одного из реагентов используется метанол, являющийся сильным ядом. Кроме того, получения чистых образцов известных АТАЭ сопровождается образованием побочных продуктов, в основном димеров и тримеровизоолефинов в присутствии протодонорных катализаторов, а также образованием азетропных смесей спирт – эфир – олефин. Так известно, что стоимость выделения МТБЭ из реакционной смеси составляет 50-90% от стоимости моторных топлив на его основе.

В связи чем, нами изучены условия синтеза и выделения эфиров: этил-трет-бутилового (ЭТБЭ) и изо-бутил-трет-бутилового (ИБТБЭ) и на их основе созданы октаноповышающие композиционные смеси, а также разработаны новые гетерогенные катализаторы для синтеза ЭТБЭ и ИБТБЭ с высокими их выходами и малыми количествами побочных продуктов. В данном сообщении представлена информация об антидетонационных свойствах бензинов в присутствии композиционных смесей на основе ИБТБЭ.

В качестве кислородсодержащих компонентов композиционных смесей к бензинам использовали, кроме синтезированного ИБТБЭ, технический ректифицированный этанол (ГОСТ 18300-87) и промышленный изобутанол. В качестве базового бензина использовали товарный бензин марки Аи-92 ТОО «ПКОП» (г. Шымкент) с ОЧ=83,6 (по ММ) и ОЧ=92,6 (по ИМ). Исследуемые октаноповышающие композиции добавляли в базовый бензин АИ-92 в количестве 10% (масс.).

Результаты исследования антидетонационных свойств бензина в присутствии композиционных смесей представлены в диаграмме (рисунок).



Выявлено, что прирост ОЧ зависит как от количества добавок, так и от соотношения в ней компонентов. Большую эффективность проявляют композиции, в которых доля этанола выше доли изобутанола и других компонентов. Причем с увеличением доли этанола ОЧ растет пропорционально. Октановое число базового бензина АИ-92 увеличивается еще больше при добавлении композиции серии ИЭ, где дополнительными компонентами (кроме этанола и изобутанола) являются ИБТБЭ и некоторые сопутствующие продукты его синтеза. Следует отметить, что при добавлении чистого изобутил-трет-бутилового эфира в количестве 1% в бензин Аи-92, прирост ОЧ бензина составляет 7-8 пунктов.

## ИССЛЕДОВАНИЕ ПРОЦЕССА СОРБЦИИ КАТИОНОВ СЕРЕБРА ГЕКСАЦИАНОФЕРАТОМ ЖЕЛЕЗА

**Агатаева А.А., Джусипбеков У.Ж., Чернякова Р.М., Кайынбаева Р.А.**

г. Алматы, АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова», e-mail: [aktolkynabduali@gmail.com](mailto:aktolkynabduali@gmail.com)

Переработка фосфоритов Каратау на элементный фосфор сопровождается образованием жидких отходов, таких как котрельное «молоко» (КМ), которые накапливаются в отстойниках. Котрельное «молоко» характеризуется сложным химическим составом, в нем находятся цианосодержащие компоненты и даже редкие и благородные металлы – индий, галлий, таллий, серебро.

Малорастворимые ферроцианиды, в том числе гексацианоферрат железа, имеют кристаллическую решетку, каналы которого характеризуются диаметром не менее 3,0-3,5Å [1], вследствие чего они способны соосаждать катионы с достаточно большим диаметром, например меди (II) [2], и сорбировать органические вещества [3]. В научной литературе имеются данные о молекулярной сорбции катионов цезия, меди, железа, кобальта гексацианоферратом железа [4-5].

В группу поглощаемых гексацианоферратом (II) железа соединений входят полярные молекулы, например, воды (2,76Å) и аммиака (2,84Å), а также катионы и анионы, собственные размеры которых позволяют сравнительно легко проникать в пустоты ферроцианидной решетки. Особенности строения гексацианоферрата (II) железа позволяют использовать это соединение для получения сорбентов на его основе [6].

Не исключено, что индий, галлий или серебро будут осаждаться (сорбироваться) с гексацианоферратом железа, что позволит выделить указанные металлы из жидкой фазы котрельного «молока».

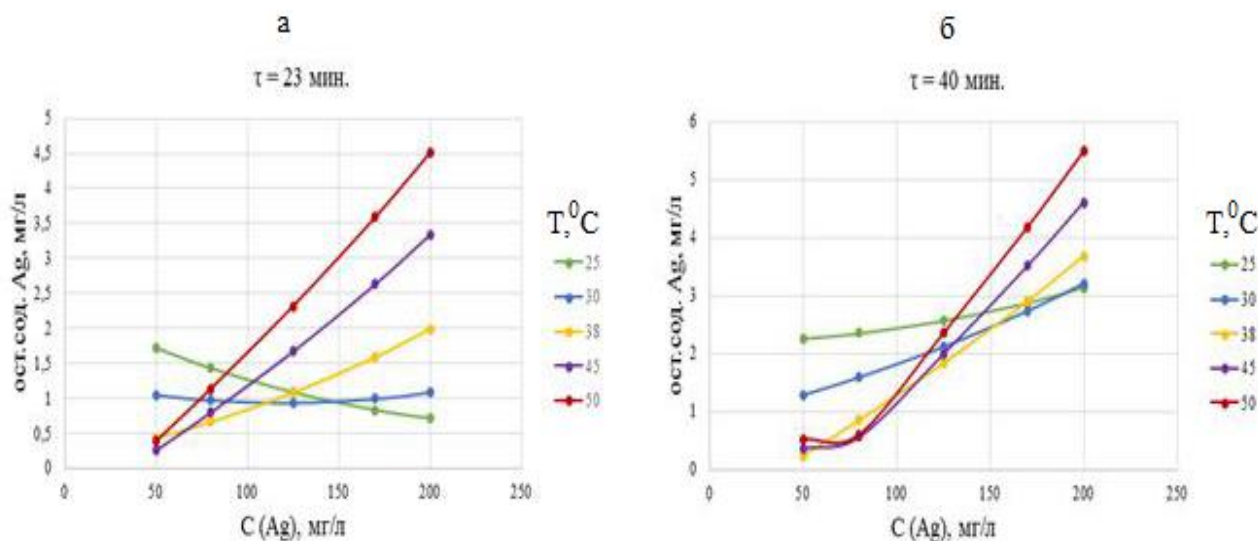
Методика исследования системы сводилась к следующему. К постоянному количеству раствора азотнокислого серебра (Ж, 100 масс. ч.) с определенной концентрацией катионов  $Ag^+$  вводили порошок гексацианоферрата железа (Т, 1 масс.ч.) и затем отбирали через определенные промежутки времени аликвотную часть, в которой определяли остаточное содержание ионов  $Ag^+$ . Опыты проводили в условиях перемешивания при постоянном соотношении гексацианоферрат железа (Т) : раствор  $AgNO_3$  (Ж) равном 1:100.

Из рисунка видно, что кинетические кривые сорбции катионов серебра во всем исследуемом времени и температуре носят практически прямолинейный характер. Взаимовлияние концентрации серебра, времени и температуры процесса проявляется в изменении хода сорбционных кривых. Так, кривые сорбции с увеличением концентрации катионов  $Ag^+$  возрастают с повышением температуры от 38 до 50°C и снижаются при 25-30°C для 23 мин. процесса (рисунок а). Соответственно степень сорбции серебра уменьшается и увеличивается.

Следовательно при невысоких температурах до 23 мин. процесса увеличение концентрации серебра приводит к постоянному снижению остаточного содержания серебра в растворе, что указывает на постоянно протекающий процесс сорбции катионов  $Ag^+$  гексацианоферратом железа. Повышение температуры наоборот способствует росту концентрации серебра в растворе, то есть гексацианоферрат железа сначала сорбирует катионы серебра, а затем протекает процесс их десорбции из сорбента в раствор.

Из рисунка также видно, что одновременное повышение концентрации катионов  $Ag^+$  и времени процесса до 40 мин. при любой рассматриваемой температуре приводит к увеличению остаточного содержания серебра в растворе (рисунок б). То есть, в данных условиях остаточное содержание  $Ag$  в растворе с ростом его концентрации увеличивается, соответственно степень сорбции серебра снижается. В указанных условиях с ростом концентрации катионов серебра протекает процесс их десорбции из сорбента в раствор. Поскольку процесс сорбции исследуется в неравновесных условиях, то, возможно, что в

данных условиях происходит насыщение гексацианоферрата железа катионами серебра и, как следствие, ухудшение его сорбционных свойств, вследствие выделения уже сорбированного серебра обратно в раствор (процесс десорбции).



**Рисунок** – Влияние концентрации Ag на его остаточное содержание в жидкой фазе системы  $\text{Fe}_4[\text{Fe}(\text{CN})_6]_3\text{-Ag}^+\text{-H}_2\text{O}$ .

Следовательно, высокая степень сорбции катионов  $\text{Ag}^+$  гексацианоферратом железа в низкоконцентрированных серебросодержащих растворах (50 мг/л) достигается при повышенной температуре (38-50°C), а в концентрированных растворах (200 мг/л  $\text{Ag}^+$ ) - при низкой температуре (25-30°C) для 23 мин. процесса.

Причем повышение концентрации серебра в растворе и времени процесса для любой из исследуемых температур нежелательно, т.к. инициирует процесс десорбции адсорбированных катионов  $\text{Ag}^+$  на сорбенте в раствор. Следует отметить, что степень сорбции серебра ферроцианидом железа в исследуемых условиях является очень высокой и колеблется в пределах (99,5-97,7)%. Таким образом, из проведенных исследований следует, что ферроцианид железа поглощает катионы серебра  $\text{Ag}^+$  из слабокислого водного раствора (рН 4) и может эффективно использоваться для их концентрирования из жидкой фазы фосфорного шлама.

## Литература

1. Сейфер Г.Б., Макарова З.А. О цеолитном внедрении одновалентных катионов в осадки труднорастворимых ферроцианидов. – Журн. неорг. хим., 1964. по 2 (10), pp. 2782-2784.
2. Козлов А.С., Демкина И.И. Соосаждение меди с ферроцианидом калия. – Журн. неорг.хим., 1964. pp. 1285-1288.
3. Сейфер Г.Б. О природе сорбции органических веществ ферроцианидами. – Журн. неорг. хим., 1962, 1746–1748.
4. Вольхин В. В., Егоров Ю.В., Белинская Ф.А. и др. Неорганические сорбенты // Ионный обмен. – М: Наука, 1981. pp. 25 – 44.
5. Ремез В.П., Сингуров С.Ю. Зависимость сорбционных свойств ферроцианида железа от его состава. // Тез. докл. конф. «Физико-химические основы природы селективности неорганических сорбентов». – Свердловск, 1979. pp. 37 – 40.
6. Мильгрант В.Г., Морданенко В.К., Стрелько В.К., Яценко В.В. Исследование гидролитической устойчивости ферроцианида железа (II) и волокнистого сорбента на его основе// Журнал неорганической химии, 1994.- Т.39.- №9. - С.1456-1460.



## КҮРІШ ЖӘНЕ МҰНАЙ ҚАЛДЫҚТАРЫН БІРГЕ ӨНДЕУДЕ БАЙЛАНЫСТЫРУШЫ ЖЕЛАТИНДІ ҚОСУ АРҚЫЛЫ ТҮЙІРШІКТЕЛГЕН БЕЛСЕНДІРІЛГЕН КӨМІР АЛУ

Аппазов Н.О.<sup>а,б</sup>, Диярова Б.М.<sup>в</sup>, Базарбаев Б.М.<sup>а</sup>, Джиембаев Б.Ж.<sup>в</sup>

<sup>а</sup> Қорқыт Ата атындағы Қызылорда университеті

<sup>б</sup> Қызылорда қ.,Ы. Жақаев атындағы Қазақ күріш шаруашылығы ғылыми-зерттеу институты

<sup>в</sup> Алматы қ.,Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті,

e-mail: [nurasar.82@mail.ru](mailto:nurasar.82@mail.ru)

**Кіріспе.** Адсорбция процесі ағынды сулардағы еріген ластаушы заттардың (органикалық және бейорганикалық) концентрациясын жоюдың немесе төмендетудің тиімді физикалық әдісі ретінде кеңінен қолданылады.

Адсорбция қарапайымдылығы, экономикалық тиімділігі және кең қолданылуына байланысты басқа әдістермен салыстырғанда анағұрлым жетілдірілген әдіс ретінде танылған. Суды тазартуда адсорбент ретінде түйіршікті белсендірілген көмір, ұнтақты белсендірілген көмір, көміртекті талшық, қара көмір және т.б. белсендірілген көмір материалдары кеңінен қолданылады [1].

Белсендірілген көмір (БК) - ауадан, топырақтан және сұйықтықтардан ластаушы заттардың кең спектрін жою үшін тиімді қолданылатын ең жақсы адсорбент [2].

Белсендірілген көмір каштан қабығы, қарбыз қабығы, күріш қабығы, манго дәндері, банан қабығы, апельсин қабығы, бұршақ қабығы, жаңғақ қабығы және ауылшаруашылық қалдықтарынан алынады [3]. Ауылшаруашылық тектес бұл қалдықтар салыстырмалы түрде арзан, қол жетімді, биологиялық жолмен ыдырайтын, экологиялық таза және құрамында адсорбциялық қасиетін жақсартуға болатын лигноцеллюлозды материалы бар шикізат көздері.

Белсендірілген көмір сипаттамалары шикізаттың физикалық және химиялық қасиеттеріне, сондай-ақ белсендіру әдістеріне байланысты [4]. Белсендірілген көмір алу үшін көп жағдайда екі тәсіл таңдалады. Біріншісі – бастапқы лигнитті қалдықты ұнтақтау, содан кейін карбонизация және белсендіру. Екінші әдіс шикізатты карбонизациялау, түйіршіктеу, ұнтақтау үрдісінен кейін белсендіру үрдісі жүзеге асырылады.

Түйіршіктеу – құрамында көміртегісі бар химия өндірісінің қалдықтарын кәдеге жаратудың тиімді әдісі [5]. Бұл өндеу әдісін теорияда қолдану үлкен беріктік пен тығыздықтағы белсендірілген көмірді алуға мүмкіндік береді. Сонымен қатар кейбір деректерде белсендірілген көмір алуда со-термолиз үрдісі қолданыс тапқан.

Со-термолиз – бұл қарапайым термолиздің бір операциялық жүйесінде екі немесе одан да көп шикізат өңделетін үрдіс [6]. Осылайша, ол шикізаттың қолайлы қасиеттерін тиімді біріктіріп, белсендірілген көмірдің сипаттамаларын жақсарта алады [7]. Біздің зерттеу жұмыстарымызда күріш сабаны мен мұнай шламын және күріш қауызымен мұнай шламын со-термолиздеу үрдістерін жүргізу арқылы белсендірілген көмір алудың оңтайлы жағдайлары анықталған [8, 9, 10].

**Зерттеу жұмысының мақсаты:** күріш қалдығымен мұнай шламына байланыстырушы желатинді қосу арқылы түйіршіктелген белсендірілген көмір алудың оңтайлы жағдайын анықтау болып табылады.

**Нәтижелер және талқылау.** Күріш қалдығымен (қауызы және сабан) мұнай шламына байланыстырғыш желатинді қосу арқылы түйіршіктер алынды. Түйіршіктерді құбырлы пешке салып герметикалық түрде жабады, түтік цилиндрден жеткізілетін азот газымен толтырылады, карбонизация процесі минутына 10°C-тан 500°C-қа дейін көтеріліп, осы температурада 100 минут ұсталды, ал белсендіру 850°C температурада карбонизат және су буының 2:1 қатынасында жүргізілді. Күріш қалдығы, мұнай шламы және желатин қатынасының түйіршіктелген белсендірілген көмірдің шығымы мен физика-химиялық қасиетіне әсері зерттелді.



**Кесте 1** – Күріш сабаны мен қауызын мұнай шламымен бірге өңдеуде байланыстырушы желатинді қосу арқылы алынған түйіршіктелген белсендірілген көмірдің қасиеттері

Көрсеткіш	Эксперименттік зерттеулердің нәтижесі							
	Күріш сабаны: желатин	Күріш сабаны: мұнай шламы: желатин			Күріш қауызы: желатин	Күріш қауызы: мұнай шламы: желатин		
Қатынас	10:1	9:1:1.1	9:1:1.25	9:1:2	10:1	9:1:1.1	9:1:1.25	9:1:2
Карбонизация температурасы, °С	500							
Карбонизат шығымы, мас %	78.86	71.28	70.56	80.53	70.3	76.28	69.8	62.86
Белсендіру температурасы, °С	850							
Су:карбонизат қатынасы	2:1							
Белсендірілген көмірдің шығымы, мас. %	25.06	30.07	26.07	27.41	35.9	34.23	33.8	37.08
Йод бойынша адсорбциялық белсенділік, %	32.8	51.5	59.9	71.2	72.24	87.63	88.45	89.72
Су бойынша жалпы кеуектер көлемі, см <sup>3</sup> /г	0.94	0.99	0.99	0.91	0.50	0.42	0.49	0.56
Блғалдың массалық үлесі, %	0.70	1.09	0.50	2.30	2.65	1.99	2.18	2.21
Үйінділік тығыздығы, г/дм <sup>3</sup>	241.36	232.73	201.12	201.52	463.19	458.45	459.06	433.99
Метилен көгі бойынша адсорбциялық белсенділік, мг/г	372.29	370.12	378.78	380.74	335.82	341.56	345.51	356.01

1-кестеде күріш қалдығы, мұнай шламы және желатинді 10:1, 9:1:1.1, 9:1:1.25, 9:1:2 қатынастарында қосу арқылы түйіршіктелген белсендірілген көмір алынды. Күріш қауызы:мұнай шламы: желатин қосу арқылы түйіршіктелген белсендірілген көмірдің ең жоғары мәндері йод бойынша адсорбциялық белсенділігі 89.72 %-ды, су бойынша жалпы кеуектер көлемі 0.560 см<sup>3</sup>/г, үйінділік тығыздығы 433.99 г/дм<sup>3</sup> және метилен көгі бойынша адсорбциялық белсенділігі 356.01 мг/г көрсетті. Зерттеу нәтижесі бойынша түйіршіктелген белсендірілген көмір алу үшін күріш қауызы:мұнай шламы:желатиннің 9:1:2 қатынасы оңтайлы жағдай болатыны анықталды. Оңтайлы жағдайда түйіршіктелген белсендірілген көмір БАУ-МФ маркасының сипаттамаларына сәйкес келеді. 1-суретте. күріш қауызы:мұнай шламы: желатиннің 9:1:2 қатынасында түйіршіктелген белсендірілген көмір суреті.



**Сурет 1** – Күріш қауызы:мұнай шламы:желатиннің 9:1:2 қатынасынан алынған түйіршіктелген белсендірілген көмір.

**Қорытынды.** Қорыта келе зерттеу жұмысында күріш және мұнай қалдығына әртүрлі қатынаста желатинді қосу арқылы брикеттелген түйіршіктелген белсендірілген көмір алынды. Түйіршіктелген белсендірілген көмірлердің физика-химиялық қасиеттері зерттеліп, олардың оңтайлы жағдайы анықталды. Оңтайлы жағдайда түйіршіктелген белсендірілген көмірдің адсорбциялық белсенділік нәтижесіне сүйене отырып, алынған адсорбент суды бейорганикалық қоспалардан тазартуға мүмкіндік береді.

#### **Әдебиеттер**

1. Ahmad T., Rafatullah M., Ghazali A., Sulaiman O., Hashim R., Ahmad A., Removal of pesticides from water and wastewater by different adsorbents: areview. *J. Environ. Sci. Health*, **2010**, 28 (4), 231-271.
2. Zhonghuo H., Srinivasan M. P. and Yaming N., Novel activation process for preparing highly mesoporous activated carbons. *Carbon*, **2001**, 39, 877-886.
3. Srivastava B., Jhelum V., Basu D.D., Patanjali P.K., Adsorbents for pesticide uptake from contaminated water: a review. *J. Sci. Ind. Res. (India)*, **2009**, 68, 839-850.
4. Lua A.C., Guo J., Microporous oil-palm-shell activated carbon prepared by physical activation for gas phase adsorption. *Lagmuir*, **2001**, 17, 7112-7117.
5. Пиялкин В. Н., Леонович А. А., Ширшиков В. И. К вопросу о монолитизации древесно-угольных брикетов. *Известия Санкт-Петербургской Лесотехнической академии*, **2012**, № 198, 201–208.
6. Hassan H., Lim J.K., Hameed B.H., Recent progress on biomass co-pyrolysis conversion into high-quality bio-oil, *Bioresour. Technol.*, 2016, 221, 645-655.
7. Fan S., Li H., Wang Y., Wang Z., Tang J., Tang J., Li X., Cadmium removal from aqueous solution by biochar obtained by co-pyrolysis of sewage sludge with tea waste. *Res. Chem. Intermed.*, **2018**, 44, 135-154.
8. Bainazarova S. R., Diyarova B. M., Lygina O., Shuragaziyeva A. T., Tapalova A. S., Zhusupova L. A., Appazov N. O., Processing of rice wastes into activated carbon, *Chemical Journal of Kazakhstan*, **2018**, 64, №4, 259-262.
9. Аппазов Н. О., Базарбаев Б. М., Диярова Б. М., Лыгина О. С., Шурагазиева А. Т., Акылбеков Н. И. *Получение активированного угля со-термолизом рисовой соломы и нефтешлама*. *Химический Журнал Казахстана*, **2019**, 68, №4, 46-51.
10. Аппазов Н. О., Базарбаев Б. М., Диярова Б. М., Лыгина О. С., Шурагазиева А. Т., Акылбеков Н. И. *Получение активированного угля со-термолизом рисовой шелухи и нефтешлама*. *Химический Журнал Казахстана*, **2019**, 68, №4, 77-83.



## ЖАҢА АЗОБИЦИКЛОНОНАН-9-ОНДАР СИНТЕЗІ

Арипбай Е.А.<sup>а</sup>, Бажықова К.Б.<sup>а</sup>, Ткачев А.В.<sup>б</sup>

<sup>а</sup> Алматы қ., аль-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университет, e-mail: [eldosik\\_95@mail.ru](mailto:eldosik_95@mail.ru)

<sup>б</sup> Новосибирск мемлекеттік университеті

Қазіргі таңда медициналық тәжірибеде екі жүзден астам молекулаларының белсенді басында пиперидинді циклы бар дәрілік препараттар қолданылады. Жүрек-қан тамырлары жүйесіне әсер ететін құралдар (тамырды кеңейткіш, аритмияға қарсы, гипотензивті), орталық және перифериялық нейротропты әсері бар (анальгетиктер, анестетиктер, психотропты препараттар және т.б.), сонымен қатар түйілуді басатын дәрілер, диуретикалық, антиэметиктер және басқалардың да толық қатары пиперидин туындыларының арасынан анықталынып, медициналық тәжірибеге енгізілген [1-3].

Қазіргі фармацевтикалық химияда жаңа биологиялық белсенді қосылыстарды іздестіру көкейтесті мәселе болып табылады.

Жалпы орынбасқан гетероциклдердің, әсіресе орынбасқан 3,7-диазабициклононан-9-он және т.б. азотты туындыларының химиялық және биологиялық белсенділігі жоғары екендігі белгілі. Диазабициклононан туындыларының басым көпшілігі түрлі анальгезирлеуші, анестезирлеуші, спазмолитикалық, антибактериалдық, жүрек-қан тамыр ауруларын мен туберкулез, ісіктерге қарсы препараттарды синтездеуде қолданылады. Фармакологиялық белсенділігінен бөлек өсімдіктің өсуін реттеуші препараттар дайындауда да қолданылады [4,5].

Осыған байланысты жаңа диазабициклононан туындыларын синтездеу, құрылысын мен қасиеттерін зерттеудің теориялық және тәжірибелік маңызы зор.

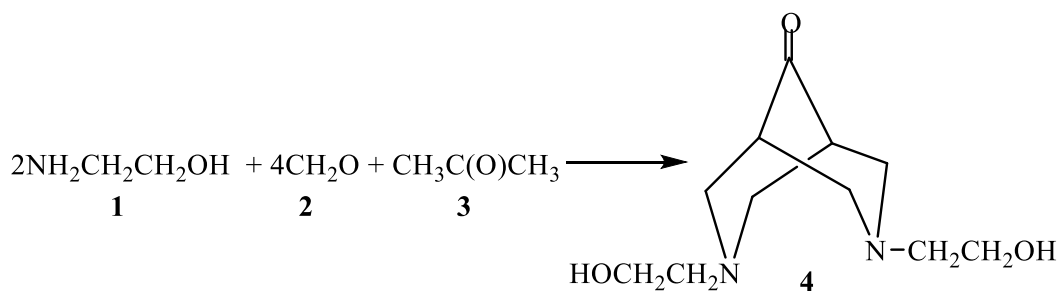
Жоғарыда айтылған бағытты жалғастыру мақсатында Манних реакциясы арқылы 1:4 қатынастағы моноэтанолламин (1) мен формалиннің (2) ацетонмен (3) 1:2:4 қатынасындағы конденсациясынан 3,7-диэтилол-3,7-диазабицикло[3.3.1]нонан-9-он (4) синтездеу жолдары қарастырылды.

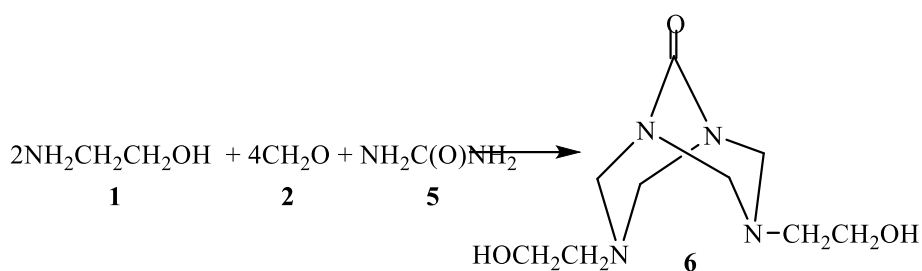
Сонымен қатар ацетонның моноэтанолламинмен және формальдегидпен Манних реакциясы жағдайындағы конденсациясынан жаңа азотты бицикл 3,7-диэтилол-1,3,5,7-тетразабицикло[3.3.1]нонан-9-онды (6) синтездеу мүмкіндігі зерттелді [6].

3,7-Диэтилол-3,7-диазабицикло[3.3.1]нонан-9-он (4) синтезі бірінші жағдайда параформальдегидпен және екінші жағдайда формалинмен моноэтанолламиннің және ацетонмен сірке қышқылы қатысында метил спиртіндегі конденсациясынан синтезделді [7].

Ал 3,7-диэтилол-1,3,5,7-тетразабицикло[3.3.1]нонан-9-он (6) синтезінде ацетонның орнына мочевина қолданылды.

Нәтижесінде 54% және 43% шығыммен сәйкесінше 3,7-диэтилол-3,7-диаза- және 1,3,5,7-тетразабицикло[3.3.1]нонан-9-ондар (4, 6) алынды.





Жаңа бициклокетондарды (**4**, **6**) бөлу колонкалы хроматография көмегімен жүргізілді. Реакциялардың жүруі ЖҚХ (спирт - гексан, 7:3) әдісімен бақыланды.

Синтезделген қосылыстардың (**4**, **6**) физикалық тұрақтылары анықталып, құрылысы ИК спектрімен идентификацияланды.

Қосылыстардың функционалдық құрамы (4, 6) ИК спектрін қолдану арқылы анықталды. ИК спектрлерінде  $3200, 3350 \text{ см}^{-1}$  -ОН және  $1720 \text{ см}^{-1}$  -C=O және  $1120-1130 \text{ см}^{-1}$  аймағында жай эфирлі байланыстардың жұтылу жолақтарынан басқа,  $3360, 3300 \text{ см}^{-1}$  – NH,  $1615 \text{ см}^{-1}$  C=N топтарының жұтылу жолақтары анықталды.

### Әдебиеттер

1. Veremeeva P.N., Grishina I.V., Lapteva V.L., Yaroslavov A.A., Sybachin A.V., Palyulin V.A., Zefirov N.S. pH-Sensitive liposomes with embedded 3,7-diazabicyclo[3.3.1]nonane derivative // *Mendeleev Communications*. - 2014. - № 24(3). – P. 152-153.
2. Lavrov M.I., Karlov D.S., Voronina T.A., Grigoriev V.V., Ustyugov A.A., Bachurin S.O., Palyulin V.A. Novel positive allosteric modulators of AMPA receptors based on 3,7-Diazabicyclo[3.3.1]nonane scaffold // *Molecular Neurobiology*. – 2020. - № 57(1). – P. 191-199.
3. Praliev K.D., Iskakova T.K., Baktybaeva L.K., Malmakova A.E. Synthesis and myelostimulatory activity of a number of 3,7-diazabicyclo[3.3.1]nonane derivatives // *Pharmaceutical Chemistry Journal*. – 2014. - № 49(5) – P. 292-295.
4. Chigorina E.A., Frolov K.A., Dotsenko V.V., Goloveshkin A.S., Bushmarinov I.S., Krivokolysko S.G. Synthesis and structure of new 3,7-diazabicyclo[3.3.1]nonane derivatives // *Russian Chemical Bulletin*. – 2016. - № 65(9). – P. 2260–2269.
5. Федоренко Л.А., Повсянной М.В., Беляева Н.П., Ключев Н.А.// Укр. Конф. Органической химии. Тернопиль, 1992. с. 255.
6. Praliev K.D., Malmakova A.E., Iskakova T.K., Baktybaeva L.K., Immunomodulatory activity of some 3,7-diazabicyclo[3.3.1]nonane derivatives // *News of the National Academy of Sciences of the Republic of Kazakhstan. Series Chemistry and Technology*. – 2016. - № 2(416). – P. 185-190.
7. Суворова Л.И., Ересько В.А. Е.Л. Изв. АН СССР. Серия химическая. 1979. Т.6. с.1306-1313.

## СИНТЕЗЫ НА ОСНОВЕ 3,5-ЗАМЕЩЕННОГО ТЕТРАГИДРОПИРАН-4-ОНА

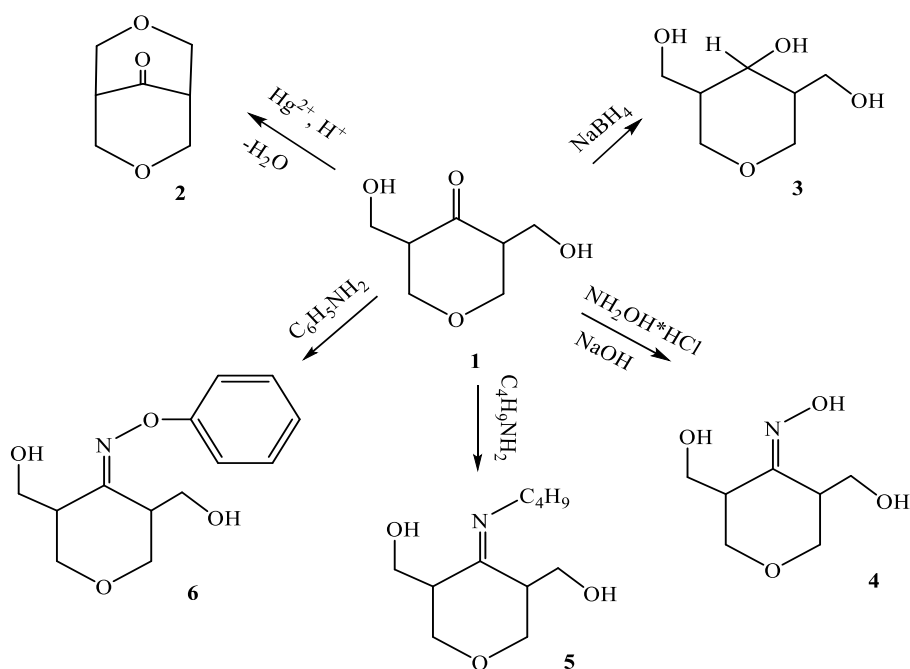
Бажыкова К.Б.<sup>а</sup>, Ергалиева Э.М.<sup>б</sup>, Лангер П.<sup>в</sup>

<sup>а</sup> г. Алматы, Казахский национальный университет им. аль-Фараби

<sup>б</sup> г. Алматы, АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова»

<sup>в</sup> Германия, г. Росток, Университет Росток

Тетрагидропираноны и их производные являются одними из самых простых, наиболее широко изученных и используемых в медицине гетероциклических соединений, которые являются строительными блоками для синтеза соединений, обладающих биологической активностью. Мы провели синтез 3,5-бис(гидроксиметил)тетрагидро-4Н-пиран-4-она и его производных с целью дальнейшего изучения их фармакологических свойств согласно схеме:



Получение 3,5-диметиленокситетрагидропиран-4-она (1) описано в статье [1].

Синтез 3,7-диоксобицикло[3.3.1]нонан-9-она (2) проводился дегидратацией 1в присутствии концентрированной H<sub>2</sub>SO<sub>4</sub>. Выход 70%. T<sub>пл</sub>=170-172 °С. ИК, ν, см<sup>-1</sup>: 1703 (C=N), 3436 (OH), 2854 (C-H), 1377 (N-C), 1101 (C-O-C).

Синтез 3,5-диметиленокси-4-окситетрагидропирана (3) проводился восстановлением 1NaBH<sub>2</sub>. Выход 56,5 % в виде масла. ИК, ν, см<sup>-1</sup>: 1377 (N-C), 1598 (C=N), 2919 (C-H).

Синтез оксима 3,5-диметиленокситетрагидропиран-4-она (4) проводился взаимодействием 1с гидрохлоридом гидроксилamina в щелочной среде (NaOH). Выход 60,9%. T<sub>пл</sub>=128 °С. ИК, ν, см<sup>-1</sup>: 1650 (C=N), 3414 (N-OH), 1180.9 (C-O-C), 2925.2 (CH<sub>2</sub>), 1702.6 (C-C).

Синтез 3,5-диметиленокси-4-аминобутилтетрагидропирана (5) проводился взаимодействием 1с бутиламином в присутствии Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>при 40 °С. Выход 68.8 %. T<sub>пл</sub>=88-90 °С. ИК, ν, см<sup>-1</sup>: 3436 (OH), 2925.77 (CH<sub>2</sub>), 1690 (C=N), 1458 (C-C), 1107.16 (C-O-C).

Синтез 3,5-диметиленокси-4-аминобензилтетрагидропирана (6) проводился взаимодействием 1 с анилином в присутствии Al<sub>2</sub>O<sub>3</sub>при 40 °С. Выход 54 % в виде масла. ИК, ν, см<sup>-1</sup>: 3273 (OH), 3062 (CH), 1601 (C=N), 1580, 1495 (C-C), 1169 (C-O-C).

### Литература

1. Bzhikova K.B., Yergaliyeva E.M., Abduali G.A., Mukhan D.N., Abik N.A., Otyunshiyev E.B. *New Materials, Compounds and Applications*, **2019**, 1(4), 47–51.

## СОЗДАНИЕ НОВЫХ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ИОНООБМЕННИКОВ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ

**Бектенов Н.А.<sup>а</sup>, Камбарова Э.А.<sup>б</sup>, Мурзакасымова Н.С.<sup>б</sup>**

<sup>а</sup> г. Алматы, Казахский Национальный Педагогический Университет им. Абая,  
e-mail: [bekten\\_1954@mail.ru](mailto:bekten_1954@mail.ru)

<sup>б</sup> Таразский региональный университет им. М.Х. Дулати

Оценка современного экологического состояния планеты свидетельствует о необходимости ускоренного решения вопросов охраны окружающей среды, в том числе основных источников жизни: атмосферного воздуха, почвы и водоемов. Сегодня остро стоит проблема утилизации радиоактивных и токсичных отходов атомной, химической и фармацевтической промышленности, очистки питьевой и сточных вод, а также создания безотходных экологически благоприятных технологий.

Одним из реальных путей решения данной задачи является поиск малостадийных способов получения новых высокоэффективных полиэлектролитов с заранее заданными свойствами на основе доступных и сравнительно недорогих исходных реагентов, с учетом несложного аппаратного оформления. Однако с развитием и интенсификацией процессов их получения к синтезируемым ионообменникам предъявляют все более высокие требования (повышенные обменная и сорбционная емкости, улучшенные физико-химические характеристики, химическая и термическая устойчивость, высокая селективность и широкая область применения с учетом неоднократного использования).

Проблема создания новых высокоэффективных сорбентов для очисткосточных вод и извлечения ионов тяжелых, поливалентных и переходных металлов в гидрометаллургии, пищевой промышленности, водоподготовке, медицине, для сорбции и концентрирования изотопов, выделения и очистки физиологически-активных веществ, с учетом комплексного использования доступных исходных мономеров и природных энергосберегающих ресурсов становится актуальной для Республики Казахстан.

Одним из перспективных мономеров, нашедших широкое применение в синтезе новых полифункциональных ионообменников, обладающих рядом ценных физико-химических свойств, является глицидиловый эфир метакриловой кислоты (ГМА), особенности структуры которого обуславливают возможность его радикальной гомо- и сополимеризации с различными винильными мономерами с целью получения реакционноспособных сополимеров с эпоксидными группами, способных участвовать в реакциях отверждения в присутствии соединений кислотной и основной природы.

В связи с этим проведение систематических исследований по разработке новых, доступных и перспективных методов синтеза высокопроницаемых ионообменников на основе доступных и дешевых мономеров, обладающих повышенной механической, химической, термической и радиационной стабильностью и высокими кинетическими, сорбционными характеристиками остается актуальной.

Целью настоящей работы является разработка научных основ создания новых селективных ионообменных полимеров (анионитов, катионитов и полиамфолитов) путем химической модификации сополимеров ГМА полиаминами алифатической и ароматической природы, а также различными неорганическими (шламовой фосфорной кислотой) и органическими-тиодигликолевой, лимонной) кислотами, исследование их основных физико-химических, сорбционных и комплексообразующих свойств, а также нахождение перспективных областей практического применения.

В результате проделанной работы:

- разработаны способы синтеза малостадийного новых полифункциональных азот, фосфорсодержащих ионообменников путем химического превращения сополимеров ГМА полиаминами, высокосмолистой нефтью и шламовой фосфорной кислотой;
- разработан метод синтеза доступного высокопроницаемых анионитов на основе макросетчатых сополимеров ГМА и некоторых длинноцепных сшивающих агентов путем

химической модификации их полиаминами алифатической и ароматической природы;

- исследованы особенности и выявлены основные закономерности образования селективных полиэлектролитов и установлены состав и структуры образующихся макромолекул;

- синтезированы линейные сополимеры на основе двойных сополимеров на основе ГМА и фенилвинилфосфоновой кислоты (ГМА-а-ФВФК), ГМА и акриловой кислоты (ГМА-АК) и тройных на основе ГМА, стирола и малеинового ангидрида (ГМА-СТ-МА), ГМА, бутилакрилата и метакриловой кислоты (ГМА-БА-МАК), исследованы их основные физико-химические свойства;

- получены селективные катионообменники путем химического превращения сополимеров ГМА-СТ-МА, ГМА-БА-МАК, ГМА-а-ФВФК, ГМА-АК с серной и фосфорной кислотами, изучены их структуры.

## БИСПИДИН ТУЫНДЫЛАРДЫҢ ФАРМАКОЛОГИЯЛЫҚ БЕЛСЕНДІЛІГІ

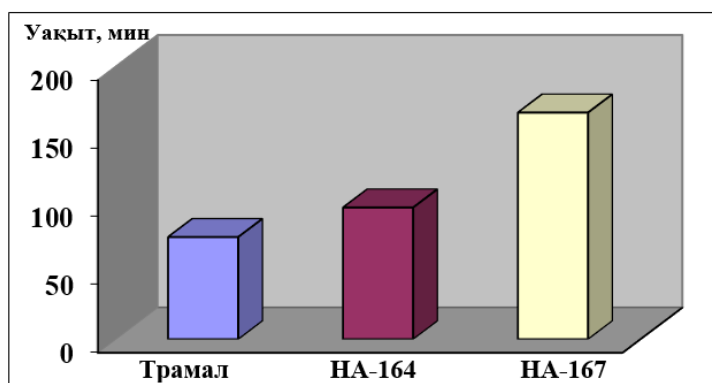
**Берганаева Г.Е., Искакова Т.К.**

Алматы қ., аль-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті, e-mail: [gulzat-bakyt@mail.ru](mailto:gulzat-bakyt@mail.ru)

3,7-диалкоксиалкил-3,7-диазабцикло[3.3.1]нонан жүйелерінің ішінде жергілікті анестетикалық, анальгетикалық, спазмолитикалық әсері бар препараттар табылғаны мәлім. 3,7-диазабциклононандар құрамындағы N-алкоксиалкил тобының бірін аллил радикалымен алмастыру жаңа биспидин туындыларының фармакологиялық қасиеттеріне әсер ететіні туралы болжам жасауға болады.

Манних конденсация реакциясы жағдайында 1-(2-этоксиэтил)пиперидин-4-онды аллиламинмен әрекеттесу арқылы 3-(2-этоксиэтил)-7-аллил-3,7-диазабцикло[3.3.1]нонан-9-онды (1) алынды. Кижнер-Вольф бойынша циклді кетонды (1) тотықсыздандырып, сәйкес 3,7-диазабциклононан (2) синтезделді. Бициклді кетонды (1) абсолютті эфирде LiAlH<sub>4</sub> тотықсыздануы реакциясын жүргізгенде екіншілік спирт 3-(2-этоксиэтил)-7-аллил-3,7-диазабцикло[3.3.1]нонан-9-ол (3) түзілді. Эпимерлі қоспаның (3) сірке және пропион қышқылының хлориді мен ангидридін мен бензоилхлорид қоспасымен эфирлену реакциясы сәйкес эфирлер берді.

Фармакологиялық скрининг 3-(2-этоксиэтил)-7-аллил-3,7-диазабцикло[3.3.1]нонан оксалаты (**НА-164**) айқын анальгетикалық белсенділікке ие болғанын көрсетті. Оның активтілігі трамалға қарағанда 1,29 есе жоғары болды (1 сурет).



**Сурет 1** – Биспидин туындыларының жалпы анальгезияның ұзақтығы.

Анальгетикалық белсенділікпен қатар 3,7-диазабцикло[3.3.1]нонан (2) мембраналық тұрақтандыратын белсенділікке ие болды. Спазмолитикалық белсенділікті зерттегенде **НА-164** егеуқұйрықтардың ішектерінің гистамині мен ацетилхолиннің спазмының дамуына жол бермеді.

Айта кету керек, **НА-164**-тың құрылымдық аналогы болатын 3,7-ди(2-этоксиэтил)-3,7-диазабцикло[3.3.1]нонан оксалаты анальгезиялық әсер көрсетпеген. Демек, мынадай қорытынды жасауға болады: 3,7-ди(2-этоксиэтил)-3,7-диазабцикло[3.3.1]нонандағы азот атомдарының біріндегі этоксиэтил тобын аллил тобымен алмастырылуы анальгетикалық әсердің пайда болуына әкеледі.

Екіншілік спирттің (3) күрделі эфирлерінің арасында анальгетикалық әсері бар қосылыстар да табылды. Атап айтқанда, 3-(2-этоксиэтил)-7-аллил-3,7-диазабцикло[3.3.1]нонан-9-ол сірке эфирі оксалаты (**НА-167**) айқын анальгезиялық әсер көрсетті және оның активтілігі трамалдан 2,22 есе жоғары болды (1 сурет). Сонымен қатар, бұл препарат граммтеріс (*E.Coli*, *Salmonella Cholerae suis*) және грамм-позитивті (*Staphilococcus aureus*) микроорганизмдерге қарсы эффект көрсетті. Оның бактерияға қарсы белсенділігі эталондық препарат - *стрептомицин*мен ұқсас болды.

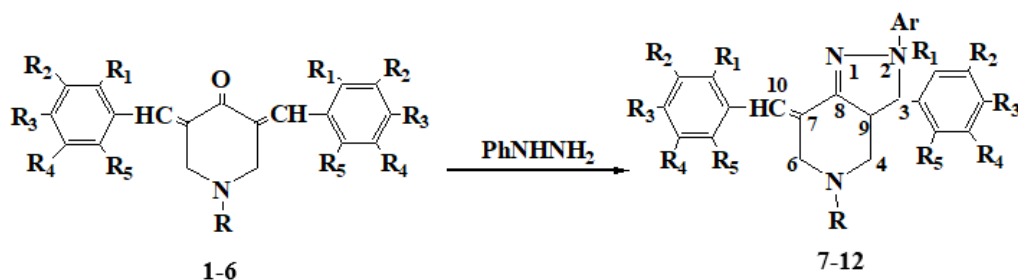
## БИЦИКЛДЫ ПИРАЗОЛИНДЕРДІҢ СИНТЕЗІ ЖӘНЕ ҚАСИЕТТЕРІ

Берганаева Г.Е., Искакова Т.К.

Алматы қ., аль-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті, e-mail: [gulzat-bakyt@mail.ru](mailto:gulzat-bakyt@mail.ru)

Циклдық гидразин туындыларының химия саласындағы зерттеулер пиразолиндердің осы класстың ең перспективті қосылыстарының бірі екенін анықтады. Синтезінің қарапайымдылығының арқасында олар медицинада және ветеринарияда кеңінен қолданылады.

Пиразолиндердің ең кең таралған әдістердің бірі ол гидразин және оның моноорынбасқан туындыларының  $\alpha,\beta$ -қанықпаған альдегидтер мен кетондармен (халкондармен) әрекеттесуі. Яғни 3,5-диарилиденпиперидин-4-ондардың (1-6) тұзқышқылды фенилгидразинмен әрекеттесу нәтижесінде азациклдеу өнімдері – сәйкес 7-арилиден-3,3а,4,5,6,7-гексагидро-2-фенил-5-R-3-арил-2Н-пиразоло[4,3-с]пиперидиндер (7-12) алынды:



- 1, 7 R = C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, R<sub>2</sub>=OCH<sub>3</sub>, R<sub>1</sub>=R<sub>3</sub>=R<sub>4</sub>=R<sub>5</sub>=H;  
 2, 8 R = C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, R<sub>2</sub>=R<sub>5</sub>=OCH<sub>3</sub>, R<sub>1</sub>=R<sub>3</sub>=R<sub>4</sub>=H;  
 3, 9 R = C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, R<sub>2</sub>=R<sub>4</sub>=OCH<sub>3</sub>, R<sub>1</sub>=R<sub>3</sub>=R<sub>5</sub>=H;  
 4, 10 R = C<sub>2</sub>H<sub>4</sub>OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>, R<sub>1</sub>=R<sub>5</sub>=OCH<sub>3</sub>, R<sub>2</sub>=R<sub>3</sub>=R<sub>4</sub>=H;  
 5, 11 R = CH<sub>2</sub>-CH=CH<sub>2</sub>, R<sub>2</sub>=OCH<sub>3</sub>, R<sub>1</sub>=R<sub>3</sub>=R<sub>4</sub>=R<sub>5</sub>=H;  
 6, 12 R = CH<sub>2</sub>-CH=CH<sub>2</sub>, R<sub>3</sub>=OCH<sub>3</sub>, R<sub>1</sub>=R<sub>2</sub>=R<sub>4</sub>=R<sub>5</sub>=H.

Алынған пиперидинопиразолиндердің (7-12) ИҚ спектрлерінде карбонил тобының сіңіру жолақтары жоқ және 1580-1620 см<sup>-1</sup> аймағында С=N-байланысқа тән сіңіру жолақтары байқалады.

Пиразолиндердің (7-12) құрылысы ЯМР <sup>13</sup>Сспектроскопия әдісімен алынған деректермен де айқындалады. Спектрде қос байланыстың С<sub>7</sub>және С<sub>10</sub> көміртектің синглетті (дара) және дублетті (қос) сигналдарымен қосатөменгі өріс бөлігінде (143,0-159,5 м.д.)С=N-тобындағы көміртекке тән кең синглетті сигнал пайда болған. Сонымен қатар, спектрлерде С<sub>3</sub> және С<sub>9</sub> көміртектіне сәйкес келетін 70,0-73,5 және 52,5-56,4 м.д. аймағындадублетті сигналдардың болуы және қос байланыстың С<sub>7</sub> және С<sub>10</sub> көміртек атомдары сигналдарының қарқындылығының төмендеуі де гетероциклизация жүргенінкөрсетеді.

Фармакологиялық скрининг көрсеткендей, синтезделген пиперидино-пиразолиндер (9-12) спазмолитикалық белсенділікпен сипатталады және пиразолиндер молекуласының ароматты сақинасындағы метокси тобы санының артқан сайын қосылыстардың уыттылығы артады. Сонымен қатар, **НА-149**препараты- 7-(2,5-диметоксибензилиден)-3,3а,4,5,6,7-гексагидро-5-(2-этоксиэтил)-2-фенил-3-(2,5-диметоксифенил)-2Н-пиразоло[4,3-с]пиперидинніңгидрохлориді(8) анальгезиялық әсерге ие, ал жалпы анальгезияның ұзақтығы бойынша ол эталондық препарат *трамал* әсерінен 1,2 есе жоғары болды. Сонымен қатар, сынақ жүргізу барысында трамалда толық анальгезияның дамуы байқалмаған, ал **НА-149** толық анальгезиясының ұзақтығы 65,0+12,4 мин құрады және де оның уытты әсері трамалға қарағанда 1,3 есе аз екенін атап өткен жөн.



## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЙ РАСЧЕТ МОЛЕКУЛЯРНОЙ СТРУКТУРЫ И КОЛЕБАТЕЛЬНЫХ ЧАСТОТ 3-(1Н-БЕНЗО[Д]ИМИДАЗОЛ-1-ИЛ)-N'-(ТОЗИЛОКСИ)ПРОПАНИМИДАМИДА С ПРИМЕНЕНИЕМ МЕТОДА DFT

Ергалиева Э.М.<sup>а</sup>, Вологжанина А.В.<sup>б</sup>, Каюкова Л.А.<sup>а</sup>, Байтурсынова Г.П.<sup>а</sup>,  
Губенко М.А.<sup>в</sup>

<sup>а</sup> г. Алматы, АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова»

<sup>б</sup> г. Москва, «ФГБУН Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН»;

<sup>в</sup> Костанайский региональный университет им. А. Байтурсынова

Современные вычислительные методы квантовой химии, в частности метод функционала плотности (density functional theory, DFT), показывают высокие прогнозирующие способности при расчете молекулярных структур и колебательных частот, что позволяет применять их в аналитических целях [1–2].

Ранее нами сообщалось о результатах *para*-толуолсульфохлорирования β-аминопропиоамидоксимов в присутствии диизопропилэтиламина (DIPEA), в результате которого в случае исходных β-аминопропиоамидоксимов (β-аминогруппа: пиперидин-1-ил, морфолин-1-ил, тиоморфолин-1-ил, 4-фенилпиперазин-1-ил) были получены толуолсульфонаты соответствующих спиропиразолиниевых соединений, а при тозилровании β-(бензимидазол-1-ил)пропиоамидоксима получен продукт О-арилсульфохлорирования – 3-(1Н-бензо[д]имидазол-1-ил)-N'-(тозилокси)пропанимидамид [3]. Строение полученных продуктов было исследовано с использованием методов ИК-, ЯМР-спектроскопии и РСА.

В настоящей работе представлены результаты теоретического исследования строения 3-(1Н-бензо[д]имидазол-1-ил)-N'-(тозилокси)пропанимидамида методом DFT на уровне B3LYP/6-31++G(d,p), выполненные в программе Gaussian 09W.

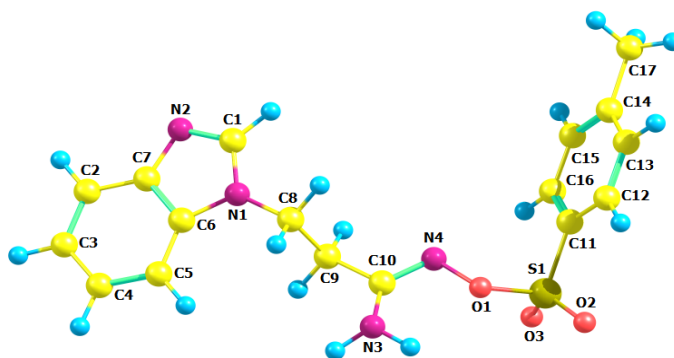
Полная оптимизация геометрии проводилась методом DFT с базисом B3LYP/6-31++G(d,p). Отсутствие мнимых (отрицательных) частот в результатах расчета указывает на то, что был найден локальный минимум. Рассчитанные и полученные с помощью рентгеноструктурного анализа длины связей и валентные углы приведены в таблице 1. Корреляция между экспериментальными и рассчитанными данными характеризуется коэффициентом корреляции (R), среднеквадратичным отклонением (rms) и средней разницей (A.D.), значения которых приведены в таблице. Коэффициент корреляции между экспериментально найденными и рассчитанными длинами связи составляет R=0.98, для валентных углов R=0.99.

**Таблица 1** – Расчетные (DFT B3LYP/6-31++G(d,p) и экспериментально найденные (РСА) длины связей (Å) и углы (°) в 3-(1Н-бензо[д]имидазол-1-ил)-N'-(тозилокси)пропанимидамиде

Связь	Эксперимент	Расчет B3LYP/6- 31++G(d,p)	Атомы	Эксперимент	Расчет B3LYP/6- 31++G(d,p)
Длина связи (Å)					
C2-C7	1.4	1.4	N4-C10	1.294	1.294
C2-C3	1.378	1.391	O1-N4	1.491	1.455
C3-C4	1.403	1.409	S1-O1	1.589	1.671
C4-C5	1.383	1.393	S1-O2	1.43	1.458
C5-C6	1.397	1.397	S1-O3	1.432	1.458
N1-C6	1.385	1.388	S1-C11	1.751	1.781
N2-C7	1.396	1.389	C11-C12	1.39	1.396
C6-C7	1.399	1.416	C11-C16	1.393	1.396
N2-C1	1.312	1.307	C12-C13	1.384	1.392
N1-C1	1.355	1.381	C13-C14	1.39	1.402
N1-C8	1.458	1.451	C14-C15	1.392	1.403

C8-C9	1.531	1.545	C14-C17	1.505	1.509
C9-C10	1.511	1.507	C15-C16	1.378	1.392
N3-C10	1.33	1.366			
R	0.98				
rms	0,02267				
A.D.	0,010741				
Угол связи (°)					
C1-N1-C6	106.5	105.8	N3-C10-N4	127.5	125.9
C1-N2-C7	104.3	104.4	C10-N4-O1	107.5	108.1
C2-C3-C4	121.6	121.4	N4-O1-S1	111.1	111.1
C2-C7-C6	119.8	119.8	O1-S1-O2	102.3	101.9
C3-C2-C7	117.7	118.1	O1-S1-O3	110.5	108.8
C3-C4-C5	121.8	121.5	O1-S1-C11	103.4	103.5
C4-C5-C6	116.1	116.8	O2-S1-O3	119.3	122.1
C5-C6-C7	122.9	122.4	O2-S1-C11	109.4	109.5
C6-N1-C8	125.5	127.3	O3-S1-C11	110.6	109.2
N1-C6-C5	131.8	132.6	S1-C11-C16	119.2	119.6
N1-C6-C7	105.3	105	S1-C11-C12	120	119
N2-C7-C2	130.3	129.8	C12-C11-C16	120.8	121.4
N2-C7-C6	109.8	110.4	C11-C16-C15	118.9	118.8
N1-C1-N2	114.1	114.4	C11-C12-C13	119	118.9
C1-N1-C8	127.8	126.7	C14-C15-C16	121.7	121.2
N1-C8-C9	113.6	112.6	C12-C13-C14	121.5	121.2
C8-C9-C10	113.6	111.7	C13-C14-C15	118.2	118.5
N3-C10-C9	119.6	118	C15-C14-C17	120.8	120.7
N4-C10-C9	113	115.9	C13-C14-C17	121	120.8
R	0.99				
RMS	1.04				
A.D.	-0,07895				

Рассчитанная молекулярная структура рассматриваемого соединения с нумерацией атомов приведена на рисунке 1. Визуализация результатов расчета проводилась с помощью программы Chemcraft 1.8.



**Рисунок 1** – Молекулярная структура 3-(1H-бензо[d]имидазол-1-ил)-N'-(тозилокси)пропанимидамида.

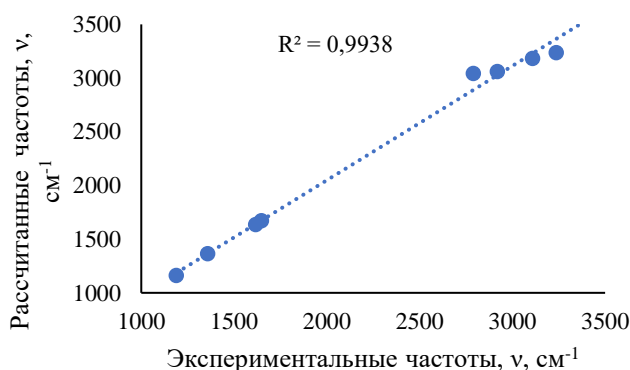
Проведен анализ рассчитанных колебательных частот рассматриваемого соединения и их сравнение с экспериментальными данными. Запись ИК спектров пропускания производилась на Thermo Scientific Nicolet 5700 в таблетках KBr. В ИК спектре 3-(1H-бензо[d]имидазол-1-ил)-N'-(тозилокси)пропанимидамида наблюдаются симметричные и ассиметричные валентные колебания SO<sub>2</sub> группы в области 1190 см<sup>-1</sup> и 1358 см<sup>-1</sup>. Согласно прогнозу, соответствующие колебания данной группы смещены в области 1161 см<sup>-1</sup> и 1365 см<sup>-1</sup>. Колебания C=N связи, наблюдаемые в области 1648 см<sup>-1</sup>, в рассчитанном спектре смещены в область 1671 см<sup>-1</sup>. Частоты валентных колебаний связи (N-H)<sub>2</sub>, наблюдаемые в области 3417 см<sup>-1</sup>, в рассчитанном спектре значительно смещены (область 3586 см<sup>-1</sup>). В

целом, рассчитанные характеристические частоты хорошо согласуются с экспериментальными данными, что позволяет применять их в аналитических целях. В таблице 2 приведены характеристические колебательные частоты рассматриваемого соединения, полученные экспериментально и рассчитанные методом DFT.

**Таблица 2** – Характеристические экспериментальные (DFT B3LYP/6-31++G(d,p) и рассчитанные колебательные частоты ( $\text{см}^{-1}$ ) 3-(1H-бензо[d]имидазол-1-ил)-N'-(тозилокси)пропанимидамида

Колебательные частоты $\nu$	Эксперимент ( $\text{см}^{-1}$ )	Расчет ( $\text{см}^{-1}$ )
$\nu_{\text{C=N}}$	1648	1671
$\nu_{\text{C=C}}$	1617	1634
$\nu_{\text{SO}_2 \text{ asym}}$	1190	1161
$\nu_{\text{SO}_2 \text{ sym}}$	1358	1365
$\nu_{(\text{N-H})_2}$	3417	3586
$\nu_{\text{Csp}^3\text{-H}}$	2791, 2920	3042, 3061
$\nu_{\text{Csp}^2\text{-H}}$	3110, 3237	3181, 3235
R	0.99	

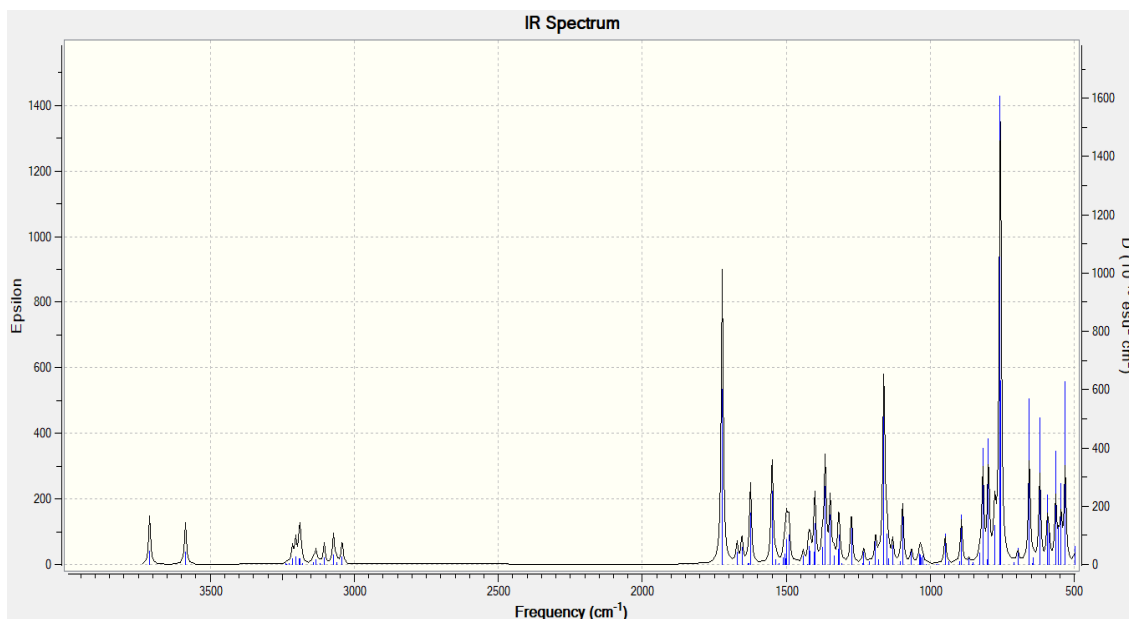
Коэффициент корреляции между рассчитанными и экспериментальными колебательными частотами составляет  $R^2=0.99$ . Результат анализа представлен на рисунке 2.



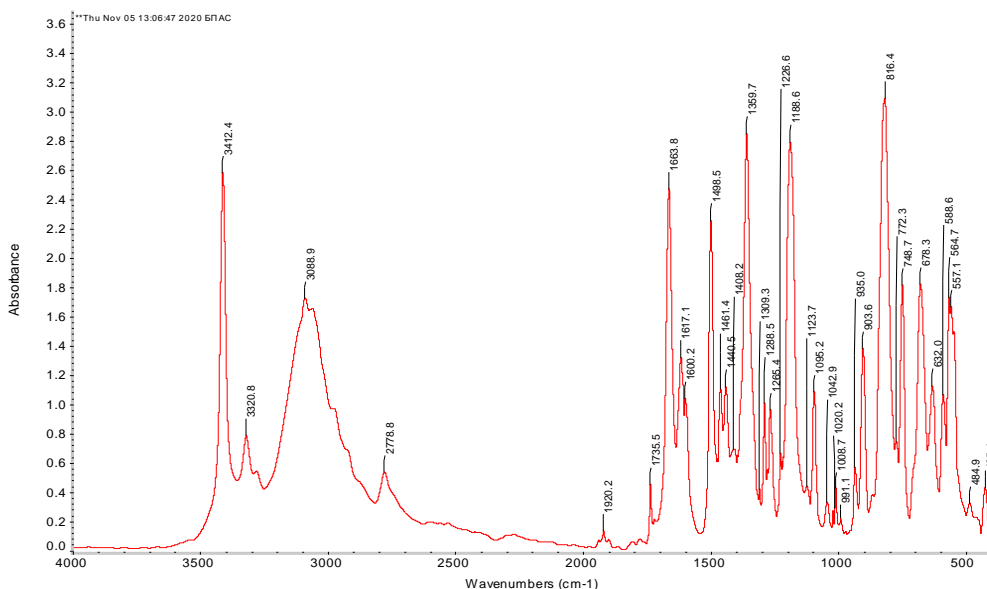
**Рисунок 2** – Корреляция между экспериментальными и рассчитанными значениями колебательных частот ( $\text{см}^{-1}$ ) 3-(1H-бензо[d]имидазол-1-ил)-N'-(тозилокси)пропанимидамида

На рисунке 3 приведен ИК спектр исследуемого соединения, рассчитанный методом DFT. Визуализация спектра осуществлялась с помощью программы GaussView 5. Экспериментальный спектр соответствующего соединения показан на рисунке 4.

Результат квантово-химического исследования молекулярной структуры и колебательных частот 3-(1H-бензо[d]имидазол-1-ил)-N'-(тозилокси)пропанимидамида с высокими коэффициентами корреляции между экспериментальными и рассчитанными значениями позволяет использовать метод DFT для прогнозирования молекулярной структуры и интерпретации ИК спектров синтезируемых соединений.



**Рисунок 3** – ИК спектр 3-(1H-бензо[d]имидазол-1-ил)-N'-(тозилокси)пропанимидамида, полученный методом DFT на уровне B3LYP/6-31++G(d,p).



**Рисунок 4** – ИК спектр пропускания 3-(1H-бензо[d]имидазол-1-ил)-N'-(тозилокси)пропанимидамида.

## Литература

1. Gummidi L., Kerru N., Ibeji C.U., Singh P. Crystal structure and DFT studies of (E)-1-(4-fluorophenyl)-3-(1H-indol-1-yl)-4-styrylazetid-2-one. *J. Mol. Struct.*, **2019**, *1187*, 50–58. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.03.053>
2. Ulahannan R.T., Kannan V., Vidya V., Sreekumar K. Synthesis and DFT studies of the structure-NLO activity evaluation of 2-(4-methoxyphenyl)-1,4,5-triphenyl-2,5-dihydro-1H-imidazole. *J. Mol. Struct.*, **2020**, *1199*, 127004. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.molstruc.2019.127004>
3. Kayukova L.A., Baitursynova G.P., Yergaliyeva E.M., Zhaksylyk B.A., Yelibayeva N.S. *Chem. J. Kaz.*, **2021**, *2(74)*, 22–32. DOI: <https://doi.org/10.51580/2021-1/2710-1185.25>

*Работа выполнена по Программе КН МОН РК – «Инновационные материалы полифункционального назначения на основе природного сырья и техногенных отходов» BR10965255(2021-2023).*

## ИЗУЧЕНИЕ СОРБЦИОННОЙ СПОСОБНОСТИ ПОЛИФУНКЦИОНАЛЬНЫХ АНИОНИТОВ ПО ОТНОШЕНИЮ К ИОНАМ ЖЕЛЕЗА

**Ергожин Е.Е., Чалов Т.К., Ковригина Т.В., Хакимболатова К.Х., Мельников Е.А.**  
г. Алматы, АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова», e-mail: [sebas273@mail.ru](mailto:sebas273@mail.ru)

Загрязнение воды является важной экологической проблемой, так как вода играет важную роль во всех видах деятельности живых существ. Обычно вода используется человеком для питья, приготовления пищи, стирки и распространения энергии. В настоящее время рост урбанизации и модернизация развития приведет к неизбежным проблемам по загрязнению воды. Это серьезно, когда загрязнение воды вызвано высокой концентрацией тяжелых металлов, обладающих высокой токсичностью. Эти токсичные металлы находят свою потребность в утилизации тяжелых металлических отходов от промышленности, например, гальваники, производства сплавов и кожевенной промышленности. Все это делает такую воду практически неприемлемой как для технического, так и для питьевого применения [1].

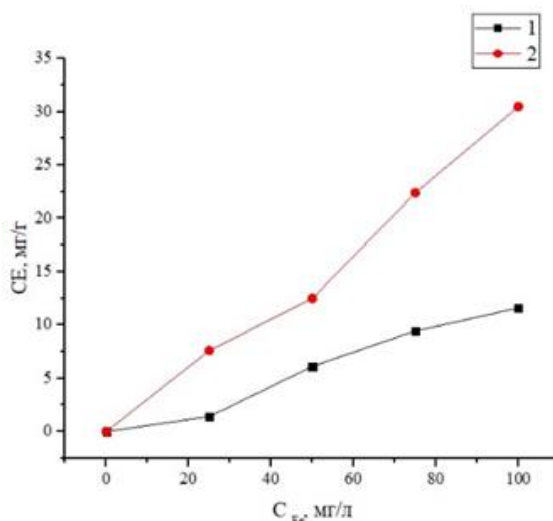
Поэтому мы изучали сорбцию ионов железа (II) на полученных нами полифункциональных сорбентах на основе эпоксицианированных аминов. Сначала синтезировали эпоксиамины при  $t = 50^\circ\text{C}$  в течение 6 ч из анилина (А) и эпихлоргидрина (ЭХГ) в присутствии NaOH. Затем при  $t = 60-65^\circ\text{C}$  проводили их поликонденсацию с полиаминами (ПЭИ, ПЭПА) в растворе ДМФА при разных массовых соотношениях в течение 5-6 ч, после чего реакцию массу отверждали при  $100^\circ\text{C}$  в течение 16-24 ч. В результате были получены полифункциональные аниониты А-ЭХГ-ПЭПА и А-ЭХГ-ПЭИ, которые могут быть использованы в гидрометаллургии, для очистки сточных вод и т.д.

Основные физико-химические свойства полученных сорбентов приведены в таблице.

**Таблица** – Физико-химические свойства синтезированных анионитов

Аниониты на основе	СОЕ <sub>НСl</sub> , мг-экв/г	V <sub>уд</sub> , мл/г	Химическая устойчивость в растворах, %			Термическая устойчивость в воде, %
			5 н H <sub>2</sub> SO <sub>4</sub>	5 н NaOH	10% H <sub>2</sub> O <sub>2</sub>	
А-ЭХГ-ПЭПА	3,03	4,2	89,9	91,4	70,0	91,8
А-ЭХГ-ПЭИ	4,83	4,5	92,5	94,9	70,1	95,0

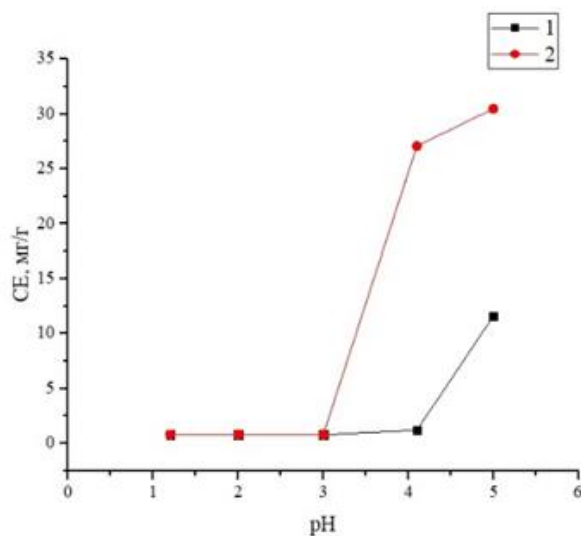
где СОЕ<sub>НСl</sub> – статическая объемная емкость, V<sub>уд</sub> – удельный объем.



**Рисунок 1**– Изотермы сорбции ионов Fe<sup>2+</sup> из сульфатных растворов анионитами А-ЭХГ-ПЭПА (1) и А-ЭХГ-ПЭИ (2). Продолжительность контакта 7 сут.

Как видно из рис. 1, где представлены изотермы сорбции ионов Fe<sup>2+</sup>, сорбционная

емкость (СЕ) анионитов возрастает с повышением содержания ионов железа (II) в растворах. Подъем кривых при их малых равновесных концентрациях свидетельствует о том, что данными анионитами можно извлекать ионы  $Fe^{2+}$  с достаточной полнотой. Максимальная СЕ отмечена для анионита А–ЭХГ–ПЭИ и составляет 30,48 мг/г.



**Рисунок 2** – Зависимость сорбции ионов  $Fe^{2+}$  от pH раствора  $FeSO_4$  анионитами А–ЭХГ–ПЭПА (1) и А–ЭХГ–ПЭИ (2). Продолжительность контакта 7 сут,  $C_{Fe} = 100$  мг/л.

Из рис. 2, где представлена зависимость сорбции ионов молибдена анионитами от кислотности растворов  $FeSO_4$ , видно, что оптимальным значением pH для их извлечения ионитами А–ЭХГ–ПЭПА и А–ЭХГ–ПЭИ является 5,0. В этих условиях СЕ их составляет 11,6 и 30,48 мг/г, соответственно.

Равновесное состояние между сорбентом и раствором, содержащим 100 мг/л железа (II) и имеющим значение pH 5,0, наступает у обоих анионообменников через 3 ч.

Благодаря изученным сорбционным и кинетическим свойствам, исследованные аниониты можно рекомендовать для очистки сточных вод различных производств от ионов железа (II).

### Литература

1. Wu Yun, Li Wei, Sparks D.L. // Journal of Colloid and Interface Science. Vol. 457. 2015. P. 319–328.
2. Yuen M.L, Ros A.R, Nurfyahfizeh N, Tan Y.P, Yuen C.W. // IOP Conference Series: Materials Science and Engineering. Vol. 736. 2020. DOI:10.1088/1757-899X/736/2/022055

## МОДИФИКАЦИЯ РАЗЛИЧНЫХ ОКСИФОСФОНАТОВ АЦЕТАТОМ МАРГАНЦА

Жаркынбек Т.Е.<sup>а,б</sup>, Тен А.Ю.<sup>а</sup>, Алтынбекова И.Э.<sup>а</sup>, Пралиев К.Д.<sup>а</sup>, Ю В.К.<sup>а</sup>

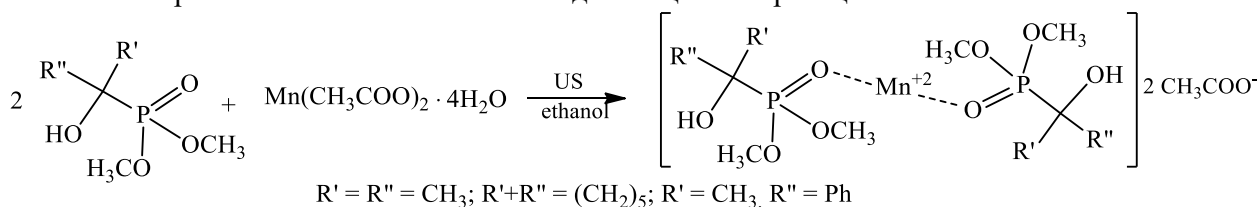
<sup>а</sup> г. Алматы, АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова»,

e-mail: [tolganay.zharkynbek@gmail.com](mailto:tolganay.zharkynbek@gmail.com)

<sup>б</sup> г. Алматы, Казахский национальный университет им. аль-Фараби

Фосфор участвует во многих процессах растений (фотосинтез, производство сахара и энергии и пр.), но в природе он встречается в нерастворимой форме и не может быть усвоен растениями [1]. Для решения проблемы фосфор может быть использован в виде водорастворимых фосфорорганических соединений, кроме того фосфорорганика выступает в качестве стимуляторов роста, повышающих урожайность сельскохозяйственных культур в более низких концентрациях нежели неорганические стимуляторы [2]. Модификация фосфорорганических соединений ионами переходных металлов в виде металлокомплексов может увеличить биологическую активность исходного соединения и одновременно восполнить недостаток микроэлементов.

Настоящая НИР посвящена изучению комплексообразования  $Mn^{+2}$  оксифосфонатами ацетона, циклогексанона и ацетофенона, взятых в качестве лигандов. Как комплексообразователь использован 4-х водный ацетат марганца.



Синтез проводится в этаноле при ультразвуковом протиривании в течение 2-х ч. Затем в реакционной смеси образуется осадок. Жидкость декантируют, осадок высушивают в чашке Петри для удаления растворителя на воздухе. После сушки продукты представляют собой порошок коричневого цвета. Оказалось, что комплексы образуются в соотношении лиганд: $Mn^{+2}$ =2:1.

Доказательство образования целевого комплекса и участие фосфатной группы проводилось сравнением ИК спектров исходных оксифосфонатов и гидрата ацетата марганца с продуктом реакции. Каждое полученное соединение имеет полосу поглощения гидроксильной группы при  $3282-3292 \text{ см}^{-1}$  как в исходных оксифосфонатах, и полосы поглощения в области  $1170-1197 \text{ см}^{-1}$ , которые отнесены к связям  $P-O-CH_3$ . Кроме того, в сравнении со спектром исходного соединения, заметен сдвиг полос поглощения связи  $P=O$  в длинноволновую область ( $1226-1345 \text{ см}^{-1}$ ), доказывающий участие  $P=O$  в комплексообразовании.

Таким образом, полученные результаты свидетельствуют о формировании комплексов оксифосфонатов с ионом  $Mn^{+2}$  по фосфонатному фрагменту без участия гидроксильной группы, что подтверждается и в ранее полученном комплексе пиперидиноксифосфоната [3], где было доказано образование только двух координационных связей  $Me^{+2}-N$  и  $Me^{+2} \cdots O=P$ .

### Литература

1. T. Krey, N. Vassilev, C. Baum, B. Eichler-Löbermann. Effects of long-term phosphorus application and plant-growth promoting rhizobacteria on maize phosphorus nutrition under field conditions. *Eur. J. Soil Biol.*, **2013**, 55, 124–130. DOI: 10.1016/j.ejsobi.2012.12.007
2. I. Ajmera, T.C. Hodgman, C. Lu. An Integrative Systems Perspective on Plant Phosphate Research. *Genes-Basel.*, **2019**, 10, №2, 139. DOI: 10.3390/genes10020139
3. Жаркынбек Т.Е., Кыстаубаева Н.У., Малмакова А.Е., Фасхутдинов М.Ф., Пралиев К.Д., Ю В.К. Синтез и строение комплексов пиперидиноксифосфоната с ионами двух валентных металлов. *Хим. журн. Казахстана*, **2020**, 70, 180–188.

Исследования выполнены при финансовой поддержке КН МОН РК, грант AP08856051



## ПОЛУЧЕНИЕ СОРБЦИОННОГО МАТЕРИАЛА ДЛЯ ИЗВЛЕЧЕНИЯ ИОНОВ МЕТАЛЛОВ ИЗ ВОДНЫХ РАСТВОРОВ

Жунусбекова Н.М.<sup>а</sup>, Искакова Т.К.<sup>а</sup>, Чинибаева Н.С.<sup>б</sup>,  
Кусаинова Г.К.<sup>а</sup>, Худайбергенов Н.С.<sup>а</sup>

<sup>а</sup>г. Алматы, Satbayev University, e-mail: [n.zhunusbekova@satbayev.university](mailto:n.zhunusbekova@satbayev.university)

<sup>б</sup>г. Алматы, Учебный центр ТОО «Education Map»

Получение полимерных композиционных сорбентов, основанное на химической сборке структурных единиц органической и неорганической природы, среди существующих методов синтеза полимерных носителей для иммобилизации биологически активных соединений, а также ионов металлов является перспективным.

В настоящее время предлагается огромный выбор сорбционных материалов, которые могут быть использованы в биотехнологии, медицине, для устранения последствий нефтезагрязнения, в качестве штатных средств для очистки технической воды, применяемой в промышленности, а также для соблюдения экологической безопасности на АЗС. В мировой практике используется более двух сотен различных природных, органических, неорганических, органоминеральных, синтетических сорбентов, в частности в качестве энтеросорбентов, сорбентов для селективного извлечения катионов и анионов из водных (или жидких) сред. Однако далеко не все они отвечают вышеперечисленным требованиям, что диктует необходимость разработки более безопасных и экономичных полимерных сорбционных материалов.

В связи с вышеизложенным были получены новые сорбционные композиты, на основе известных синтетических и природных полимеров, биологически активных соединений, и низкомолекулярных солей, с высокой сорбционной способностью. Были изучены физико-химические свойства образующихся композитов в функции рН и концентрации реагентов, а также ионной силы раствора.

В литературе существует множество работ, посвященных исследованию реакций комплексообразования полисахаридов с поликарбонowymi кислотами, где в качестве полисахаридов используются, в основном, производные целлюлозы. В большинстве случаев указанные комплексы отличаются нестехиометрическим составом. Среди гетероциклических соединений особое место занимают производные имидазола, которые относятся к биологически активным веществам и широко используются не только в медицине, но и в сельском хозяйстве, промышленности и катализе. Имеющиеся сведения о комплексных соединениях гетероциклических лигандов с металлами немногочисленны. Физико-химические характеристики процесса комплексообразования имидазола со взаимопроницающими сетками с образованием полимерного тройного композита с дальнейшей сорбцией ионов переходных металлов, в зависимости от концентрации низкомолекулярного вещества практически отсутствуют. В этой связи проведение целенаправленных исследований по поиску путей синтеза новых полимерных композитов с имидазольными лигандами, а также изучение процесса комплексообразования тройных систем в водных растворах переходных металлов относятся к одной из актуальных задач химии.

В связи с этим в качестве объектов исследований были выбраны: акриловая кислота (АК), агар-агар (Аг-Аг), имидазол, сульфаты меди и никеля, хлорид кобальта. Осуществлен синтез новых двойных и тройных полимерных композитов на основе акриловой кислоты и агар-агара с имидазолом, исследованы их физико-химические и комплексообразующие свойства с ионами переходных металлов в водной среде.

## ФАРМАКОГНОСТИЧЕСКОЕ ИЗУЧЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ЛЕКАРСТВЕННЫХ РАСТЕНИЙ, ПРОИЗРАСТАЮЩИХ В АЛМАТИНСКОЙ ОБЛАСТИ

Жусупова А.И.<sup>а</sup>, Айтуарова А.Ш.<sup>а</sup>, Касымова Д.Т.<sup>а</sup>, Жумалиева Г.Т.<sup>а</sup>,  
Нурбосынова С.Б.<sup>б</sup>, Мурзагулова К.Б.<sup>а</sup>, Жусупова Г.Е.<sup>а\*</sup>

<sup>а</sup> г. Алматы, НАО Казахский национальный университет им. аль-Фараби,

\*e-mail: [zhusupova@gmail.com](mailto:zhusupova@gmail.com)

<sup>б</sup> г. Нур-Султан, ТОО Казахстанский институт развития промышленности

В последние десятилетия наметилась четкая общемировая тенденция к увеличению в объеме выпускаемой фармацевтической продукции количества лекарственных средств растительного происхождения в различных формах. Преимуществом лекарственных средств растительного происхождения являются мягкость, широта и сложность их терапевтического действия, низкая токсичность, отсутствие привыкания и кумулятивных эффектов, редкое индуцирование аллергических реакций, что особенно важно при заболеваниях, требующих длительного лечения. Совместимость природных средств с физиологическими системами организма из-за их сходства способна целенаправленно вызывать защитные механизмы и мобилизовать его ресурсы на практике, реализуя принцип «лечить организм, а не болезнь». Именно поэтому создание новых, оригинальных, эффективных, безопасных, качественных и доступных для населения Казахстана лекарственных средств на основе местного растительного сырья является важной, актуальной и практически значимой задачей, отвечающей государственной политике в области технологий промышленной переработки и становлению фармацевтической отрасли в стране в целом.

Источником для производства лекарственных средств на основе растений могут быть только наиболее перспективные из них, исходя из их безопасности, биологической активности, запасов природных ресурсов на территории Казахстана, доступности мест их произрастания, степени сложности технологических процессов производства лекарственных средств на их основе.

Всем этим критериям соответствуют растения вида *Limonium gmelinii*, которые вызывают огромный интерес как растения, произрастающие в экстремальных условиях и издревле широко используемые в народной медицине. Известно, что растения, произрастающие в пустынях, полупустынях и предгорьях приспосабливаются к стрессовым условиям, в том числе и за счет увеличения содержания в них полифенольных соединений. Экспериментальными исследованиями было показано, что растения данного вида наряду с феноло- и аминокислотами, высшими карбоновыми кислотами, микроэлементами, стеролами, витаминами, ксантофиллами и другими биологически активными веществами в значительном количестве содержат агликоны и гликозиды флавоноидов окисленного и восстановленного типов, в том числе ди- и олигомерные формы флаван-3-олов. Установлены антиоксидантные, противоопухолевые, гепатопротекторные, антимикробные, антимуtagenные и антивирусные свойства субстанции, выделенной из корней кермека Гмелина. На основе субстанции получены ряд лекарственных форм под унифицированным названием «Лимонидин» в виде мази, сиропа и настойки. Мазь обладает противовоспалительной и антивирусной активностями, способствующими ускорению процесса заживления ран кожи и слизистой оболочки различного генеза при отсутствии местно-раздражающих и алергизирующих свойств, не оказывает общего и местного токсического эффекта, улучшает иммунный статус организма. Сироп и настойка «Лимонидин» обладают противовоспалительной активностью и рекомендованы для лечения катаральных и с единичными эрозиями форм хронических гастритов и эзофагитов. Монографии на надземную часть и корни этих растений введены в Государственную Фармакопею Республики Казахстан.

Другими растениями, привлечшими наше особое внимание, являются представители родов *Salvia*, *Crataegus* и *Rosa*, для некоторых видов которых также проводятся их фармакогностические исследования.

## ТҮРЛЕНДІРІЛГЕН ГУМИНДІ ПРЕПАРАТТАРДЫҢ ШӨЛЕЙТТЕНУ ҮДЕРІСІНЕ ОҢТАЙЛЫ ӘСЕРІ

**Жүсіпбеков Ө.Ж., Нұрғалиева Г.О., Шакирова А.Қ., Баяхметова З.К.**

Алматы қ., «Ә.Б. Бектұров атындағы химия ғылымдары институты» АҚ,

e-mail: [sh\\_ainura1029@mail.ru](mailto:sh_ainura1029@mail.ru)

Айналамыздағы тылсым табиғатқа жанашырлықпен қарау, ортақ үйіміз – жерді аялау баршамыздың парызымыз. Бүгінгі таңда елімізде қоршаған ортаны қорғау саласында өзекті болып отырған мәселенің бірі – шөлейттену. *Шөлейттену деп* – адамның шаруашылық әрекетінің ықпалымен өсімдік жамылғысы сиреп, шөлге ұқсас ландшафттардың пайда болуын айтады. Дүние жүзінде климаттың өзгеруі мен қуаңшылықтың артуына байланысты шөлейттену үдерісі қарқынды жүруде. Шөлейттену нәтижесінде биологиялық өнім мен түр саны азайып, топырақ құнарсыздана бастайды. Қазіргі кезде құрлық бетінің 1/3 бөлігінде топырақтың құнарлы қабатының жоғалу қаупі бар, ал оның әсерінен Жер шары халқының 1/5 зардап шегуі мүмкін [1, 2].

Соңғы 50 жыл бойында дүние жүзінде 800 млн га-дан астам жер шөлейттенуге ұшыраған. Мұның негізгі бөлігі Африка құрлығына келеді, мысалы, Сахара шөлі оңтүстікке қарай 650 – 700 км шамасында жылжыған. Ғалымдардың болжамы бойынша Оңтүстік Африканың 60 миллион тұрғыны жарамды жерлердің шөлейттенуі салдарынан өздерінің атамекенінен басқа аудандарға қоныс аударуға мәжбүр болады. Шөлейттену үдерісі Орталық Азия елдері мен Қазақстанда да жылдам қарқынмен дамуда. Түрікменстанда ұзындығы 1000 км Қаракұм каналының бойында 100 км-лік аймақта топырақ қайталама сортаңданып, шөлге айналды. Арал теңізінің деңгейі 14 м-ге төмендеп, аумағының азаюы салдарынан 2,5 млн га-дан астам жер қу тақырға айналды [3]. БҰҰ-ның мәліметі бойынша Қазақстанның 272,5 млн.га территориясының 179,9 млн.га жері немесе барлық алаңның 66% шөл дала. Жайылымның азып-тозуынан 963 млн.доллар зиян келіп отыр. Егістік жерлердің эрозияға ұшырауынан 779 млн. доллар, топырақтың екінші реттік тұздануынан 375 млн. доллар кірістен айырылып отыр. Халықаралық мамандардың есептеулері бойынша Қазақстанда қарашіріктің азаюынан жалпы шығын көлемі 2,5 млрд. долларға бағаланып отыр.

Қазақстандағы шөлейттену үдерісінің дамуына ықпал ететін негізгі табиғи фактор-құмдардың (30 млн. га-ға дейін) және сортаңданған жерлердің (127 млн.га) кең таралуына алып келетін климаттың құрғақтығы, су ресурстарының тапшылығы мен өзен торабының республика бойынша біркелкі еместігі. Сонымен қатар, топырақ-өсімдік жамылғысының сирек қалыптасуы мен өсімдіктердің өсу қарқынының төмендігі шөлейттенудің алғы шарты болып табылады.

Маңғыстау облысында өткен ғасырдың 80-90-шы жылдарынан бастап дабыл қағылып келе жатқан мәселенің бірі – құм көшкіндерін тоқтату, тау құмдарының жылжып екінші жерге қоныс аударуы табиғи апатқа соқтыруы мүмкін зардаптың белгісі. Әуеден түсер ылғалдың мөлшері жылына небәрі 12-170 мм болатын Маңғыстау өлкесінің ойында Бостанқұм, Түйесу және Қызылқұм құм сілемдері астында миллиондаған жылдар ішінде пайда болған тұщы су көзінің біраз мөлшердегі қоры бар. Осы су кенорындары елу жылдан астам бойы үздіксіз Жаңаөзен қаласы мен Қаламқас кенорындарындағы халықты ауызсумен қамтамасыз етуге пайдаланылып келеді. Қарқынды пайдалану салдарынан жерасты сулары көздерінің деңгейі төмендеп, қоры сарқыла бастады. Мысалы Түйесу құм сілемінің оңтүстік бөлігіндегі жерасты суы бұрынғы деңгейінен 10-12 метрге дейін төмендеп кетті. Батыс Қызылқұмның жерасты су қоры сарқылды. Мұндай жағдайда көптеген өсімдік тамыры суға жетпей, өсімдік жамылғысы жойылып кетеді. Бұрынғы аса шұрайлы, өсімдікке бай бұйраттар орнына дәл Сахарадағыдай биіктігі 50–80 метрлік «құм таулар» пайда болып, желдің басым бағытымен көшіп, елді мекендерді көме бастады. Сенек, Үштаған, Тұщықұдық ауылдары көшпелі құмдардың екпінді «шабуылына»

ұшырады. Бір ұрпақтың көз алдында құм көмген Үштаған өз орнын екі рет, Тұщықұдық үш рет өзгертті. Қазіргі кезде салынған ауылдарды да құм баса бастады. Бұл мәселені шешудің екі жолы бар: біріншісі – жыл сайын миллиардтаған теңге қаражат бөліп, ауылдарды бірте-бірте басқа жерлерге көшіріп орналастыру, екіншісі – көшпелі құмды тоқтату. 2002 жылы 29 сәуірде облыс әкімдігінің №97 қаулысымен құрылған Маңғыстау облысының табиғи ресурстар және табиғатты пайдалануды реттеу басқармасына жауапкершілік жүктелді. Осы басқарманың қызметкері Орынбасар Тоқжанов ғалымдардан көмек сұрап, құм басқан аумақтарға жасыл желектер отырғызу жайлы «Ә.Б.Бектұров атындағы химия ғылымдары институты» АҚ-ның ғалымдарына ұсыныс жасады.

Институтта гуминді қосылыстардың фосфогипс және полиакриламидпен әрекеттесу үдерісінің заңдылықтары анықталып, түрлендірілген гуминді препараттарды алудың оңтайлы жағдайлары айқындалып, жаңа гуминді композициялық материалдарды алудың технологиясы ұсынылды.

Осыған байланысты бұл жұмыста түрлендірілген гуминді препараттардың агрохимиялық тиімділігі Маңғыстау облысында жергілікті жерге бейімделген өсімдіктерді өсіру арқылы шөлейттену үдерісін тоқтату кезінде анықталды. Құм көшкінін тоқтату үшін шөлейтті жерге төзімді, *құмда өсетін өсімдіктер*: қара сексеуіл мен жүзгенді өсіру керек.

Ғылыми-зерттеу жұмыстары жергілікті тұрғындардан жасақталған «Жасыл әлем» ЖШС-нің қызметкерлері мен Институт ғалымдары бірлесіп Қарақия ауданына қарасты Сенек ауылының тәлімбағында егістік тәжірибе жағдайында жүргізілді. Тәжірибе барысында Ақтөбе облысының (Шалқар қ.) жылыжайында өсірілген қара сексеуіл мен жүзген көшеттері пайдаланылды.

Қара сексеуіл мен жүзген көшеттерін отырғызу алдында ұзындығы 12 м және ені 5 м болатындай етіп атыз дайындалды. Алдымен жергілікті жердің топырағы мен түрлендірілген гуминді препаратты араластырылды, сосын тереңдігі 3-5 см болатындай етіп шұңқыр дайындалып 600 дана қара сексеуіл мен 400 дана жүзген көшеттері отырғызылды. Барлық агротехникалық іс-шаралар сақталды. Аптасына 2 рет тек кешкі уақытта суарылды.

Түрлендірілген гуминді препаратты қолдану барысында қара сексеуіл мен жүзгеннің көшеттері 98,65-100%, ал бақылау нұсқасында 33,45-45,67% шыққандығы анықталды. Жүргізілген жұмыстар нәтижесінде түрлендірілген гуминді препаратты қолдану өсімдіктердің тамыр жүйесін дамытатындығы, жапырақ беті мен дің биіктігін арттыратындығы анықталды. Қара сексеуіл мен жүзген табиғи ұрықтанып, маңайында көптеген көшеттер өздігінен шыққандығы, тамырлары тереңге кетіп, *айнала 25 метр жердің құмын торлап тастағандығы және жылжымалы құмдардың тоқтағандығы* анықталды.

Осылайша, жүргізілген агрохимиялық тәжірибелер барысында түрлендірілген гуминді препараттарды қолдану қара сексеуіл мен жүзгенді қарқынды өсіріп, құмды бекітіп, құм көшкінін тоқтатуға әсер ететіндігі, өсімдіктердің сыртқы ортаның стресстік факторларына төзімділігін арттыратындығы айқындалды.

## Әдебиеттер

1. Зонн И. С., Куст Г. С., Орловский Н. С., Ши Пей Чжун, Тянь Юй-Чжао. Пустыни и опустынивание: Энциклопедия. — М.: Международные отношения, 2018. — 752 с. — ISBN 978-5-7133-1597-9.
2. Котляков В.М. «Опустынивание засушливых земель России. Новые аспекты анализа, результаты, проблемы» Издательство: "КМК" (2009), 304 стр. - ISBN: 978-5-87317-552-9
3. Бейсенова Ә., Самақова А. Есполов Т. Шілдебаев Ж. Экология және табиғатты тиімді пайдалану. Алматы: Ғылым, 2004. - 328 б.

## ПРИМЕНЕНИЕ МИЦЕЛЛЯРНО-ПОЛИМЕРНОГО ЗАВОДНЕНИЯ ДЛЯ ПОВЫШЕНИЯ НЕФТЕОТДАЧИ ПЛАСТОВ

ИсаА.Б.<sup>а</sup>, Бейсенбаев О.К.<sup>а</sup>, Ахмедов У.К.<sup>б</sup>

<sup>а</sup> г. Шымкент, Южно-Казахстанский государственный университет им. М.Ауэзова

<sup>б</sup> г. Ташкент, Институт общей и неорганической химии АН РУЗ

На современном этапе развития нефтегазодобывающего комплекса большинство крупнейших месторождений, вступило в позднюю стадию разработки, характеризующуюся падением добычи нефти, ростом обводненности продукции, увеличением доли трудноизвлекаемых запасов и фонда неработающих скважин.

Для снижения многих негативных последствий заводнения продуктивных пластов, вовлечения в разработку низкопроницаемых коллекторов и повышения степени выработки запасов из неоднородных пластов нефтяные компании применяют разнообразные физико-химические и гидродинамические методы воздействия на пласт. Технологии позволяют выровнять профили приемистости нагнетательных скважин, осуществить изоляцию притока вод к добывающим скважинам.

Проблемы увеличения нефтеотдачи в настоящее время весьма актуальны. Одним из перспективных направлений в освоении этой категории запасов является применение комплексного воздействия на пласт осадкогелеобразующими технологиями с последующим использованием нестационарного заводнения.

Мицеллярные системы (микроэмульсии) образуются в определенном диапазоне температур и концентраций при смешении воды (определенной минерализации и солевого состава) (10-95%), ПАВ (ионогенных и неионогенных) (4-15%), углеводородной фазы (сжиженный газ, керосин, сырая легкая нефть) (2-80%) и содетергента-стабилизатора (спирты С3-С7) (до 20%).

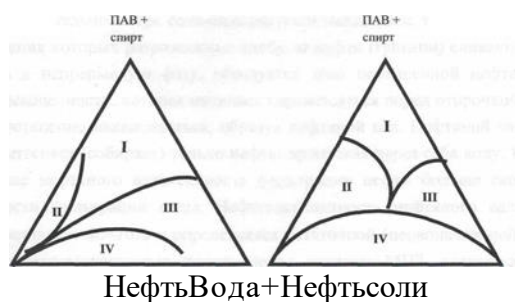
Мицеллярные растворы представляют собой прозрачные или полупрозрачные жидкости. Они в основном однородны и устойчивы к фазовому разделению, в то время как эмульсии нефти в воде или воды в нефти не являются прозрачными, разнородны по строению глобул и обладают фазовой неустойчивостью.

Оптимальные мицеллярные растворы (МР) получаются, когда энергия взаимодействия ПАВ с водой и с углеводородной фазой одинаковы и значительны по величине. Это основное условие для образования устойчивых мицеллярных растворов. Однако, для повышения их устойчивости в пластовых условиях (состав нефти, пластовой воды, насыщенность и строение пласта и пр.) в растворы добавляется четвертый компонент - стабилизатор.

Изменяя содержание ПАВ, стабилизатора, углеводов и воды можно получить мицеллярный раствор с различными структурами мицелл, устойчивостью и межфазным натяжением на контакте с нефтью и водой.

Тип мицеллярного раствора зависит от соотношения компонентов, минерализации воды, температуры, структуры ПАВ и других факторов. Возможно совместное существование различных типов и структур МР и их взаимный переход друг в друга (инверсия) (рис. 1).

Формально техника и технология метода мицеллярно-полимерного заводнения (МПЗ) мало отличается от традиционной закачки воды), но этот метод позволяет решать проблему более полного извлечения остаточной нефти с обычными характеристиками (вязкость 20-30 мПа.с, температура 90-95 °С).



**Рисунок 1** – Зоны существования микроэмульсий различных типов.

Механизм вытеснения нефти мицеллярными растворами определяется их физико-химическими свойствами. В силу того, что межфазное натяжение между МР и пластовыми жидкостями (нефть, вода) очень низкое, МР, устраняя действие капиллярных сил, вытесняет нефть и воду.

Количество извлеченной при помощи МПЗ остаточной нефти может составлять от 20 до 90%. (1-6 т нефти/т МР). Экономическая эффективность будет определяться стоимостью компонентов МР и БЖ.

Можно отметить основные следующие недостатки метода мицеллярно-полимерного заводнения:

- сложность технологии, необходимость строжайшего соблюдения последовательности закачки, качественного и количественного состава МР и БЖ;
- острая чувствительность к неблагоприятным геолого-физическим условиям (высокая минерализация и жесткость воды, температура, адсорбируемость ПАВ на породе пласта, гидродинамическое разрушение МР, защемление МР);
- необходимость тщательной подготовки воды для приготовления МР и БЖ (удаление механических примесей, деаэрация, бактерицидная обработка;
- большие объемы и высокая стоимость реагентов.

Для решения проблем жесткости воды и адсорбционных потерь реагентов могут быть использованы оторочки так называемых «жертвенных» реагентов, предназначенных для подавления центров адсорбции и перевода ионов  $Ca^{2+}$  в нерастворимый осадок (например, силикат и бикарбонат натрия). Разрабатываются новые типы ПАВ, в том числе поверхностно-активные полимерные составы (ПАПС).

Внутрипластовое образование МР возможно, но успешность технологии, помимо свойств применяемых реагентов, будет зависеть от точности сведений о составе и свойствах пластовых пород, нефти и воды, пластовых температур и гидродинамических пластовых условий.

Анализ современного состояния разработки залежей с остаточной нефтью показывает, что для них пока не создан универсальный метод, который может обеспечить высокоэффективную разработку нефти с высокой вязкостью.

Главным преимуществом ее перед другими методами являются меньшая трудоемкость, экологическая чистота, возможность применения на высоковязких залежах и низкая себестоимость. Кроме того, использование отходов различных производств является ресурсосберегающим, позволяющим одновременно решить некоторые экологические задачи. Поэтому применение мицеллярного воздействия перспективно.



## ГОССИПОЛОВАЯ СМОЛА – ЦЕННОЕ СЫРЬЕ ДЛЯ ПЕРЕРАБОТКИ

ИсаА.Б.<sup>а</sup>, Бейсенбаев О.К.<sup>а</sup>, Ахмедов У.К.<sup>б</sup>

<sup>а</sup> г. Шымкент, Южно-Казахстанский государственный университет им. М.Ауэзова

<sup>б</sup> г. Ташкент, Институт общей и неорганической химии АН РУЗ

В области использования госсиполовой смолы работали многие ученые как в Республике Узбекистан, так и за рубежом и достигли определенных результатов. В частности ими установлены возможность использования госсиполовой смолы для получения ионитов, покрытий и герметизирующих составов, мастик, шпаклевок, лаков, огнезащитных составов, антисептиков, смазок – охлаждающих жидкостей. В дорожном строительстве в качестве укрепителя гравийно-песчаных смесей, песков и иных сыпучих грунтов, в литейном производстве в качестве связующего. Необходимо отметить, что результаты этих исследований до настоящего времени не нашли широкого производственного применения и остаются в рамках лабораторных исследований. Причиной этого является то, что госсиполовая смола представляет собой вязкотекучую массу сложного химического строения, ее транспортировка и хранение связана с большими затруднениями.

Преимущество предлагаемой технологии перед схожими технологиями и методами заключается в том, что по разработанному способу госсиполовая смола с использованием определенных ингредиентов на основе местного сырья превращается в порошкообразное состояние, непосредственно в масложиркомбинатах путем ее подачи и переработки в специальном реакторе, смонтированном на линии выгрузки госсиполовой смолы. В этом реакторе осуществляется ее модификация различными ингредиентами, с соблюдением ранее установленных в лабораторных условиях технологических режимов до получения порошкообразной госсиполовой композиции.

Полученная композиция затаривается в полиэтиленовые мешки, и передается в склад готовой продукции. Следует отметить, что, при этом отпадает ее транспортирование на большие расстояния в вязкотекучем состоянии до потребителей различных отраслей промышленности, создающие большие затруднения при их транспортировке и их использовании. Необходимо отметить, что рецептуры порошкообразной водорастворимой госсиполовой смолы разработаны впервые. Разработанная порошкообразная водорастворимая госсиполовая смола может успешно применяться для защиты от коррозий оборудования и трубопроводов химической, нефтегазовой промышленности.

Было экспериментально установлено, что поверхности металлические части оборудования, соприкасающиеся с агрессивной средой и трубопроводов покрываются госсиполовой композицией толщиной от 0,5 до 2 и более миллиметров в зависимости от условий их эксплуатации, что значительно увеличивает срок службы частей оборудования. Кроме этого, разработанная модифицированная госсиполовая смола может использоваться в приготовлении буровых растворов при бурении нефтегазовых скважин.

Было установлено, что обработанные модифицированной госсиполовой смолой стандартные буровые растворы на основе таких реагентов, как ГИПАН, К-4, УЦР, ССБ, и другие, показали более высокую степень стабилизации.

Использование модифицированной госсиполовой смолы в буровых растворах может значительно улучшить процесс бурения, сократить расходы на химические реагенты, уменьшить риск осложнений в скважине. Таким образом, переработка госсиполовой смолы в композиционно твердое или порошкообразное состояние и расширения ее области применения в различных отраслях промышленности является задачей сегодняшнего дня, на решение которой направлена данная работа. В связи с этим целью настоящей работы является разработка технологии переработки вязкотекучей госсиполовой смолы в порошкообразную водорастворимую форму для увеличения нефтеотдачи скважин.



Для достижения данной цели необходимо решить следующие задачи:

1. Проведение анализа современного состояния госсиполовой смолы и перспективы ее использования в различных отраслях промышленности;
2. Обоснование выбора и методики исследований физико-химических свойств вязкотекучей госсиполовой смолы;
3. Разработка эффективных составов водорастворимой модифицированной порошкообразной госсиполовой смолы;
4. Разработка методических принципов и технологии получения водорастворимой порошкообразной модифицированной госсиполовой смолы;
5. Разработка технико-экономической эффективности от применения порошкообразных водорастворимых модифицированных госсиполовых смол в производстве композиционных химических реагентов и буровых растворов на их основе, используемых при бурении нефтегазовых скважин.

Определение состава госсиполовой смолы. В госсиполовой смоле содержится от 52 до 64% СЖК и их производных, остальная часть - продукты конденсации и полимеризации госсипола и его превращения, образующиеся при извлечении масла, главным образом в процессе дистилляции жирных кислот из соапстоков. Приведем типичный состав госсиполовой смолы (Каттакурганский масложирокомбинат) при 1-м режиме: 97,29% органических веществ; 2,71% неорганических веществ; 100% эфирорастворимых веществ; кислотное число 65,3 мг КОН; йодное число (по Ганусу) 99; число омыления 199 мг КОН/г; эфирное число 134 мг КОН; гидроксильное число 91%; 64% жирных кислот, высвобождаемых при омылении; 36% нежирных веществ; 0,2165% фосфора (в пересчете на P<sub>2</sub>O<sub>5</sub>); 8,55% кальция в кальциевых солях госсиполовой смолы. Высокие эфирные числа в госсиполовой смоле указывают на присутствие большого количества лактонов. Состав госсиполовой смолы следующий: смолу омыляют 20%-ным спиртовым раствором КОН, спирт отгоняют, после чего добавляют эфир. Продукт разделяется на омыляемую (77%) и неомыляемую (23%) части. При растворении неомыляемой части в хлороформе выделяется 0,7-0,75% углеводов С<sub>27</sub>—С<sub>33</sub> (установлено газожидкостным хроматографированием). Из бензольного элюата после перекристаллизации из ацетона выделены три вида спиртов (1,2-1,5%): гексаказанол (Тпл 77-78°C), октаказанол (Тпл 80-81°C) и триоктанол (Тпл 84-85°C). После отделения спиртов от неомыляемой части выделено еще два кристаллических вещества - β-ситостерин (Тпл 137-138°C) в количестве 7-7,2% и β-амирин (Тпл 196-197°C) 0,15-0,2%. В остальной части - смесь полимеров сложных эфиров пальмитиновой, стеариновой и линолевой кислот. Практический интерес представляет β-ситостерин, поскольку он широко применяется для синтеза гормональных препаратов и препаратов, снижающих содержание холестерина в крови. Омыляемую часть госсиполовой смолы подкисляют 10%-ной серной кислотой до pH 3 и 4 раза экстрагируют бензином. Бензиновые экстракты объединяют, растворитель отгоняют, в результате чего получается жирнокислотная часть госсиполовой смолы (57%), которая представляет собой смесь жирных кислот С<sub>16</sub>—С<sub>18</sub> и лактонов. Маточник выпаривают до 1/3 части и выделяют (20%) фенольную часть смолы в кристаллической форме. В смеси насыщенных и ненасыщенных кислот гудронов жирных черных хлопковых соапстоков идентифицированы миристиновая кислота (0,5-1%), пальмитиновая кислота (15-20%), стеариновая кислота (1-2%), олеиновая кислота (20-25%), линолевая кислота (30-40%); остальное - продукты полимеризации и поликонденсации. В госсиполовой смоле обнаружено 12% азотсодержащих соединений, 36% продуктов превращения госсипола и 52% жирных и оксигирных кислот. Это однородная вязкогекучая масса от темно-коричневого до черного цвета. Ее свойства могут существенно варьировать, что зависит от качества исходного сырья, соблюдения технологических режимов разложения жиров, глубины дистилляции полученных жирных кислот и других факторов.

**N-БЕНЗИЛПИПЕРИДИНОВЫЕ СЛОЖНЫЕ ЭФИРЫ  
ФТОРБЕНЗОЙНЫХ КИСЛОТ С ПРОТИВОИНФЕКЦИОННЫМ ДЕЙСТВИЕМ**

**Исаева У.Б.<sup>а,б</sup>, Пралиев К.Д.<sup>а</sup>, Датхаев У.М.<sup>б</sup>,  
Омырзаков М.Т.<sup>в</sup>, Сейлханов О.Т.<sup>г</sup>, Ахметова Г.С.<sup>а</sup>**

<sup>а</sup> г. Алматы, АО «Институт химических наук им А.Б. Бектурова»

<sup>б</sup> г. Алматы, НАО «Казахский национальный медицинский университет имени С.Д. Асфендиярова»

<sup>г</sup> г. Алматы, ТОО «GxPCorpany»

<sup>в</sup> Кокшетауский Государственный университет им. Ш. Уалиханова

Настоящее исследование является продолжением работ по направленному поиску противомикробных средств, с целью введения атомов фтора в структуры пиперидинов и поскольку производные пиперидина являются важными интермедиатами и компонентами многих биологически активных соединений и природных веществ, получены пиперидинсодержащие фторбензоаты на основе спиртов и кетоксимов 1- бензилпиперидин-4-она ацилированием пара-, мета-, орто-фторбензоилхлоридами, дифтор- и трифторметилбензоилхлоридами.

Среди синтезированных фторбензоатов выявлены препараты с противомикробным действием, имеющие преимущества перед препаратами сравнения (табл.1).

**Таблица 1** – Минимальные бактерицидные концентрации (МБК) исследуемых веществ (ИВ) и антибиотиков в отношении мультирезистентных тест-штаммов

Исследуемое вещество	МБК, мкг/мл	
	<i>Staphylococcus aureus</i> ATCC BAA-39	<i>Escherichiacoli</i> ATCC BAA-196
АIP-15	31	НТ
АIP-16	63	НТ
АIP-23	НТ	250
Гентамицин	500	250
Амоксициллин	16	2000
Примечание: НТ – не тестировалось		

В таблице 1 для наглядности представлены обобщенные данные минимальных бактерицидных концентраций ИВ и субстанций антибиотиков, которые определяли методом двукратных серийных разведений на бульоне Мюллера-Хитона. В отношении *Staphylococcus aureus* ATCC BAA-39 цидными свойствами обладали АIP-15 и АIP-16 в концентрации 31 мкг/мл и 63 мкг/мл, соответственно. Вещество сравнения - гентамицин - проявил себя хуже, бактерицидная концентрация была зафиксирована в концентрации 500 мкг/мл для гентамицина. У амоксициллина МБК в отношении тест-штамма составила 16 мкг/мл.

В отношении *Escherichia coli* ATCC BAA-196 значение МБК АIP-23 составило 250 мкг/мл, также как и у вещества сравнения – гентамицина, а у амоксициллина эффективность составила 2000 мкг/мл.

*Исследования выполнены при финансовой поддержке КН МОН РК, ПЦФВР10965255*

## КЛАТРАТНЫЕ КОМПЛЕКСЫ ВКЛЮЧЕНИЯ ВИТАМИНОВ И ИХ ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ И БИОЛОГИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА

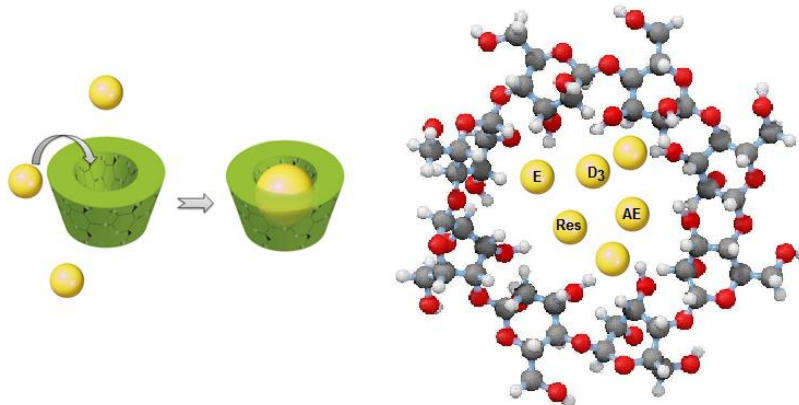
Искинеева А.С.<sup>а</sup>, Фазылов С.Д.<sup>б</sup>, Буркеев М.Ж.<sup>б</sup>, Сарсенбекова А.<sup>б</sup>,  
Мустафаева А.<sup>а</sup>, Пустолайкина И.<sup>б</sup>, Бакирова Р.Е.<sup>в</sup>

<sup>а</sup> г. Нур-Султан, Казахский Агротехнический университет им. С. Сейфуллина,  
e-mail: [iosu8990@mail.ru](mailto:iosu8990@mail.ru)

<sup>б</sup> Карагандинский университет им. Е.А. Букетова

<sup>в</sup> Медицинский университет Караганды

Витамины выполняют важную биохимическую функцию в борьбе со старением организма, профилактике и лечении сердечно-сосудистых заболеваний. Однако, липофильность и нерастворимость в водной среде многих жирорастворимых витаминов создают трудности в производстве пищевых композиций. В статье обсуждаются результаты цикла исследований по получению инкапсулированных супрамолекулярных комплексов витаминов E, D<sub>3</sub>, ресвератрола и аевита с водорастворимым олигосахаридом β-циклодекстрином (β-ЦД). Клатратные комплексы витаминов с β-ЦД в соотношениях 1:1, 1:2, 1:3 и 1:4 получены в водно-спиртовой среде методами ультразвуковой и микроволновой активации с выходами от 72 до 92%. Наибольшие выходы клатратов «β-ЦД:Вита» наблюдаются при соотношении компонентов «гость-хозяин» 2:1, при этом растворимость комплексов в воде (значительно увеличивается).



Выполнено молекулярное моделирование комплексов включения витаминов с β-ЦД с помощью метода ММ+. На основании полуэмпирических РМЗ расчетов выполнена оценка полной энергии исследуемых систем. Морфология поверхности клатратных комплексов «гость-хозяин» описана с помощью сканирующего электронного микроскопа. Спектральные свойства комплексов охарактеризованы данными ИК-Фурье и ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C спектроскопии. Приведены данные по изучению влияния инкапсулированных β-ЦД-ном витаминов (E и D<sub>3</sub> на безопасность пищевых мясных продуктов (полукопченых колбас из баранины и мяса птицы). Органолептическая оценка полукопченых колбас с клатратным комплексом «β-CD:Вита» проведено по 9-балльной шкале согласно ГОСТ 9959-91 «Продукты мясные. Общие условия органолептической оценки». Физико-химические и микробиологические характеристики образцов мясных продуктов с витаминными комплексами «β-CD:Вит» определялись в испытательной лаборатории ТОО «Нуритест» (Алматы, аттестат аккредитации KZ.N.02.0043 от 08 февраля 2020). Результаты микробиологических исследований мясного изделия с инкапсулированными витаминными комплексами подтвердили их пищевую безопасность. Разработанный научный подход представляет интерес для использования инкапсулированных клатратных комплексов жирорастворимых витаминов в производстве функциональных продуктов питания.

Работа выполнена при финансовой поддержке КН МОН РК, проект ПЦФ № BR10965230

## ПРОИЗВОДНЫЕ ТЕТРАГИДРОПИРАНА (ОКСАНА): СИНТЕЗ И ПРИМЕНЕНИЕ

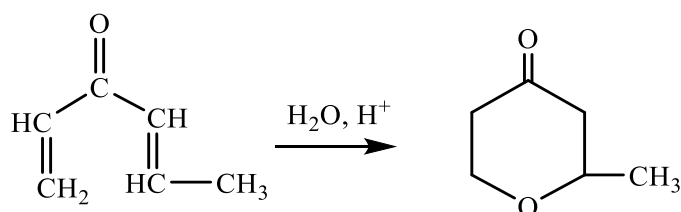
Калугин С.Н.

г. Алматы, Казахский национальный университет им. аль-Фараби

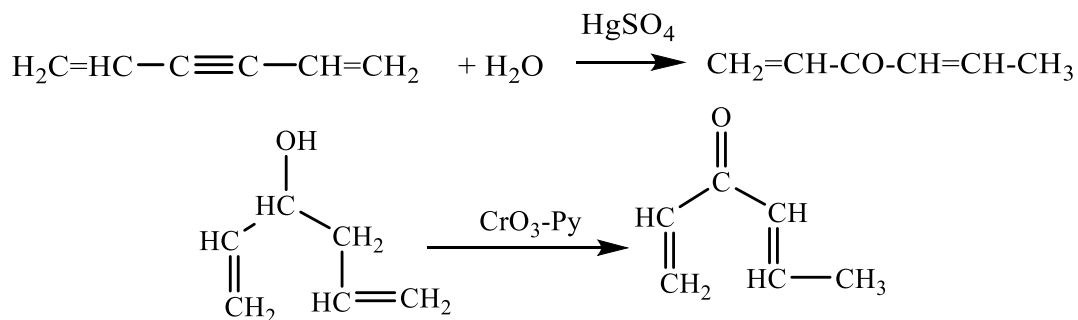
Производные тетрагидропирана проявляют широкий спектр биологической и поверхностной активности и с успехом применяются в различных отраслях промышленности, сельского хозяйства, медицине и экологии. Функционально замещенные производные тетрагидропирана являются ценными объектами исследований для решения ряда важных теоретических вопросов органической химии, таких как реакционная способность, механизм реакции и стереохимия. Наличие в молекулах этих соединений реакционных центров открывает широкие возможности синтеза разнообразных гетероциклических соединений, что представляет огромный теоретический и практический интерес при изучении фундаментального вопроса естествознания о связи между химическим строением соединений и их активностью.

Разработке методов синтеза производных тетрагидропирана, изучению их реакционной способности, стереохимии и биологической активности посвящены многочисленные фундаментальные и прикладные исследования в СССР и Республике Казахстан. Начало этим исследованиям было положено академиком АН СССР Назаровым И.Н. [1] и продолжено в Армении – академиком С.А.Вартанян [2], а в Казахстане - чл-корр. АН КазССР, д.х.н. Азербаяевым И.Н. и чл-корр. НАН РК, д.х.н. Шарифкановым А.Ш. [3, 4]. В исследованиях этих научных школ были разработаны основные способы получения тетрагидропиран-4-онов.

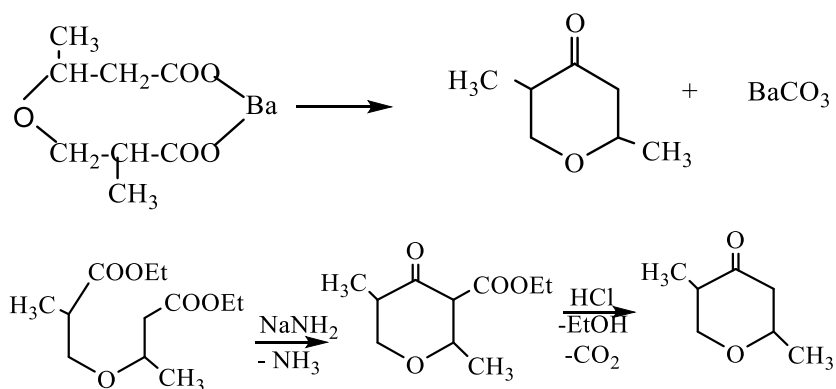
Так, 2,2-диметилтетрагидропиран-4-он получен Назаровым И.Н. в результате ацетилен-алленовой перегруппировки диметилвинилэтинилкарбинола [1]. Тетрагидропиран-4-оны можно получить гидратацией дивинилкетонов в кислой среде



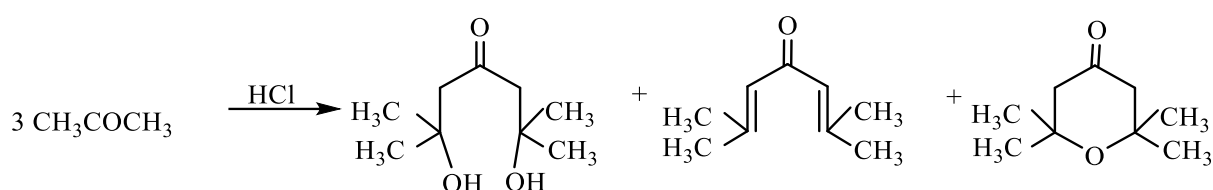
Исходные дивинилкетоны могут быть получены гидратацией производных дивинилацетилена по Кучерову или окислением дивинилкарбинолов комплексом хромового ангидрида и пиридина [5].



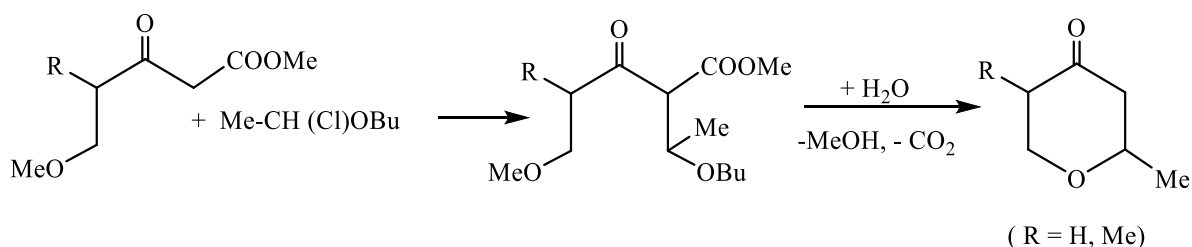
2,5-диметилтетрагидропиран-4-он - пиролизом бариевой соли 2-кар-бокиспропил-2'-карбоксиизопропилового эфира или сложноэфирной конденсацией сложных эфиров 2-карбокиспропил-2'-карбоксиизопропилового эфира [6].



Производные тетрагидропиран-4-она образуются в результате альдольно-кетоновой конденсации. Так, при конденсации ацетона в присутствии хлористого водорода получают 2,6-диметилгепта-2,6-диол-4-он, фороны и 2,2,6,6-тетраметил-оксан-4-он [7].

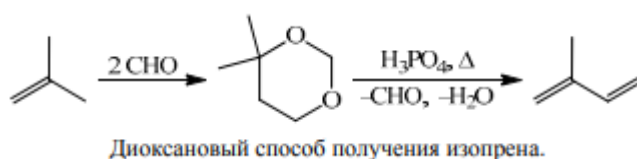


Еще одной схемой получения производных тетрагидропиран-4-она за счет одновременного образования связей  $\alpha$ -углерод - гетероатом и  $\alpha$ -углерод -  $\beta$ -углерод цикла является взаимодействие метил-5-метокси-3-оксопентаноата и метил-5-метокси-3-оксо-4-метилпентаноата с  $\alpha$ -хлорэтилбутиловым эфиром и последующим гидролизом. По этой реакции получены соответствующие 2-метил- и 2,5-диметил-оксан-4-оны [8].



Другим перспективным способом получения производных тетрагидропирана является реакция оксиметилирования непредельных соединений.

В Советском Союзе приоритет в исследованиях реакции оксиметилирования непредельных соединений (реакция Принса) принадлежит научной школе промышленных органиков д.х.н., проф. Фарберова М.И. [9] и научной школе д.х.н., проф. Рахманкулова Д.Л. [10]. Эта реакция легла в основу диоксанового способа получения изопрена.



Основными продуктами реакции Принса являются производные 1,3-диоксана, 1,3-алкандиолов, а также производные дигидропирана и тетрагидропирана.



яровой. Данная композиция повышает резистентность к засухе [19, 20].

В настоящее время одной из главных экологических проблем является проблема утилизации стойких органических загрязнителей из почвы. Для решения этой проблемы в настоящее время используют фиторемедиационную технологию [21 – 30].

В исследованиях Института ботаники и биотехнологии растений НАН РК установлено, что аккумуляционная способность растений увеличивается при обработке семян растений растворами производных тетрагидропирана перед посадкой [31, 32]. Производные тетрагидропирана являются эффективными интенсификаторами фиторемедиационной технологии очистки почв от стойких органических загрязнителей. При обработке загрязненной почвы растворами этих гетероциклических соединений содержание пестицидов в вегетативных органах возрастает в 1,5-2 раза, а фитоэкстракционный потенциал растений увеличивается с 0,22 (%/м<sup>2</sup>) до 0,87 (%/м<sup>2</sup>).

В лаборатории флотореагентов и обогащения АО ЦНЗМО (руководитель лаборатории – д.т.н., проф. Тусупбаев Н.К.) показана перспектива применения ксантогенатов 3-алкилтетрагидропиран-4-ола при обогащении полиметаллических руд Артемьевского, Тишинского и Акжальского месторождений и месторождения Шалкия. Показано, что расход флотореагентов в цикле селекции для ксантогената 3-гексилтетрагидропиран-4-ола (КСК-6) на 30 % меньше, чем для Т-80, что существенно сказывается на экономических показателях процесса [33, 34].

Производные тетрагидропирана с длинноцепочным радикалом перспективны в качестве неполимерных депрессорных присадок для транспортировки Кумкольской нефти [35, 36].

### Литература

1. Назаров И.Н. Избранные труды / Под ред. И.В. Торгова - М.:АН СССР, 1961. - 690 с.
2. Вартанян С.А. Химия винилэтинилкарбинолов //Успехи химии – 1962.- Т.31, №10. – С.1137-1164.
3. Азербайев И.Н. Избранные труды. Химия производных ацетиленов. / Под ред. М.И. Горяева и др. - Алма-Ата: Наука, 1976. - 352 с.
4. Шарифканов А.Ш. /серия книг «Өнегелі өмір» - 2019. – вып.172. – 296 с.
5. Токмурзин К.Х., Шарифканов А.Ш., Калугин С.Н. Окисление  $\alpha, \beta, \beta', \gamma'$ -дивиниловых спиртов // Изв. МН-АН РК. сер. хим.- 1998. -№ 1.- С.91-97.
6. Тосунян А.О., Вартанян С.А., Мадакян В.Н. Синтез и превращения 2,5-диметилтетрагидропиран-4-ола // Арм. хим. журн. - 1977. - Т. 30, №9 - С. 785-787.
7. Ким Д.Г. Дивинилкетоны и гетероциклы на их основе -Алма-Ата: Гылым - 1993. - 232 с.
8. Калугин С.Н., Шарифканов А.Ш. 5-Метокси-3-оксопентаноаты и алкенилкарбметоксиметилкетоны в синтезе  $\gamma$ -пиперидонов и  $\gamma$ -тетрагидро-пиранонов // Изв. МН-АН РК. сер. хим.- 1998.- № 1.-С.97-103.
9. Мамлиева А.В., Михайлова Н.Н., Латыпова Ф.Н. Из истории реакции Принса. Работы Д.Л. Рахманкулова в области конденсации олефинов с формальдегидом // История и педагогика естествознания – 2018. - №1. – С. 42 – 44.
10. Исагулянц В.И., Хаимова Т.Г., Меликян В.Р., Покровская С.В. Конденсация ненасыщенных соединений с формальдегидом (реакция Принса) // Успехи химии. –1968.- Т.37, вып.1. –С.61 – 77.
11. Калугин С.Н. Оксиметилирование децен-1 // Известия АН РК - 2008. - № 5 (371). – С. 40 – 44.
12. Ketegenov T., Asylkhanov Zh., Kamunur K., Karagulanova A., Kalugin S. New Flotation Reagents on the Base of Tetrahydropyran for the Processing of High-Ash Coals //



Eurasian Chemico-Technological Journal – 2019.- С. 277 – 281

13. Калугин С.Н. Енамины тетрагидропиран-4-онов // Известия научно-технического общества «Кахак» - 2007, № 1 – С. 36-41.

14. Калугин С.Н. Синтез и поверхностные свойства натриевых солей сульфатов тетрагидропиранового ряда // Вестник Казахского Национального университета (КазНУ), серия химическая. – 2007. – № 2. – С. 239 – 244.

15. Калугин С.Н. Поверхностные свойства сульфонов тетрагидропиранового ряда // Вестник (КазНУ), серия химическая. – 2007. – № 2. – С. 244 – 249.

16. Калугин С.Н., Кулбаева А.М., Балтабаев А., Кушекова А.К., Абилов Ж.А. Разработка способов получения ацетиленовых спиртов тетрагидропиранового ряда // Химический журнал Казахстана – 2007, № 16. Спец.выпуск – С.31-34.

17. Ивлева Г.В., Калугин С.Н., Динжуманова Р.Т., Асылханов Ж.С., Кушекова А.К. Енамины пиперидин-4-онов и тетрагидропиран-4-она. Синтез алкилированных и ацилированных производных пиперидин-4-онов и тетрагидропиран-4-она // Химический журнал Казахстана - №1. – 2008 – С. 261-264

18. Калугин С.Н. Биологически- и поверхностно-активные производные тетрагидропирана и пиперидина – Алматы: Казак университеті – 2020. – 176 с.

19. Митрофанова А., Исенова Г., Ефремов С.А., Нечипуренко С.В., Калугин С.Н., Елибаева Н.С. Влияние ростстимулирующих композиций оксанового ряда на рост и развитие пшеницы // Вестник КазНТУ, химико-технологические науки – 2014. – Т.76, №4. – С.10-14.

20. Issenova G., Mitrofanova A., Kalugin S., Efremov S., Sagitov A. Effect of compositions of derivatives of oxone and carbon minerals on the growth and development of wheat crop // Crop Research & Research on Crops – 2018. – P.191-199.

21. Патент № 26154 Республики Казахстан. Способ утилизации загрязнённой пестицидами фитомассы // Жамбакин К.Ж., Нуржанова А.А., Калугин С.Н., Жолбаева К.Д., Жунусов Ж.С. – БИ - № 9. – 2012.

22. Мукашева Т.Д., Бержанова Р.Ж., Нуржанова А.А., Калугин С.Н., Сыдыкбекова Р.К., Игнатова Л. В, Бектилеуова Н.К., Омирбекова А. А. Эколого-функциональные реакции ассоциированных с растениями ризосферных микробных сообществ на загрязнения хлорорганическими пестицидами // Известия академии наук РК. Серия биологическая – 2015. - №6. – С.91-97.

23. Nurzhanova A. A., Pidlisnyuk V., Sailakhanuly Y., Kenessov B., Kalugin S, Aligulova R., Nurmagambetova A., Trogl J., Abit K., Stefanovska T., Erickson L. Phytoremediation of military soil contaminated by metals and organochlorine pesticides using Miscanthus // Comm. Appl. Biol. Sci, Ghent University – 2017. - №2. – P.61-67.

24. Nurzhanova A., Kalugin S., Ermekova M., Tagaev Q., Aytasheva Z. Organochloride pesticides and university Pumpkin germplasm in Kazakhstan // Biology & Chemistry – 2012. - №4. – P.13-17.

25. Nurzhanova A., Zhambakin K., Kalugin S. Obsolete pesticides and application of colonizing plant species for remediation of contaminated soil in Kazakhstan // Environ Sci Pollut Res – 2013. - №20 – P.2054-2063.

26. Нуржанова А.А., Айташева З.Г., Калугин С.Н., Жумашева Ж., Ораз С., Кашкеев К. Возможности использования *cucurbita pero* для фиторемедиации почв, загрязнённых метаболитами ДДТ // Вестник КазНУ, серия экологическая - №2/2 (38) - 2013 – С.259-263.

27. Нуржанова А. А., Турашева С.Г., Калугин С.Н. Снижение концентрации хлорорганических пестицидов в почве, с помощью дикорастущих видов растений // Вестник КазНУ (серия биологическая) – 2014. – Т.60, №1 – С.305-308.

28. Нуржанова А. А., Калугин С.Н., Турашева С.Г., Айташева З.Г., Жумашева Ж., Кашкеев К., Ораз С. Особенности адаптивных процессов у растений семейства *Cucurbitaceae*, произрастающих в условиях пестицидного загрязнения // Вестник КазНУ (серия биологическая) – 2014. – Т.60, №1 – С.301-304.

29. Нуржанова А.А., Pydlisnyuk V., Сайлауханұлы Е., Калугин С.Н., Мурсалиева В. К., Стефановская Т. Р., Erickson L. *Miscanthus x giganteus* – перспективный биоэнергетический фиторемедиант // Доклады НАН РК – 2015. -№5. – С.128-138.

30. Nurzhanova Asil, Pidlisnyuk V., Kalugin S., Stefanovska T., Drimal M. *Miscanthus X giganteus* as a new highly efficient phytoremediation agent for improving soil contaminated by pesticides residues and supplemented contaminants // *Comm.Appl.Biol.Sci.* - 2015. - №3. – С.361-366

31. Калугин С.Н., Нуржанова А.А., Митрофанова А., Байжуманова Р. Индуцированная фиторемедиация загрязненных пестицидами почв с помощью производных оксана // Известия Самарского научного центра Российской Академии Наук - 2013. –Т.15, №3 – С.1306-1310.

32. Калугин С.Н., Нуржанова А. А., Ефремов С.А., Елибаева Н.С., Алигулова А. Оптимизация фиторемедиации загрязненных хлорорганическими пестицидами почв с помощью тетрагидропирансодержащих композиций // Известия НАН РК, серия биологическая и медицинская – 2016. - №5. – С.154 - 161

33. Патент № 21101 РК. Способ переработки полиметаллической медно-свинцово-цинковой руды // Бектурганов Н.С., Тусупбаев Н.К., Калугин С.Н., Семушкина Л.В., Калдыбаева Ж.А. – БИ - №4. – 2009.

34. Кушекова А.К., Семушкина Л.В., Калугин С.Н., Тусупбаев Н.К., Калиева Р.С., Калдыбаева Ж.А.. Новый флотореагент на основе продуктов глубокой переработки нефти. // Республиканская научно-практическая конференция «Инновационное развитие и востребованность науки в современном Казахстане» / Сборник статей. Часть 4. Химические науки, Алматы, 2007. – С.200-202.

35. Калугин С.Н., Малахова О.В., Ишкенов Э.Р., Абилов Ж.А., Имирова А.И. Исследования депрессорной способности производных тетрагидропирана // Вестник Казахского Национального университета (КазНУ), серия химическая. – 2007. – № 1. – С. 19 – 23.

36. Бойко Г.И., Любченко Н.П., Маймаков Т.П., Шайхутдинов Е.М., Жермоленко Е.А., Мухамедова Р.Ф., Калугин С.Н. Синтетические депрессанты на основе производных 4-тетра-гидропиранолов // I Международ. конф. Российского хим.общества им. Д.И.Менделеева: матер. конф. – Москва, 2009. – С.100 – 103.

**ЗАВИСИМОСТЬ РЕГИОСЕЛЕКТИВНОСТИ  
*para*-НИТРОФЕНИЛСУЛЬФОХЛОРИРОВАНИЯ  
β-АМИНОПРОПИОАМИДОКСИМОВ ОТ СТРОЕНИЯ СУБСТРАТА**

**Каюкова Л.А.<sup>а</sup>, Вологжанина А.В.<sup>б</sup>, Пралиев К.Д.<sup>а</sup>, Байтурсынова Г.П.<sup>а\*</sup>,  
Ергалиева Э.М.<sup>а</sup>, Курмангалиева А.Б.<sup>а</sup>**

<sup>а</sup> г. Алматы, АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова»,

e-mail: [guni-27@mail.ru](mailto:guni-27@mail.ru)

<sup>б</sup> г. Москва, «ФГБУН Институт элементоорганических соединений им. А.Н. Несмеянова РАН»

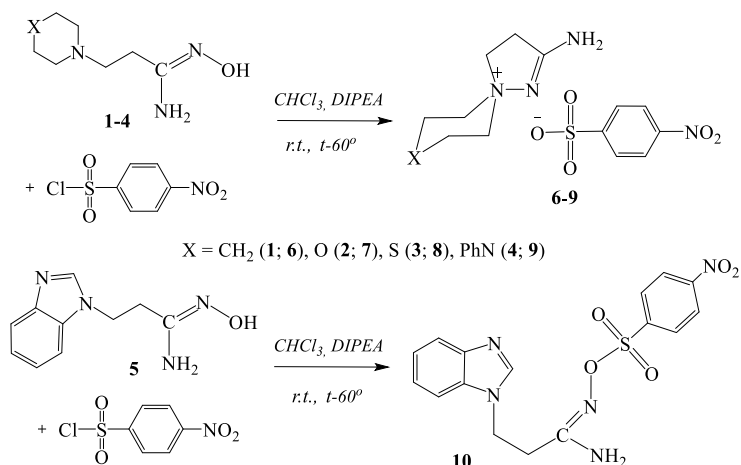
В современной литературе по продуктам сульфохлорирования амидоксимов имеются разноречивые сведения о реакции арилсульфохлорирования амидоксимов.

Известны данные об образовании стабильных продуктов ацилирования по атому кислорода амидоксимной группы [1]; в то же время реакция сульфохлорирования аналогичных производных первичных амидоксимов в зависимости от строения исходного амидоксима и условий реакций может приводить к перегруппированным по Тиману продуктам с образованием мочевины. Мочевины образуются при последовательном воздействии арилсульфохлоридов и воды на амидоксимины [2]. В присутствии DIPEA при сульфохлорировании амидоксимов могут быть образованы замещенные цианамиды. В результате модифицированной перегруппировки Тимана, образуются различные N-замещенные цианамиды [3].

Нами описано толуолсульфохлорирование β-аминопропиоамидоксимов с β-аминогруппами, представляющими собой шестичленные азотистые гетероциклы и бензимидазол-1-ил [4], приводящее к спироциклическим соединениям – толуолсульфонатам 2-амино-1,5-дiazаспиро[4.5]-дец-1-ен-5-аммония; тозилирование же β-(бензимидазол-1-ил)пропиоамидоксима дает продукт по атому кислорода амидоксимной группы [4].

В данном сообщении описано взаимодействие β-аминопропиоамидоксимов (1–5) с *para*-нитробензолсульфохлоридом в CHCl<sub>3</sub> при комнатной температуре и при нагревании реакционной смеси до температуры кипения растворителя.

Изменение электронных свойств сульфохлорирующего агента – переход от тозилхлорида к *para*-нитрофенилсульфохлориду приводит к увеличению времени реакции при комнатной температуре от 15–20 ч в случае толуолсульфохлорирования [4] до 38–120 ч в последнем случае. Нагревание реакционной смеси при температуре кипения CHCl<sub>3</sub> снижает продолжительность реакции *para*-нитрофенилсульфохлорирования β-аминопропиоамидоксимов до 19–36 ч. Факт прохождения реакции арилсульфохлорирования β-аминопропиоамидоксимов (1–5) подтверждают физико-химические данные (ТСХ, элементный анализ, т. пл.) и ИК- и ЯМР (<sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C) спектры выделенных продуктов (6–10).



При установлении строения продуктов *para*-нитрофенилсульфохлорирования, в

первую очередь, мы опирались на данные физико-химических методов. Было отмечено различие значений индекса подвижности для продуктов сульфохлорирования амидоксимов с шестичленными азотистыми гетероциклами в  $\beta$ -положении (1–4) и для сульфопроизводного  $\beta$ -(бензимидазол-1-ил)пропиоамидоксима (5). Так, значения  $R_f$  арилсульфопроизводных 6–9 составляют 0.01–0.10, а соединения 10 – 0.81; исходные амидоксимы 1–5 имеют  $R_f$  в области 0.45–0.54. Температуры плавления арилсульфопроизводных 6–9 находятся в пределах 187–233 °С, а соединение 10 – 175 °С.

В ИК-спектрах соединений 6–10 имеется две группы полос характеристичных валентных колебаний сильной интенсивности –  $\nu_{\text{NO}_2}$  при 1515–1529 (асим.)  $\text{см}^{-1}$  и 1365–1349 (сим.)  $\text{см}^{-1}$  и полос валентных колебаний связей  $\nu_{\text{SO}_2}$  при 1240–1229 (асим.)  $\text{см}^{-1}$  и 1189–1197 (сим.)  $\text{см}^{-1}$ , а также полосы валентных колебаний двойной связи  $\text{C}=\text{N}$   $\nu_{\text{C}=\text{N}}$  при 1642–1665  $\text{см}^{-1}$ , валентных колебаний связей группы  $\text{N}-\text{H}_2$   $\nu_{(\text{N}-\text{H})_2}$  при 3302–3466  $\text{см}^{-1}$ .

В спектрах ЯМР  $^1\text{H}$  соединений 6–10 сигналы протонов, стоящих при двойных связях, находятся в районе  $\delta$  7.83–8.53 м.д.; протонов  $\text{NH}_2$  группы соединений 6–9 – при  $\delta$  7.23–7.37 м.д.; тогда как протоны  $\text{NH}_2$  группа соединения 10 имеет сигнал при  $\delta$  6.50 м.д. Протоны  $\alpha$ - и  $\beta$ -метиленовых групп соединений 6–10 дают триплетные сигналы в областях, соответственно:  $\delta$  2.04–3.17 м.д. и  $\delta$  3.81–4.33 м.д.

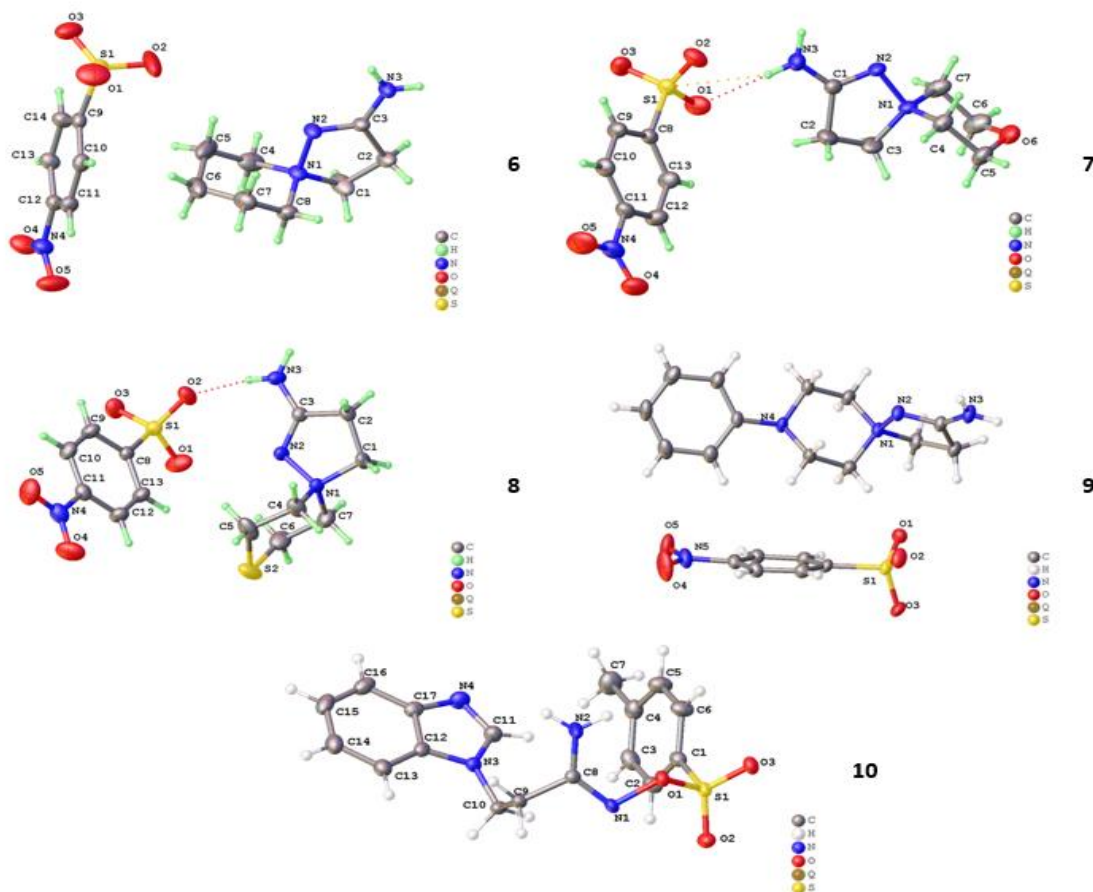
Спектры ЯМР  $^{13}\text{C}$  имеют набор сигналов атомов углерода, соответствующий образованию продуктов арилсульфохлорирования  $\beta$ -аминопропиоамидоксимов (6–10). В спектрах ЯМР  $^{13}\text{C}$  сигнал атома углерода связи  $\text{C}=\text{N}$  пиразолиниевых цикла соединений 6–9 присутствует при  $\delta$  169.10 м.д.; для соединения 10 сигнал атома углерода связи  $\text{C}=\text{N}$  амидоксимной группы – при 158.04 м.д.

Вышеприведенное рассмотрение физико-химических и спектральных показателей продуктов взаимодействия  $\beta$ -аминопропиоамидоксимов и *para*-нитрофенилсульфохлорида (6–10) позволяет сделать следующий вывод. Как и в случае толуолсульфохлорирования  $\beta$ -аминопропиоамидоксимов, реакция  $\beta$ -аминопропиоамидоксимов (1–4), имеющих шестичленные азотистые гетероциклы в  $\beta$ -положении протекает с образованием *para*-нитрофенилсульфонатов спиропиразолиниевых соединений (6–9); *para*-нитрофенилсульфохлорирование с  $\beta$ -(бензимидазол-1-ил)пропиоамидоксимом (5) идет по атому кислорода амидоксимной группы с образованием 3-(1H-бензо[d]имидазол-1-ил)-N'-[(4-нитрофенил)сульфонилокси]пропанамидамида (10).

Нагревание реакционной смеси не приводит к смене направления реакции; во всех случаях для амидоксимов 1–4 образуются *para*-нитрофенилсульфонаты 2-аминоспиропиразолиламмониевых соединений 6–9 и для амидоксима 5 – продукт *para*-нитрофенилсульфохлорирования по атому кислорода амидоксимной группы 10. Выходы продуктов 6–10 при комнатной температуре и при нагревании составляют соответственно: 6 (62 и 55%), 7 (65 и 65%), 8 (56 и 56%), 9 (50 и 68%) и 10 (45 и 66%); т.е., как правило, выходы или сохраняют свое значение или увеличиваются.

Наиболее наглядное представление о строении продуктов *para*-нитрофенилсульфохлорирования  $\beta$ -аминопропиоамидоксимов (1–5) демонстрируют данные рентгеноструктурного анализа монокристаллов продуктов 6–10 (Рисунок).

Таким образом, в результате наших исследований наряду с ожидаемым продуктом *para*-нитрофенилсульфо- $\beta$ -(бензимидазол-1-ил)пропиоамидоксимом был получен ряд структурно новых изомерных соединений – *para*-нитрофенилсульфонатов спиропиразоламмониевых соединений. Это, очевидно, демонстрирует термодинамическое преимущество последних по сравнению с продуктами *O*-ацилирования. Анализ литературных данных показывает, что среди производных пиразолинов нет примеров двухзарядных спиросоединений с аммонийным азотом в голове моста и каким-либо анионом в качестве противоиона.



**Рисунок** – РСА продуктов *para*-нитрофенилсульфохлорирования  $\beta$ -аминопропиоамидоксимов (6–10).

*Работа выполнена по гранту от КН МОН РК – «Изучение региоселективности реакции арилсульфохлорирования бета-аминопропиоамидоксимов; in vitro противодиабетический и противотуберкулезный скрининг продуктов» (ИРН AP08856440).*

## Литература

1. Doulou I., Kontogiorgis C., Koumbis A.E., Evgenidou E., Hadjipavlou-Litina D., Fylaktakidou C. Synthesis of stable aromatic and heteroaromatic sulfonylamidoximes and evaluation of their antioxidant and lipid peroxidation activity. *Eur. J. Med. Chem.* **2014**, № 80, 145–153. DOI: 10.1016/j.ejmech.2014.04.040
2. Tiemann F. Ueber die Einwirkung von Benzolsulfonsäurechlorid auf amidoxime. *Ber. Deutschen Chem. Ges.*, **1891**, 24, 4162. DOI: 10.1002/cber.189102402316
3. Bakunov S.A., Rukavishnikov A.V., Tkachev A.V. Modification of the Tiemann Rearrangement: One-Pot Synthesis of *N,N*-Disubstituted Cyanamides from Amidoximes. *Synthesis*, **2000**, 8, 1148–1159. DOI: 10.1055/s-2000-6317
4. KKayukova L.A., Baitursynova G.P., Yergaliyeva E.M., Zhaksylyk B.A., Yelibayeva N.S., Kurmangaliyeva A.B. Arylsulphonates of spiropyrazolines and *O*-tosilate- $\beta$ -(benzimidazol-1-yl)propionamidoxime as the products of  $\beta$ -amino-propionamidoximes tosylation. *Chem. J. Kaz.*, **2021**, 2(74), 22–32. DOI: <https://doi.org/10.51580/2021-1/2710-1185.25>

## ПОИСК ОПТИМАЛЬНЫХ УСЛОВИЙ АМИНОФОСФОРИЛИРОВАНИЯ РАЗЛИЧНЫХ ПИПЕРАЗИНОВ, ИМДАЗОЛА И БЕНЗИМИДАЗОЛА

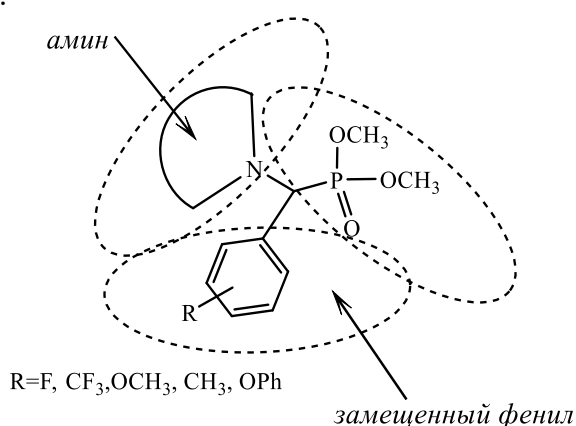
Ким Ю.Ю., Тен А.Ю., Пралиев К.Д., Ю В.К.

г. Алматы, АО «Институт химических наук им А.Б. Бектурова»,

e-mail: [kimkadic@gmail.com](mailto:kimkadic@gmail.com)

Трехкомпонентная реакция Кабачника-Филдса является универсальным общим методом синтеза аминофосфонатов. Классическая реакция протекает одностадийно при 80-120°C в среде полярного растворителя [1]. В некоторых случаях она протекает без дополнительного инициирования. Однако, проводимое нами аминофосфорилирование некоторых пиперазинов, имидазола и бензимидазола не дало удовлетворительных выходов (не более 20-23%) целевого продукта при применении условий классического подхода (кипячение в течение нескольких суток смеси амин+ароматический альдегид+диметилфосфит в бензоле), поэтому появилась необходимость поиска метода прототирования процесса.

Первоначально была предпринята попытка ультразвукового воздействия на реакционную смесь, позволившее незначительно увеличить выход целевых аминофосфонатов. Микроволновое облучение в «сухих» условиях повышает в небольшой степени выход продукта, но, к сожалению, одновременно способствует осмолению синтезируемых соединений. Микроволновое облучение в присутствии растворителя не дало значительных сдвигов в выходе, хотя позволило сократить время реакции от нескольких суток до минут.



Применение катализаторов возможно позволит повысить синтетический потенциал данной реакции. Поэтому, отмечая оказавшиеся нерезультативными некаталитические способы воздействия, ведется поиск в данном направлении. В качестве катализатора были опробованы ZnO и TiO<sub>2</sub>(анатаз), которые привели к росту выхода реакции на 5-10% в сравнении с предыдущими методами. Однако, этот результат также является неудовлетворительным.

Продолжение НИР видится в двух направлениях: 1) поиск условий повышения нуклеофильности азота, участвующего в реакции фосфорилирования; и 2) комбинация методов прототирования (MW+US; MW+catalysis; US+catalysisилиMW+US+catalysis).

### Литература

1. Черкасов Р. А., Галкин В. И. Реакция Кабачника-Филдса: синтетический потенциал и проблема механизма // Успехи химии. – 1998. – Т. 67, № 10. – С. 940-968.

*Исследования выполнены при финансовой поддержке КН МОН РК, ПЦФBR10965255*

## РАЗРАБОТКА ЦИФРОВОГО ДВОЙНИКА ПРОЦЕССА АЛКИЛИРОВАНИЯ БЕНЗОЛА ПРОПИЛЕНОМ

**Кичатов К.Г., Просочкина Т.Р., Воробьева И.С.**

*г. Уфа, ФГБОУ ВО УГНТУ, e-mail: [agidel@ufanet.ru](mailto:agidel@ufanet.ru)*

Интеллектуальные технологии являются ключевыми в эпоху четвертой промышленной революции. Интеграция искусственного интеллекта практически во все области человеческой деятельности, в том числе в производство продуктов нефтегазохимии позволит в ближайшей перспективе оптимизировать производственные процессы, решить сложные задачи, связанные с работой в опасных условиях, сокращением рутинных повторяющихся операций, повышением производительности, ресурсо- и энергосбережения, качества выпускаемого продукта и снижением вредного воздействия на окружающую среду. Такие решения являются необходимыми для развития нефтегазохимической промышленности — передового сектора реальной экономики.

Цифровой двойник нефтегазохимического процесса это такая его виртуальная модель, которая позволяет с необходимой точностью воспроизводить его функционал и, что особенно важно, анализировать поточные данные и прогнозировать события со скоростью, превосходящей реакцию оператора или аппаратчика на произошедшее событие. Для создания модели химико-технологического процесса необходимо обеспечить воспроизведение работы сложной многопараметрической системы с привлечением необходимых вычислительных методов и соответствующего программного обеспечения. Для решения подобных задач, основанных на аналитических вычислениях и, по сути, воспроизводящих деятельность человеческого мозга, применяются нейронные сети.

Процесс алкилирования бензола пропиленом с образованием изопропилбензола является стадией получения целевых продуктов — фенола и ацетона. Первым этапом создания цифрового двойника является моделирование с применением данных, полученных с заводской установки. Для того, чтобы показать возможность разработки модели цифрового двойника процесса, несмотря на отсутствие данных с реального производства, нами была создана собственная исходная база данных, полученная путем моделирования технологической установки в ПО Unisim Design. Расчетная схема включает три блока — подготовки сырья, реакционный блок и систему разделения. Оборудование процесса: реактор, в котором протекают реакции алкилирования и трансалкилирования, две колонны — атмосферная для извлечения из реакционной массы бензола и вакуумная для разделения смеси изопропилбензола и диизопропилбензолов, сепаратор для отделения абгазов, шесть теплообменников, смеситель и насос. В качестве термодинамического пакета был выбран пакет Пенга-Робинсона, который хорошо описывает фазовые превращения в углеводородных системах, что необходимо учитывать при моделировании процесса алкилирования. Параметры процесса, определяющие входные массивы данных — температура, давление и соотношение реагентов, а выходной параметр — условная прибыль предприятия, полученная с установки алкилирования, учитывающая прибыль от продажи товарного изопропилбензола за вычетом затрат на теплоносители и электроэнергию.

Далее нами осуществлен выбор алгоритма нейронной сети и выполнен расчет коэффициентов передаточных функций с применением собственной программы, написанной на языке программирования Python. Выявлено, что при моделировании на основе однослойной нейронной сети среднеквадратичное отклонение равно 1,35, что является показателем «плохого обучения» нейронной сети. Для двухслойной сети среднеквадратичное отклонение слоев составляет 0.03 и 0.04 соответственно, что подтверждает корректность обучения. Оценка адекватности результатов моделирования проведена с использованием критерия MSE — среднеквадратичного отклонения прибыли от ее математического ожидания и составила 0,04. Таким образом, для создания цифрового двойника процесса алкилирования бензола пропиленом сформирована нейронная сеть, позволяющая определить экономически оптимальный технологического режим производства изопропилбензола.



## КИНЕТИКА ТЕРМИЧЕСКОГО ИНИЦИИРОВАНИЯ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ СТИРОЛА

**Комарова Е.В.**

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, e-mail: [ket87v@mail.ru](mailto:ket87v@mail.ru)*

С точки зрения механизма реакции полимеризации стирол относится к наиболее универсальным мономерам. Он способен вступать в реакции полимеризации под действием свободно-радикальных, анионных, катионных, координационно-ионных инициаторов, а также под действием различного рода излучений. В отличие от большинства мономеров, стирол легко полимеризуется спонтанно при нагревании по механизму так называемой термической полимеризации [1]. Стирол ограниченно растворим в воде. Однако, процесс иницирования полимеризации в водном растворе возможен даже в случае малорастворимого в воде мономера. Образующиеся при этом олигомерные радикалы дифильны, так как имеют полярную группу. Подобное изменение молекулярной природы радикала (переход от первичного к дифильному, олигомерному) приводит к тому, что он приобретает способность адсорбироваться на поверхности раздела вода-частица или внедряться в мицеллу эмульгатора и продолжать рост за счет солюбилизированного мономера [2]. При эмульсионной полимеризации мономера, частично растворимого в воде, реакция осуществляется и в растворе, и в мицеллах. При реакции в растворе образующийся полимер (или макрорадикал) выпадает в осадок. В выпадающих в осадок полимерных частицах может идти эмульсионная полимеризация. Источником образования полимерных частиц могут быть частички выпавшего полимера и мицеллы мономера. Таким образом, весь полимеризационный процесс в воде складывается из полимеризации в растворе, эмульсионной полимеризации с участием исходных мицелл мономера и эмульсионной полимеризации в частицах осадка полимера [3].

В ряде работ, исследующих кинетику термического иницирования полимеризации стирола, значения энергии активации и предэкспоненциального множителя достаточно сильно отличаются у разных авторов в пределах до нескольких порядков (табл. 1).

**Таблица 1** – Сравнение кинетических констант полимеризации стирола при термическом иницировании

Параметр				Среда	Температура, °С	Источник
E <sub>term</sub> , кДж/моль	k <sub>0term</sub>	E <sub>эфф</sub> , кДж/моль	k <sub>0эфф</sub>			
120.92	1.32·10 <sup>6</sup> л <sup>2</sup> ·моль <sup>-2</sup> ·с <sup>-1</sup>	87.95	6.9·10 <sup>5</sup> моль <sup>-3/2</sup> ·л <sup>3/2</sup> ·с <sup>-1</sup>	в углеводородном растворителе	60, 155, 176	[4]
114.81	2.19·10 <sup>5</sup> л <sup>2</sup> ·моль <sup>-2</sup> ·с <sup>-1</sup>	–	–	в массе	100-200	[5]
154.81	1.23·10 <sup>10</sup> л·моль <sup>-1</sup> ·с <sup>-1</sup>	96.23	10 <sup>6,8</sup> л·моль <sup>-1</sup> ·с <sup>-1</sup>	в массе	25	[6]
–	–	80.33	10 <sup>9,07</sup> л·моль <sup>-1</sup> ·с <sup>-1</sup>	в углеводородном растворителе	60	[7]
156.00	2.19·10 <sup>4</sup> л <sup>2</sup> ·моль <sup>-2</sup> ·с <sup>-1</sup>	–	–	в массе	выше 100	[8]
115.06	3.06·10 <sup>5</sup> л <sup>2</sup> ·моль <sup>-2</sup> ·с <sup>-1</sup>	–	–	в углеводородном растворителе	100-180	[9]
133.00	5.54·10 <sup>7</sup> л <sup>2</sup> ·моль <sup>-2</sup> ·с <sup>-1</sup>	–	–	в массе	45, 60, 75	[10]

Это объясняется возможной разницей аппаратного оформления эксперимента, его гидродинамикой, формой математической модели и иных факторов. Кроме того, большинство исследований проводились в среде различных органических растворителей,

порядок реакций в которых также сильно отличается от полимеризации чистого стирола в массе. Брайтенбах и Рудорфер, изучая полимеризацию в вакууме при 100 °С в массе, пришли к выводу, что реакция в массе имеет первый порядок относительно концентрации мономера, тогда как в разнообразных растворителях второй порядок. К аналогичным выводам пришли Зюсс и Шпринг, показав, что реакция имеет второй порядок, если раствор содержит менее 60 % стирола. Шульц и Хуземан обнаружили, что в широком интервале температур полимеризация имеет первый порядок в массе примерно до глубины превращения 60 %. Дальнейшие отклонения от первого порядка и ускорение реакции могут быть объяснены возникновением гелевого эффекта.

Этот процесс весьма слабо изучен, в литературе отсутствуют однозначные кинетические данные о спонтанной полимеризации стирола как в массе, так и при полимеризации в эмульсии и растворе, ввиду неостребованности данного процесса для целевого промышленного применения. В то же время при промышленном получении стирола методом дегидрирования этилбензола существует негативная проблема образования полимерных частиц за счет спонтанной термической полимеризации стирола в водном конденсате. Процесс дегидрирования этилбензола осуществляется в токе перегретого водяного пара, необходимого для снижения парциального давления сырьевой шихты. Образующийся в реакционной зоне контактный газ, состоящий из не прореагировавшего этилбензола и продуктов его дегидрирования, а также значительных количеств водяного пара, проходит стадии последовательного охлаждения и содержит остаточные концентрации стирола в растворенном виде, а также в виде мелкодисперсной эмульсии. При повышенных температурах стирол в конденсате полимеризуется за счет термического инициирования и на стадию очистки от остаточных углеводородов этот поток поступает уже с частицами полистирола, ограничивающими применение водного конденсата в качестве сырья для выработки вторичного водяного пара. Поэтому, изучение кинетических параметров термической полимеризации стирола позволит предотвратить процессы образования нежелательных полимерных отложений на поверхностях оборудования, увеличивая срок его службы.

## Литература

1. Малкин А.Я., Вольфсон С.А., Кулезнев В.И., Файдель Г.И. Полистирол. Физико-химические основы получения и переработки. – М.: Химия, 1975. – 288 с.
2. Елисеева В.И. Полимерные дисперсии. – М.: Химия, 1980. – 296 с.
3. Оудиан, Дж. Основы химии полимеров. – М: Мир, 1974. – 614 с.
4. Mayo F.R. Chain Transfer in the Polymerization of Styrene. VIII. Chain Transfer with Bromobenzene and Mechanism of Thermal Initiation // Journal of the American Chemical Society. – 1953. – Vol. 75 (24). – P. 6133.
5. Hui A.W., Hamielec A.E. Thermal polymerization of styrene at high conversions and temperatures. An experimental study // Journal of Applied Polymer Science. – 1972. – Vol. 16 (3). – P. 749.
6. Bamford C.H., Dewar M.J.S. Studies in polymerization. I. A method for determining the velocity constants in polymerization reactions and its application to styrene // Proceedings of the Royal Society of London A. – 1948. – Vol. 192(1030). – P. 309.
7. Бемфорд К., Барб У., Дженкинс А., Онъон П. Кинетика радикальной полимеризации виниловых соединений: пер.: Гриценко Т.М., Милютинской Р.И., Праведникова А.Н.; под ред. Ю.М. Малинского. – М.: Издательство иностранной литературы. – 1961. – 348 с.
8. Curteanu S. Modeling and simulation of free radical polymerization of styrene under semi-batch reactor conditions // Central European Journal of Chemistry. – 2003. – Vol. 1 (1). – P. 69.
9. Matthews B., Villa C., Pierini P. Model Development in Thermal Styrene Polymerization // Polymer Reaction Engineering – 9th International Workshop. – 2007. – Vol. 259 (1). – P. 94.
10. Шиян Д.А., Улитин Н.В., Терещенко К.А., Тахаутдинова А.В., Альметова Г.Ф., Колесов С.В. Теоретическое исследование кинетики полимеризации стирола в присутствии пероксида бензоила и ферроцена // Вестник Башкирского университета. – 2018. – Т. 23 (1). – С. 75.

## НАПРАВЛЕНИЯ ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ТЯЖЕЛОЙ СМОЛЫ ПИРОЛИЗА

**Комарова Е.В., Никитина А.П., Трапезникова Е.Ф., Ермаков В.Е.**

*Уфимский государственный нефтяной технический университет, e-mail: [ket87v@mail.ru](mailto:ket87v@mail.ru)*

В связи с увеличением мощностей установок пиролиза, а также ввиду утяжеления сырья, проблема рационального использования тяжелой смолы пиролиза (ТСП) становится все более актуальной [1].

Тяжелая смола – побочный жидкий продукт процесса пиролиза. В состав ТСП входят ароматические углеводороды  $C_{8+}$ , а также смолы и асфальтены, полученные в результате протекания реакций уплотнения и конденсации ароматических колец [2]. Содержание нафталина и метилнафталина составляет не менее 25 % масс [3,4].

На современных промышленных установках пиролиза тяжелая смола пиролиза не является целевым продуктом, она не имеет стабильного состава и физико-химических свойств. Ее характеристики меняются в зависимости от исходного сырья и технологического режима. Применение более тяжелого сырья способствует увеличению количества нафталина и его производных (более 25 % масс.) в ТСП [5].

Современные направления использования смолы пиролиза довольно обширны. В результате анализа современной научно-технической литературы можно выделить следующие основные направления ее использования [6-18]:

- производство битумов;
- производство пеков;
- производство нефтеполимерных смол;
- производство пластификаторов и ПАВ;
- производство кокса;
- производство нафталина;
- каталитический крекинг;
- каталитическая перегонка;
- производство реактивных топлив;
- пиролиз;
- комплексная переработка с получением смазочных масел, компонента реактивных топлив и антикоррозионных покрытий;
- комплексная переработка с получением нафталина и сырья для производства битумов.

Многообразие направлений использования и переработки смолы пиролиза не решают полностью проблему ее реализации. Известно, что тяжелая смола пиролиза имеет сложный химический состав, который в большинстве случаев невозможно идентифицировать доступными на производстве средствами. Смола пиролиза является побочным продуктом производства, а методы ее анализа являются высокочувствительными и не всегда целесообразными, поэтому она часто находит применение только как часть сырья различных процессов, таких как производство битумов, нефтеполимерных смол, кокса и пр. Кроме того, разнообразная сырьевая база процесса пиролиза существенно влияет на компонентный состав основных и побочных продуктов, а отсутствие данных о составе тяжелой смолы пиролиза не позволяет с высокой достоверностью определить целесообразное направление ее использования. При этом известно, что состав сырья процесса пиролиза не оказывает существенного влияния на содержание нафталина и его производных в ТСП, которые преобладают в ее составе. Таким образом, перспективно рассмотреть возможность получения нафталинового концентрата из ТСП, который можно использовать в качестве индивидуального компонента.

В результате анализа возможных направлений использования тяжелой смолы пиролиза, нами установлено, что наиболее перспективным направлением переработки тяжелой смолы пиролиза является выделение из нее индивидуальных ароматических

углеводородов, в частности нафталина путем фракционирования ТСП.

### Литература

1. Лебедева И.П., Лубинский М.И. Инновационные перспективы использования тяжелой смолы пиролиза // Успехи современного естествознания. – 2008. - № 6. – С. 79.
2. Хайрудинов И.Р. К вопросу об оптимизации процесса пиролиза углеводородного сырья и эффективного использования получаемых продуктов // Бутлеровские сообщения. – 2009. – Т.17 № 6. – С. 53.
3. Майер Э.А. Эффективная практика глубокой переработки газового сырья в химическую продукцию на предприятиях ОАО «СИБУР Холдинг» и используемые технологические процессы. – Томск: Издательский Дом Томского государственного университета, 2014. – 476 с.
4. Китонов Г.А., Дошлов О.И. Экологические проблемы с использованием тяжелой смолы пиролиза на ОАО «Ангарский завод полимеров» Новая наука: современное состояние и пути развития. – 2015. - № 6-3. – С. 172.
5. Садыгов Ф.М., Магеррамова З.Ю., Гаджиев Г.Н., Гейдарлы Н.И., Гасан-заде Г.Г., Мамедова И.Г., Садыгова Н.С. Сочетание технологического режима пиролиза и качественного состава тяжелой смолы // Азербайджанский химический журнал. – 2016. - № 4. – С. 60.
6. Иванова А.В., Гайсина А.Р., Евдокимова Н.Г. Технология производства дорожных битумов марок БНД с применением тяжелой смолы пиролиза // Форум молодых ученых. – 2020. - № 2. – С. 102.
7. Мухамедзянова А.А., Мухамедзянов А.Т., Гимаев Р.Н., Хайбуллин А.А. Получение анизотропных пеков из продуктов термообработки тяжелой смолы пиролиза углеводородного сырья // Журнал прикладной химии. – 2015. – Т. 88, № 8. – С. 1203.
8. Юсевич А.И., Трусков К.И., Шашок Ж.С., Усс Е.П., Перфильева С.А. Получение нефтеполимерной смолы с заданными свойствами из тяжелой смолы пиролиза // Труды БГТУ. – 2018. - № 1. – С. 147.
9. Патент РФ № 2145947. Способ получения пластификатора для бетонной смеси / Стрельчик Б.С., Смагин В.М., Саблукова И.В., Рыжиков В.Г., Шалимова Л.В, Коренькова С.Ф., Безгина Л.Н., Лысова О.В., Иващенко В.А., Бескровный В.И. // Б.И. – 1998.
10. Патент РФ № 2729191. Метод получения кокса нефтяного игольчатого / Кантюков Д.Т., Хаматшин Р.А. // Б.И. – 2020. - № 22.
11. Ibragimov K.D., Ibragimova Z.M., Kasumova G.F., Kasumova K.M., Rustamov M.I., Dzhafarova R.A., Aliyev V.M., Aliyeva N.M. Heavy pyrolysis resin – base raw material for preparation of naphthalene // Processes of petrochemistry and oil-refining. – 2016. – Vol. 17, № 1. – P. 28.
12. Стратиев Д.С., Шишкова В.К. Каталитический крекинг высокоароматических газойлей и пиролизной смолы // Нефтепереработка и нефтехимия. – 2010. - № 1. – С. 9.
13. Хромых П.Б., Бельков А.И. Повышение глубины переработки тяжелой смолы пиролиза в производстве этилена // Экология ЦЧО РФ. – 2012. - № 2. – С. 145.
14. Патент РФ № 2670449. Способ получения высокоплотного реактивного топлива (варианты) / Максимов А.Л., Самойлов В.О., Иванов С.В., Онищенко М.И., Петрухина Н.Н. // Б.И. – 2018. - № 30.
15. Ахмедова Н.Ф., Мамедов С.Э. Комплексная переработка тяжелой смолы пиролиза // Advancedincurrentnaturalosciences. – 2011. - № 7. – С. 74.
16. Patent US № 7815791. Process and apparatus for using steam cracked tar as steam cracker feed / Keusenkothen P.F. – 2009.
17. Ахметов А.Ф., Ахметов А.В., Шайжанов Н.С., Загидуллин Ш.Г. Гидропереработка остаточных фракций процесса пиролиза // Башкирский химический журнал. – 2017. – Т. 24, № 2. – С. 29.
18. Ибрагимов Х.Д., Исмагилов Э.Г., Мартынова Г.С., Бекташи Н.Р., Ибрагимова З.М., Рустамов М.И. Получение компонента реактивного топлива и ускорителя окисления гудрона каталитической переработкой тяжелой смолы пиролиза // Журнал прикладной химии. – 2010. – Т. 83, № 7. – С. 1159.

## СИНТЕТИКАЛЫҚ ГЕМОСТИМУЛЯТОРЛАРДЫ ІЗДЕУ

Кошетова Ж.А.<sup>а,б</sup>, Ю В.К.<sup>а</sup>, Пірәлиев Қ.Д.<sup>а</sup>, Малмакова А.Е.<sup>а</sup>, Жуманова Н.А.<sup>б</sup>,  
Бактыбаева Л.К.<sup>в</sup>, Даулет Г.<sup>в</sup>

<sup>а</sup> Алматы қ., «Ә.Б. Бектұров атындағы химия ғылымдары институты» АҚ

<sup>б</sup> Алматы қ., Қазақ ұлттық қыздар педагогикалық университеті

<sup>в</sup> Алматы қ., аль-Фараби атындағы Қазақ Ұлттық Университеті

e-mail: [zhanar.kozhetova@gmail.com](mailto:zhanar.kozhetova@gmail.com)

Коронавирустық инфекция бүкіл ғаламшардың және әр адамның өмірін өзгертті. COVID-19 екі жақты пневмония мен жедел респираторлық жеткіліксіздіктің дамуымен қауіпті. Иммундық аурулар мен иммундық жүйенің жағдайына байланысты ауруларды - инфекциялық және онкологиялық ауруларды емдеуге арналған дәрілерді іздеу қажеттілігі өте өзекті [1,2].

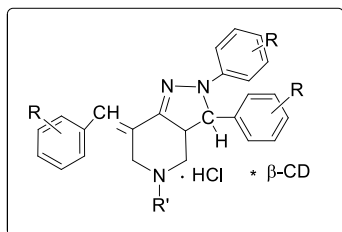
Сонымен қатар, оттегінің аштыққа, улануларға және кейбір инфекцияларға төзімділігін арттыратын диазол молекуласы біздің назарымызды аударды. Диазол вирустар немесе басқа респираторлық инфекциялар болған кезде өзінің интерферонының өндірісін белсендіреді, сонымен қатар вакцинациядан кейін антиденелердің өндірілуін ынталандырады.

Біз N-алкоксиалкилпиперидиннің қалдықтары бар дайындалған түрде алынған пиазин-пиперидин молекуласы екі азоты бар бес мүшелі сақинаның болуымен дибазолға өте жақын деп есептедік.

Синтез Клейзен-Шмидт реакциясы арқылы жүргізілді. N-алкоксиалкилпиперидин-4-олар  $\alpha, \beta$ -қанықпаған туындыларға айналды, содан кейін соңғы фенилгидразинмен циклизацияланды

Ақ егеуқұйрықтарда метилурацилмен салыстырғанда гемостимуляциялық зерттеулер жүргізілді. Қан анализі «Abacus junior veteriner» зертханалық жануарларға арналған анализаторда жүргізілді.

Диенондар (40,7-71,36%) шығымы түзілді. Пиазин-пиперидин (74,2%) көрсетті.



Диенондардың ИҚ спектрлерінде 1601,2 -1616,4  $\text{cm}^{-1}$  кезінде C=O жолақтары, сондай-ақ конъюгацияланған C=C (1444,1-1514,9  $\text{cm}^{-1}$ ) байланыстары анықталды. C-N диапазоны 1109-1105,9  $\text{cm}^{-1}$  кезінде байқалады. 1209,2-1232,8  $\text{cm}^{-1}$  кезінде жұтылу C-F байланысына жатады. ЯМР  $^{13}\text{C}$  спектрінде C = O көміртегі сигналы 186-188 ppm (1) кезінде байқалады, ал имин көміртегі 154-155 ppm (2) кезінде резонанс тудырады. F-ге іргелес көміртегі сигналы 161-164 ppm кезінде дублет болып табылады.

Пиазин-пиперидиндердің  $\beta$ -циклодекстриндік кешендері лейкопоздді, эритропоздді және тромбоцитопоздді ынталандыра отырып, метилурацилдің әсеріне үлкен немесе тең белсенділік көрсетті. Жедел уыттылығы 250-ден 500 мг/кг-ға дейін.

Гемопоздді ынталандыратын міндетті N-алкоксиалкилпиперидинді фторы бар жаңа триазабициклді құрылымдар синтезделді.

### Әдебиеттер

1. Diwanay S., Gautam M., Patwardhan B. Cytoprotection and immynomodulation in cancer therapy // Curr. Med. Chem. Anticancer. – 2004. – Vol. 4, № 6. – P. 479–490.
2. Fonina L.A., Treshchalina E.M., Belevskaia R.G., Az'muko A.A., Efremov M.A., Sedakova L.A., Kirilina E.A. Synthesis and anti-tumor properties of myelopeptide MP-1//Bioorg Khim. - 2012 - 38(4). P. 406-412.

Зерттеуді ҚР БҒМ қолдады AR 08856051 гранты

## СИНТЕЗ НОВЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ОКСАНА

Кузьмина А.А.<sup>а</sup>, Цукерман М.В.<sup>а</sup>, Асылханов Ж.С.<sup>а,б</sup>, Калугин С.Н.<sup>а</sup>, Ержанов К.Б.<sup>б</sup>,  
Абилов Ж.А.<sup>а</sup>

<sup>а</sup> г. Алматы, Казахский национальный университет им. аль-Фараби

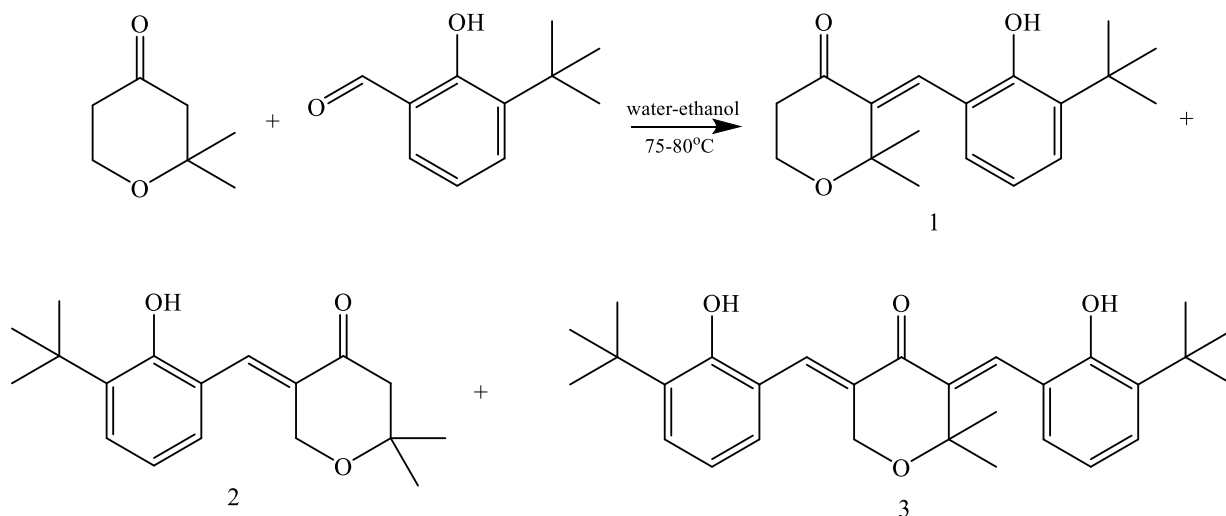
<sup>б</sup> г. Алматы, АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова»,  
e-mail: [akuzmina539@gmail.com](mailto:akuzmina539@gmail.com)

Производные тетрагидропирана проявляют широкий спектр биологической и поверхностной активности, благодаря чему находят широкое применение в различных отраслях народного хозяйства и медицине<sup>1</sup>. В связи с этим получение новых производных тетрагидропиранонов и изучение их свойств представляет большой практический и теоретический интерес.

Одним из перспективных направлений получения производных оксанов, потенциально обладающих биологической активностью, является синтез их ацетиленовых, триазольных и бензилиденовых производных.

С этой целью было осуществлено взаимодействие 2,2-диметилтетрагидропиран-4-она с 3-третбутилсалициловым альдегидом. Реакция была проведена в водно-этанольной среде при температуре 75-80°C в течение 12 часов, с последующим разделением полученных соединений перегонкой под вакуумом.

В результате были получены 3-(3-третбутил-2-гидроксибензилиден)-2,2-диметилтетрагидропиран-4-он (1) с выходом 58%, 5-(3-третбутил-2-гидроксибензилиден)-2,2-диметилтетрагидропиран-4-он (2) с выходом 23% и 3,5-ди(3-третбутил-2-гидроксибензилиден)-2,2-диметилтетрагидропиран-4-он (3) с выходом 8%.



Строение полученных соединений было доказано с помощью ЯМР-спектроскопии. Спектры ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C снимали в хлороформе-D на спектрометре JNM-ECA 400 (Jeol) с рабочими частотами 400 (1H), 100 МГц (13C).

Так для 3-(3-третбутил-2-гидроксибензилиден)-2,2-диметилтетрагидропиран-4-она (1) в спектре наблюдаются следующие резонансные колебания:

<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, Chloroform-d) δ 11.73 (d, J = 1.8 Hz, OH), 9.82 (d, J = 1.8 Hz, OH), 3.95 (td, J = 6.1, 1.8 Hz, 2H), 2.37 (td, J = 6.1, 3.2 Hz, 2H), 2.32 (d, J = 2.0 Hz, 2H), 1.90 (dt, J = 6.9, 1.8 Hz, OH), 1.34 (dd, J = 14.5, 1.9 Hz, 1H), 1.22 (d, J = 1.9 Hz, 6H).

<sup>13</sup>C NMR (101 MHz, Chloroform-d) δ 207.79, 100.63, 100.11, 100.03, 99.37, 99.32, 98.49, 75.87, 61.25, 60.93, 53.70, 41.78, 41.72, 41.66, 27.14, 27.08.

Для 5-(3-третбутил-2-гидроксибензилиден)-2,2-диметилтетрагидропиран-4-она (2) в спектре наблюдаются следующие резонансные колебания:

<sup>1</sup>H NMR (400 MHz, Chloroform-d) δ 11.73 (d, J = 1.8 Hz, OH), 9.82 (d, J = 1.8 Hz, OH),

3.95 (td,  $J = 6.1, 1.8$  Hz, 2H), 2.37 (td,  $J = 6.1, 3.2$  Hz, 2H), 2.32 (d,  $J = 2.0$  Hz, 2H), 1.90 (dt,  $J = 6.9, 1.8$  Hz, 0H), 1.32 (d,  $J = 1.8$  Hz, 0H), 1.22 (d,  $J = 1.9$  Hz, 6H), 1.06 (d,  $J = 1.8$  Hz, 0H).

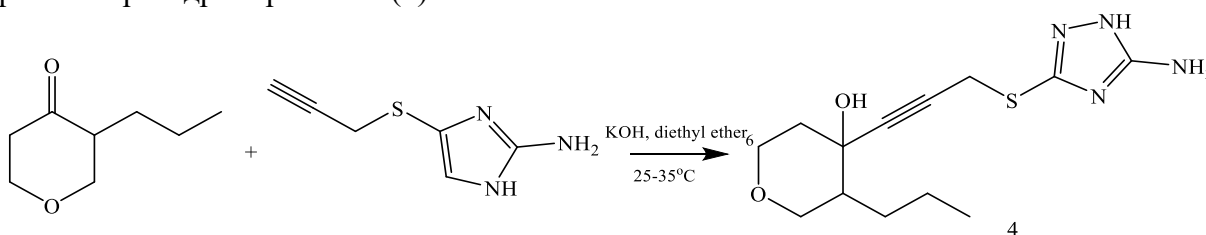
$^{13}\text{C}$  NMR (101 MHz, Chloroform-d)  $\delta$  207.79, 100.63, 100.11, 100.03, 99.37, 98.49, 75.87, 61.25, 61.09, 60.93, 53.79, 53.75, 53.70, 41.78, 41.72, 41.66, 27.14, 27.08.

Для 3,5-ди(3-третбутил-2-гидроксibenзилиден)-2,2-диметилтетрагидропиран-4-она (3) в спектре наблюдаются следующие резонансные колебания:

$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>)  $\delta$  7.75 (dd,  $J = 5.7, 1.8$  Hz, 0H), 3.84 (td,  $J = 6.2, 1.8$  Hz, 41H), 3.30 (d,  $J = 1.7$  Hz, 20H), 2.37 – 2.18 (m, 79H), 1.90 – 1.75 (m, 4H), 1.12 (s, 155H).

$^{13}\text{C}$  NMR (101 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>)  $\delta$  207.90, 194.35, 157.58, 156.17, 133.33, 133.10, 103.22, 100.07 – 99.78 (m), 99.52, 99.23, 99.04, 97.72, 75.68, 75.30, 63.47, 60.83, 61.04 – 60.49 (m), 60.65, 53.47, 41.59, 34.92, 29.55, 27.57 – 27.07 (m), 14.36.

Также было осуществлено взаимодействие 3-алкилтетрагидропиран-4-она с 5-амино-3-(пропин-3-ил)тио-1,2,4-триазолом. Реакция проводилась в среде диэтилового эфира в присутствии пятикратного избытка едкого калия при температуре 25-35°C в течение 6 часов. В результате был получен 4-(3-((5-амино-1,2,4-триазол-3-ил)тио)проп-1-ин-1-ил)-3-пропилтетрагидропиран-4-ол (4).



Строение полученного соединения было доказано с помощью ИК- и ЯМР-спектроскопии. Спектры ИК снимались на ИК-спектрометре Nicolet 5700, спектры ЯМР  $^1\text{H}$  и  $^{13}\text{C}$  снимали в ДМСО-D на спектрометре JNM-ECA 400 (Jeol) с рабочими частотами 400 (1H), 100 МГц (13C).

В ИК спектре 4-(3-((5-амино-1,2,4-триазол-3-ил)тио)проп-1-ин-1-ил)-3-пропилтетрагидропиран-4-ола (4) наблюдаются полосы поглощения при 3621  $\text{cm}^{-1}$  характерная для гидроксильной группы, 3310 и 3172  $\text{cm}^{-1}$  характерные для моно- и дизамещенных аминогрупп, 2952, 2917, 2853  $\text{cm}^{-1}$  соотносящиеся с валентными колебаниями метильной, метиленовой и метинной группами, 2278  $\text{cm}^{-1}$  характерная ацетиленовой С-С связи, 1130  $\text{cm}^{-1}$  отвечающая валентным колебаниям С-О-С связи, а также 670  $\text{cm}^{-1}$ , характерная для валентных колебаний дизамещенной тиогруппы С-S-С.

В ЯМР спектре 4-(3-((5-амино-1,2,4-триазол-3-ил)тио)проп-1-ин-1-ил)-3-пропилтетрагидропиран-4-ола (4) наблюдаются резонансные колебания:

$^1\text{H}$  NMR (400 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>)  $\delta$  11.75 – 11.70 (m, 1H), 9.82 (d,  $J = 1.7$  Hz, 1H), 7.24 (d,  $J = 1.7$  Hz, 1H), 6.89 (td,  $J = 7.7, 1.7$  Hz, 1H), 3.95 (td,  $J = 6.1, 1.6$  Hz, 25H), 2.36 (t,  $J = 6.0$  Hz, 20H), 2.32 (s, 18H), 1.43 (d,  $J = 1.9$  Hz, 0H), 1.36 (d,  $J = 1.7$  Hz, 8H), 1.32 (d,  $J = 1.7$  Hz, 3H), 1.22 (d,  $J = 1.7$  Hz, 66H), -0.06 (d,  $J = 1.8$  Hz, 0H).

$^{13}\text{C}$  NMR (101 MHz, DMSO-d<sub>6</sub>)  $\delta$  197.60, 168.93, 154.66, 129.50, 103.71, 101.07, 100.07 – 99.91 (m), 98.10, 97.51, 52.61, 44.00, 39.97 (dp,  $J = 42.2, 21.3$  Hz), 12.59.

## Литература

1. Калугин С.Н. Биологически- и поверхностно-активные соединения тетрагидропирана и пиперидина. Алматы: Қазақ университеті, 2020. – 176 с.



## ҚЫШҚЫЛ ЖӘНЕ ХИТОЗАНМОДИФИЦИРЛЕНГЕН СОРБЕНТТЕРДІҢ СОРБЦИЯЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІ

**Қайыңбаева Р.А., Қожабекова Н.Н., Сұлтанбаева Г.Ш., Ағатаева А.А.,  
Чернякова Р.М., Жүсіпбеков Ө.Ж.**

*Алматы қ., «Ә.Б. Бектұров атындағы химия ғылымдары институты» АҚ,  
e-mail: [raushan\\_1972@mail.ru](mailto:raushan_1972@mail.ru)*

Қышқылдық және сілтілік ортаны, суды және басқа заттарды тазарту мәселесі негізінен арзан көпфункционалды және перспективалы сорбенттердің болмауымен шектеледі. Ауыр металл катиондарынан ластанған ортаны тазартудың тиімді әдістерінің бірі – табиғи алюмосиликаттарды, атап айтқанда цеолиттерді қолдану арқылы сорбция әдісі.

Табиғи цеолиттер алмасу қабілеті бойынша синтетикалық алюмосиликаттардан төмен, бұл олардың қолданылуын шектеуге әкеледі. Табиғи цеолиттердің сорбциялық қабілеттілігінің жоғарылауына олардың модификациясы арқылы қол жеткізіледі. Цеолитті тұз қышқылымен модификациялағаннан кейін цеолиттің алмастырылатын катиондары жойылады және бос орындарды сутегі иондары алады, нәтижесінде каналдың шығатын терезелерінің өлшемдері мен арналардың пішіні өзгереді. Бұл микропоралардың тиімді мөлшерінің ұлғаюына және цеолиттің алмасу қабілетінің артуына әкеледі [1].

Табиғи цеолиттің қышқыл бетін хитозанмен модификациялау (жабу) беттің қосарлы сипаты бар органоминералды сорбент шығаруға әкеледі және осылайша бастапқы цеолит бойынша сорбция дәрежесінен айтарлықтай асып түседі [2]. Нәтижесінде модификацияланған цеолит пен модификатордың оң қасиеттерін біріктіреді деп күтуге болады.

Шанканай кен орнынан алынған цеолит модификацияланған сорбенттерді алу үшін пайдаланылды. Модификатор ретінде біз 15% тұз қышқылын (HCl) және химиялық таза сортты хитозанды қолдандық. - талшықты және қабықшалы түзілу, ион алмасу және комплекс қабілеті бар табиғи шығу тегі биополимері.

Табиғи цеолиттің қышқыл модификациясы 1: 5 -ке тең «цеолит: HCl» қатынасында 1 сағат бойы бөлме температурасында араластырып, үлгіні 30 ° C температурада тұрақты салмаққа дейін кептірумен (1 сағат) жүргізілді.

Шанканай кен орнының цеолитін хитозанмен модификациялау әдісі бойынша жүргізілді [3].

Үлгілердің IR спектрлері Perkin Elmer Spectrum 100 FT-IR спектрометрінде, АҚШ-та алынды. Үлгілердің ИҚ спектрін түсіндіру мен сәйкестендіру [4] сәйкес жүргізілді.

Алынған үлгілердің микроқұрылымы JXA-8230 электронды зонд микроанализаторында зерттелді (JEOL, Жапония) [5].

Сорбенттердің сорбциялық сипаттамалары: кеуектің жалпы көлемі V, жалпы кеуектілігі, йодтың жалпы сорбциялық сыйымдылығы, статикалық алмасу қабілетін анықтау әдістерге сәйкес жүргізілді [6].

Адсорбциялық белсенділікті анықтау метилен көк (МК) көмегімен жүргізілді [7].

Алынған сорбенттердің сорбциялық қасиеттеріне кептіру температурасының әсері бойынша жүргізілген зерттеу нәтижелері қышқылдық модификацияланған цеолиттің 25°C жоғары кептіру температурасының жоғарылауы оның барлық сорбциялық сипаттамаларын нашарлататынын анықтады. Оңтайлы температурада (25°C) сорбент катиондық және аниондық алмастырғыштар үшін сорбциялық сыйымдылықтың ұқсас мәндері бар катионды да, анионды да қасиеттерін көрсетеді және МК үшін адсорбциялық қабілеттілігімен сипатталады (кесте).

25°C-та кептірілген хитозан-модифицирленген цеолитте катион алмастырғыштың сорбциялық алмасу қабілеті анионалмасу сорбциялық сыйымдылығынан 1,89 есе жоғары (кесте). Сорбенттің кептіру температурасының 70°C дейін жоғарылауы анион алмасу

қасиеттерінің жоғарылауына әкеледі. Хитозан-модифицирленген цеолитінің анион алмастырғышқа қатысты көрсетілген температурада сорбциялық сыйымдылығы оның катион алмастырғышқа қатысты сорбциялық сыйымдылығынан 1,43 есе жоғары. Бұл жағдайда жалпы алмасу сыйымдылығы 25°C -та кептірілген үлгіге қарағанда 2 есе артады.

Алынған нәтижелерге сүйене отырып, қышқылмен модификацияланған цеолит 25°C температурада алынуы керек. Хитозанмен модификацияланған үлгіге келетін болсақ, жақсы сорбциялық қасиеті бар сорбентті 25 және 70°C температурада алуға болады. Сонымен қатар, хитозанмен модификацияланған және 25°C -та кептірілген үлгіде катион алмасу қасиеттері басым, ал анион алмасу қасиеттері 70°C басым (кесте).

**Кесте – Оңтайлы үлгілердің сорбциялық қасиеттері**

Модификатор	Кептіру, Т°С	Кеуектердің жиынтық көлемі, г/см <sup>3</sup>	Жеке алмасу сыйымдылығы, мг-экв/г	катиониттің ЖАС, мг-экв/г	аниониттің ЖАС, мг-экв/г	МК бойынша сору қабілеттілігі, мг/г
НСІ (15%)	25	1.686	75.97	57.22	52.34	173.30
Сіркеқышқылды хитозан (3,5%)	25	2.184	61.81	68.05	36.28	161.05
	70	2.955	121.77	49.07	70.16	166.90

Қышқыл модификацияланған және хитозанмодифицирленген цеолиттердің сорбциялық сипаттамаларын салыстыру көрсеткендей, хитозанмен модификацияланған және 25 және 70°C-та кептірілген цеолитте кеуектің жалпы көлемі қышқылмен модификацияланған сорбентпен салыстырғанда тиісінше 0,5 және 1,269 г/см<sup>3</sup> жоғары болады. 25°C температурада өңделген хитозанмен модификацияланған цеолиттің жалпы алмасу қабілеті 1,22 есе аз, ал 70°C-та қышқылмен өзгертілген цеолитке қарағанда 1,6 есе жоғары. 25°C және 70°C температурада құрғатылған хитозанмен модификацияланған цеолит катион алмастырғышының сорбциялық сыйымдылығы қышқылмен өзгертілген цеолитке қарағанда 10,83 мг-экв/г артық және 8,15 мг-экв/г кем. Бұл кезде хитозанмен модификацияланған және 25 ° С-та кептірілген цеолиттің анион алмасу қабілеті керісінше 16,06 мг-экв / г аз, ал 70 ° С-та кептірілген хитозанмен модификацияланған цеолит 17,82 мг-экв/ г қышқыл-модифицирленген цеолитпен салыстырғанда жоғары. Хитозанмен модификацияланған цеолит МК үшін адсорбциялық қабілеті қышқылмен модификацияланған үлгіге жақын. Бұл жағдайда хитозанмен модификацияланған цеолиттің термиялық өңдеу температурасының жоғарылауымен қышқылдық модификацияланған үлгінің адсорбциялық қабілеті артады және жақындайды.

Алынған нәтижелерге сүйене отырып, Шанканай цеолитінің хитозанмен модификациясы оның термиялық өңдеу температурасына байланысты сорбциялық сипаттамалары жоғары сорбенттерді алуға мүмкіндік береді. Сонымен қатар, хитозан-модифицирленген цеолиттің кептіру температурасын таңдау арқылы сорбенттің катионды немесе анионды алмасу қасиеттерін жақсартуға болады. Бұл тазартылатын ортаға қойылатын талаптарға байланысты хитозан-модифицирленген цеолитті катион немесе анионалмастырғыш ретінде пайдалануға мүмкіндік береді.

Модификацияланған сорбенттерге физико-химиялық талдау жүргізілді. Тұз қышқылымен модификацияланған цеолиттің ИҚ спектрінде негізгі өзгерістер судың валеттік және деформациялық тербелістер диапазонында болатыны анықталды, бұл алюминиймен байланысқан сорбентте Н<sup>+</sup> және ОН топтарының қышқылдық орталықтарының АІЗ(ОН) тетраэдрінде қосымша түзілуін көрсетеді. Судың деформациялық тербелісінің интенсивтілігінің жоғарылауы цеолит пен қышқыл протондарының кальций мен алюминий катиондары арасындағы алмасу реакциясы есебінен қосымша О - Н байланыстарының пайда болуымен байланысты. Бұл алюминийдің тетракоординирленген позициядан айырбастау позициясына шығуына байланысты жаңа Si-O-Si алмасу пайда болуына байланысты. Оның ИҚ спектріндегі анықталған өзгерістер

тұз қышқылының әсерінен тетраэдрдегі Al-O-байланыстарының алюминийдің ерітіндіге ауысуымен үзілуіне және цеолитте аморфты силикат фазасының пайда болуына байланысты. Мүмкін, дәл осы процестер қышқыл-модифицирленген цеолиттің іс жүзінде бірдей катиондық және аниондық алмасу мүмкіндіктерін анықтайды.

Хитозанмен модификацияланған цеолиттер спектрінде OH- және NH-байланыстарының  $\nu$  діріліне жататын 3436,8... 3438,9 см<sup>-1</sup> аймағында кең сіңіру жолағы бар. Максимумы 1642,7 және 1634,3 см<sup>-1</sup> жиіліктер NH<sub>3</sub><sup>+</sup> тобының антисимметриялы тербелістеріне жатады [8]. Бұл цеолит тетраэдрінің Si (Al) -O байланыстары мен хитозан молекуласы омыртқасының C-O, C-N, C-C байланыстарының тетраэдрлік созылу тербелістерінің суперпозициясымен байланысты болса керек [9]. Хитозанмен модификацияланған цеолиттердің ИҚ спектрлеріндегі анықталған өзгерістер хитозанның цеолит бетімен қиылысуын растайды. Әр түрлі температурада кептірілген сорбенттер спектрлерінің табылған айырмашылығы олардың сорбциялық сипаттамалардағы айырмашылығын растайды.

Электронды микроскопиялық талдау қышқылмодификацияланған цеолит құрылымында кеуектердің, каналдар мен қуыстардың саны мен көлемі ұлғаятынын көрсетті. Бұл сорбциялық процестерде көптеген бос және белсенді орталықтардың түзілуіне ықпал етеді және нәтижесінде қышқылмен модифицирленген цеолиттің адсорбция, катион және анион алмасу қабілетінің жоғарылауына ықпал етеді.

Цеолитті хитозанмен модификациялағаннан кейін сорбент бетінің морфологиясы да өзгереді және беті дамыған ерікті пішінді бөлшектерді көрсетеді, оларда жарықтар мен жарықтар бар. Хитозан -модифицирленген цеолиттің дамыған микропорлы құрылымы, шамасы, оны модификатор - хитозанда бар функционалды гидроксилмен және амин топтарымен (C<sub>6</sub>H<sub>11</sub>O<sub>4</sub>N) толтырудың арқасында пайда болады. Мұндай өзгерістер хитозанмен модификацияланған цеолиттің сорбциялық сыйымдылығының артуына үлкен үлес қосады.

Осылайша, Шанканай цеолитін тұз қышқылымен модификациялау кезінде сорбциялық процестерде бос және белсенді орталықтардың пайда болуына ықпал ететін бос орындар мен арналардың мөлшері ұлғаятыны анықталды, нәтижесінде қышқылдың сорбциялық сыйымдылығы. -өңделген цеолит көбейеді. Хитозанмен модификациялау процесінде табиғи цеолиттің беті онымен өзгертілетіні (тігілу) көрсетілді. Нәтижесінде хитозанмен модификацияланған цеолиттің кеуектілігі өзгереді және оның сорбциялық сипаттамасы табиғи цеолитпен салыстырғанда жақсарады.

## Әдебиеттер

1. Брек Д. Цеолитовые молекулярные сита. – Москва: Мир, 1976. - 37 с.
2. Накамото К. Инфракрасные спектры неорганических и координационных соединений.: М.:Наука, 1966. 411с.
3. Liu Y. L., Hsu C. Y., Su Y. H., et al. // *Biomacromolecules*. 2005. V.6. # 1. P.368.
4. Сильверстейн Р., Басслер Г., Меррил Т. Спектрометрическая идентификация органических соединений. М.: Наука, 1977. 308 с.
5. Рид С. Дж.Б. Электронно-зондовый микроанализ и растровая электронная микроскопия в геологии. М.: Техносфера, 2008. 232 с.
6. Gouldstein J., Newbury D., Echlin P., et al. Scanning electron microscopy and X-ray microanalysis: in 2 books. Moscow: Mir, 1984.145 p.
7. ГОСТ 4453-74. Уголь активный осветляющий древесный порошкообразный. Технические условия. М.: Из-во стандартов. 1993. 21с
8. Yurchenko E.N., Kustova G.N. and other Vibrational spectra of inorganic compounds. Novosibirsk: Nauka, 1981, 140 p.
9. Bellamy L. Infrared spectra of complex molecules. Moscow: IL, 1963.593 p.

## β-ЦИКЛОДЕКСТРИНОВЫЕ КОМПЛЕКСЫ ДИАЛКИЛ[(3-(1*H*-ИМИДАЗОЛ-1-ИЛ)ПРОПИЛАМИНО)(3-ФТОРФЕНИЛ)МЕТИЛ]ФОСФОНАТОВ КАК СТИМУЛЯТОРЫ РОСТА ПШЕНИЦЫ

Қалдыбаева А.Б.<sup>а,б</sup>, Малмакова А.Е.<sup>а</sup>, Токсеитова А.Д.<sup>а</sup>,  
Ю В.К.<sup>а</sup>, Пралиев К.Д.<sup>а</sup>, Ли Т.<sup>в</sup>

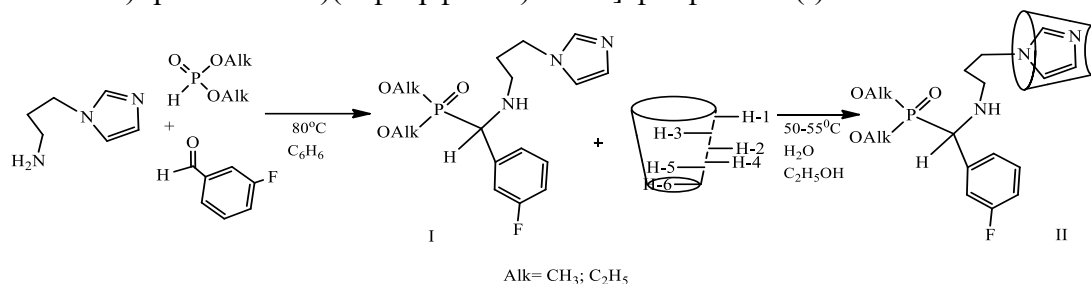
<sup>а</sup> г. Алматы, АО «Институт химических наук им А.Б. Бектурова»

<sup>б</sup> г. Алматы, Казахский национальный женский педагогический университет

<sup>в</sup> г. Алматы, Институт биологии и биотехнологии растений

e-mail: [altin\\_28.94@mail.ru](mailto:altin_28.94@mail.ru)

α-Аминофосфонаты, содержащие атом фтора и фосфонатную группу с имидазолопропильным фрагментом, представляют собой тип соединений с широким спектром фармацевтического действия. Среди изученных нами аминофосфонатов выявлены высокоэффективные препараты с местноанестезирующим [1], анальгетическим [2] и ростстимулирующим [3] свойствами. В настоящей работе взаимодействием 3-(1*H*-имидазол-1-ил)пропиламина с 3-фторальдегидом и диалкилфосфитом в условиях однореакторной трехкомпонентной классической реакции Кабачника-Филдса в бензоле при 80°C с использованием насадки Дина-Старка получены целевые диалкил[(3-(1*H*-имидазол-1-ил)пропиламино)(3-фторфенил)метил] фосфонаты (I).



Синтезированные аминофосфонаты представляют собой вязкое маслообразное вещество, для исследования биологической активности получены комплексы аминофосфонатов с β-циклодекстрином (II) взаимодействием аминофосфонатов (I) с эквимолярным количеством β-циклодекстрина.

Исследования проводились на модельных образцах яровой пшеницы *Triticum aestivum* сортов «Северянка», «Мирас» и «Казахстанская-10» из коллекции Института биологии и биотехнологии растений. Отмечено, что предпосевная обработка семян САВ-23 стимулировала рост растений сорта Мирас на 21,3%, а длину корня до 1,08 раза; у сорта «Казахстанская-10» предпосевная обработка семян САВ-21 повышала длину корня до 1,06 раза.

### Литература

1. Ю В.К., Малмакова А.Е., Даулетбай П., Пралиев К.Д., Жумакова С.С., Амиркулова М.К., Сатбаева Э.М., Кадырова Д.М. Новые фосфоорганические соединения как потенциальные анестетики Химический журнал Казахстана. – 2019 (1). – с. 76-84
2. Kystaubeva N., Begimova G., Zharkynbek T., Rakhmatulina R., Praliyev K., Iskakova T., Zazybin A., Yu V. Novel α-Aminophosphonates as Candidates for Multi-Purpose Drugs //3rd Russian Conference on Medicinal Chemistry- Kazan. – Sept. 28 to Oct. 03, 2017. – p.238.
3. Патент на полезную модель (№4783) №2019/0647.2 от 18 июля 2019 г. Комплекс диэтил[(3-(1*H*-имидазол-1-ил)пропиламино)(2-фторфенил)метил]фосфоната с β-циклодекстрином обладающий ростстимулирующей активностью. Пралиев К.Д., Ю В.К., Малмакова А.Е., Қалдыбаева А.Б., Токсеитова А.Д., Ли Т.

Исследования выполнены при финансовой поддержке КН МОН РК, ПЦФ ВР10965255

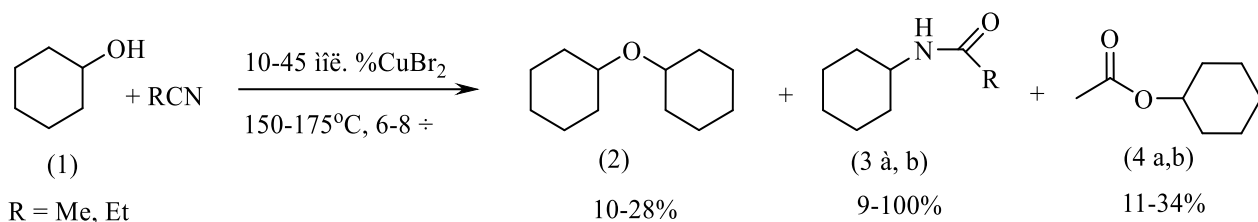
## РЕАКЦИЯ ЦИКЛОГЕКСАНОЛА С ОРГАНИЧЕСКИМИ НИТРИЛАМИ В ПРИСУТСТВИИ $\text{CuBr}_2$

Лутфуллина А.Р., Байгузина А.Р.

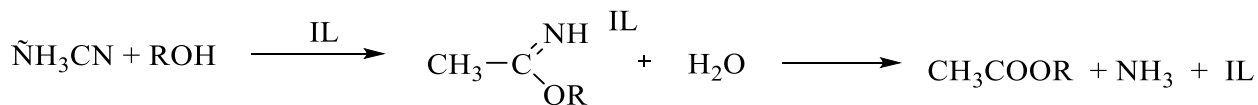
г. Уфа, Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, e-mail: [alsusha13.11@inbox.ru](mailto:alsusha13.11@inbox.ru)

Нами исследована реакция циклогексанола с доступными нитрилами ( $\text{MeCN}$ ,  $\text{EtCN}$ ,  $\text{PhCN}$ ,  $\text{O-MeC}_6\text{H}_4\text{CN}$ ) в присутствии медьсодержащего катализатора  $\text{CuBr}_2$ . Реакцию проводили в автоклаве при  $150\text{-}175^\circ\text{C}$  за 6 ч.

Реакция циклогексанола с ацетонитрилом и пропионитрилом ( $\text{MeCN}$ ,  $\text{EtCN}$ ) в присутствии  $\text{CuBr}_2$  протекает в трех направлениях: давая дициклогексильный эфир (2), амиды (3 а, б) и циклогексилацетат (4а) и циклогексилпропионат (4 б).

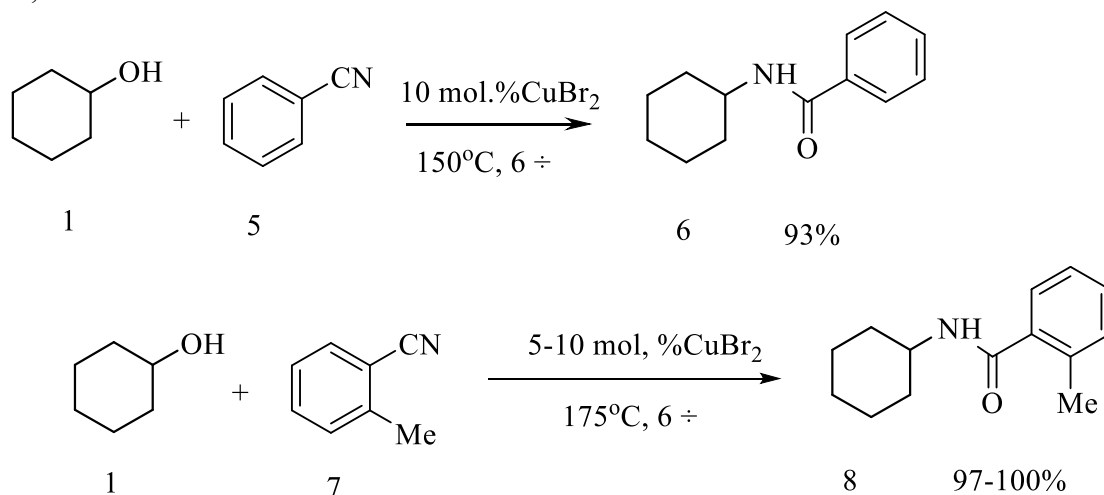


Очевидно, что дициклогексильный эфир образуется межмолекулярной дегидратацией циклогексанола под действием катализатора [1, 2], N-амиды (3а,б) – по реакции Риттера [3, 4]. Циклогексильные эфиры уксусной (4а) и пропионовой кислот (4б) образуются по реакции ацетонитрила спиртами по схеме, приведенной в работе [5].



При следующем мольном соотношении катализатора и реагентов: [катализатор]:[циклогексанол]:[RCN]=45-50:100:100 N-циклогексиламиды (4а, б) были получены с количественным выходом.

Реакции бензонитрила (5) и о-толилнитрила (7) с циклогексанолом проходят только в одном направлении, приводя к образованию амидов (6, 8). Так, при мольном соотношении катализатора и реагентов: [катализатор]:[циклогексанол]:[ArCN]=10:100:100 были получены N-циклогексилбензамид (6) и N-циклогексил-орто-толиламид (8) с выходами 93 и 100%, соответственно.



*Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки № АААА-А19-119022290009-3. Структурные исследования проведены в Региональном Центре коллективного пользования «Агидель» УФИЦ РАН, Отделение – Институт нефтехимии и катализа УФИЦ РАН, в рамках госзадания (АААА-А19-119022290004-8).*

### **Литература**

1. Хуснутдинов Р.И., Байгузина А.Р. Металлокомплексный катализ в синтезе простых эфиров. ЖОрХ, 2019, том 55, № 7, с. 991–1023.
2. Хуснутдинов Р.И., Байгузина А.Р., Гималетдинова Л.И., Джемилев У.М. ЖОрХ, 2012, 48(9), 1192-1197.
3. Guérinot A., Reymond S., & Cossy, J. (2012). Ritter reaction: recent catalytic developments. Eur. J. Org. Chem., 2012(1), 19-28.
4. Байгузина А.Р., Лутфуллина А.Р., Хуснутдинов Р.И. Синтез N-(адамantan-1-ил)карбамидов по реакции Риттера из адамantan-1-ола и нитрилов в присутствии Cu-катализаторов. 2018, т. 54, No. 8, с. 1121–1126.
5. Jiang, D., Wang, Y. Y., Tu, M., & Dai, L. Y. (2008). The alcoholysis of acetonitrile prompted by Brønsted acidic ionic liquid [HSO<sub>3</sub>-pmim] HSO<sub>4</sub>. Chin. Chem. Lett., 19(8), 889-892.



## МИКРОБҚА ҚАРСЫ ТИІМДІЛІГІ ЖОҒАРЫ АІР-2 ПРЕПАРАТЫН СИНТЕЗДЕУ ЖӘНЕ ӘЗІРЛЕУ

Максатова А.М.<sup>б</sup>, Пірәлиев К.Д.<sup>б</sup>, Датхаев У.М.<sup>а</sup>, Омырзақов М.Т.<sup>в</sup>, Ахметова Г.С.<sup>б</sup>

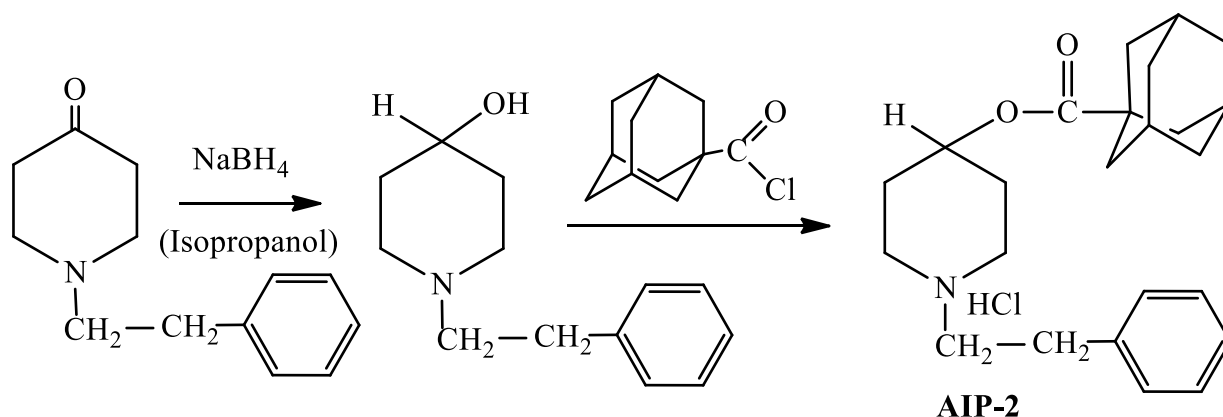
<sup>а</sup> Алматы қ., АҚ «Ұлттық медициналық университет»

<sup>б</sup> Алматы қ., АҚ «А.Б.Бектуров атындағы химиялық ғылыми институты»,  
e-mail: [aika-172\\_92@mail.ru](mailto:aika-172_92@mail.ru)

<sup>в</sup> Алматы қ., ЖШС «GxPCorpany»

Бактерияға қарсы белсенділігі бар заттар медицина үшін өте маңызды. Адамтан туындылары вирусқа қарсы, бактерияға қарсы, қабынуға қарсы белсенділікті, 11β-HSD1 орталық жүйке жүйесінің тежелуін қамтитын биоактивтілікті көрсететіні белгілі.

Осы жұмыс аясында адамтан және пиперидин сияқты фармакофорлық топтарды бір молекулаға біріктіруге мүмкіндік беретін мақсатты модификация жүргізілді. 1-(2-фенилэтил)-пиперидин-4-ол изопропанолдағы натрийборгидридпен қалпына келтірумен тиісті қайталама спирт алынды, одан әрі адамтанкарбонилхлоридпен адамтанкарбон қышқылының күрделі эфирі синтезделді, АІР-2 препараты [1]. Ациляция хлороформда жүргізілді, пиперидолдың қатынасы: ацилдеуші агент 1: 3 алынды.



1-(2-Фенилэтил)-4-адамтанкарбонилокси пиперидина, адамтан фрагменті бар АІР-2 [1] препараты микроорганизмдердің музей штамдарына қатысты *In vitro* микробқа қарсы белсенділікке ие: *Escherichiacoli* ATCC 8739, *Staphylococcus aureus* ATCC 6538-P, *Candida albicans* ATCC 10231, әрі қарай тереңдетілген зерттеулер үшін ұсынылатын флуконазол және ампициллин сияқты практикалық медицинада қолданылатын салыстыру препараттарына айтарлықтай артықшылықтар бар.

### Әдебиеттер

1. № **4782** ҚР пайдалы модельге патент/ микробқа қарсы белсенділікке ие 1-(2-фенилэтил)-4-адамтанкарбонилокси пиперидин гидрохлориді / Ахметова Г.С., Пірәлиев К.Д., Ильин А.И., Датхаев У. М., Максатова А.М. т.б.

*Зерттеу ҚР БҒМ ҒК қаржылай көмегімен жүргізілді. МБҚ BR10965255*



## ФТОРҚҰРАМДАС ПИПЕРИДИНДЕРДІҢ АЛМАСТЫРЫЛҒАН ТУЫНДЫЛАРЫ ҚАТАРЫНАН ИНФЕКЦИЯҒА ҚАРСЫ ПРЕПАРАТТАРДЫ ІЗДЕУ

Максатова А.М.<sup>б</sup>, Пірәлиев К.Д.<sup>б</sup>, Датхаев У.М.<sup>а</sup>, Омырзаков М.Т.<sup>б</sup>, Ахметова Г.С.<sup>б</sup>

<sup>а</sup> Алматы қ., АҚ «Ұлттық медициналық университет»

<sup>б</sup> Алматы қ., АҚ «А.Б.Бектуров атындағы химиялық ғылыми институты»,  
e-mail: [aika-172\\_92@mail.ru](mailto:aika-172_92@mail.ru)

<sup>б</sup> Алматы қ., ЖШС «GxPCorpany»

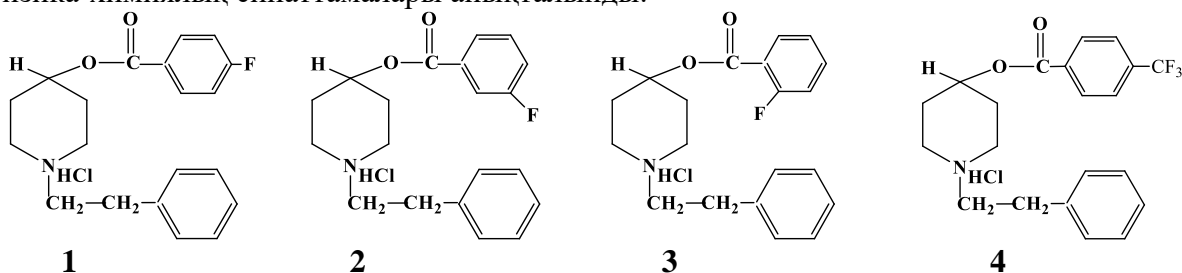
Синтетикалық органикалық химияның басым міндеттерінің бірі болжамды қасиеттер кешеніне ие, өзіндік құрылымы бар жаңа қосылыстарды синтездеу болып табылады.

Фторорганикалық қосылыстарының химиясы теориялық және практикалық маңызды шешуші мәнге ие.

Көптеген зерттеулер құрамында фтор бар органикалық қосылыстардың биологиялық белсенділігі жоғары екендігі дәлелденді, нәтижесінде фторхинолон антибиотиктері, респеридон, фторфеназин, галоперидол және т.б. сияқты дәрілер құрылып, қазіргі таңда сәтті қолданылуда.

Зерттеудің мақсаты - қарапайым және қол жетімді синтез әдістерін жасау және құрамында пиперидин циклі бар қосылыстар арасынан ең аз жанама әсері бар жаңа тиімді инфекцияға қарсы дәрілерді іздеу.

1-4 суретте келтірілген фторбензойлы күрделі эфирлері алынды, шығымдары мен физика-химиялық сипаттамалары анықталынды.



Пиперидин туындылары қатарынан жаңа дәрілік препараттарды іздеу мақсатында 1-(фенилэтил-)-пиперидонның екіншілік спирті негізінде бір қатар фторбензой эфирлері алынды.

Фтор атомын енгізуде қосылыстардың фармакологиялық белсенділігіне әсерін түсіндіру үшін алынған 1-(2-фенилэтил-)-пиперидон екіншілік спиртінің 4-фтор-, 3-фтор-, 2-фтор-, трифторметил-бензоилхлоридтерімен ацилдеу арқылы пара-, мета-, орто-фторбензойқышқылдарының күрделі эфирлері синтезделді. Реакция абсолютті диоксанда қыздыру арқылы жүргізілді, агенттердің қатынасы: ацилдеуші агент 1: 2 алынды.

4-фтор-, 3-фтор-, 2-фтор-, трифторметил-бензойлы хлорид күрделі эфирлерінің ИҚ спектрі 1722-1774 см<sup>-1</sup> аралығында күрделі эфир карбонилінің қарқынды жұтылу пайда болуымен сипатталады, сонымен қатар фенил топтарына байланысты 627-799 см<sup>-1</sup> жұтылу жолақтары болуын дәлелдейді.

Биологиялық белсенділікке зерттелетін қосылыстардың ішінде инфекцияларға қарсы әсері бар препараттар анықталу жоспарланды.

### Әдебиеттер

1. Akhmetova G.S., Issayeva U.B., Yu V.K., Praliyev K.D., Satbayeva Yy. M., Kadyrova D.M., Amirkulova M.K., Smagulova G.S., Seilkhanov T.M. Fluorobenzoates of 1-propyl-4-ketoximepiperidine as potencial local anesthetics // Хим.журн.Казахстана. - 2018.- №2.- С.230-236.

Зерттеу ҚР БҒМ ҒК қаржылай көмегімен жүргізілді. МБҚ BR10965255

## СИНТЕЗ ТИОАНГИДРИДОВ НА ОСНОВЕ 1,2,3-БЕНЗОТРИАЗОЛА И 2,4-ДИГИДРОКСОПИРИМИДИНА

Муканова М.С.<sup>а</sup>, Сычева Е.С.<sup>а</sup>, Ящук К.В.<sup>б</sup>, Машина О.А.<sup>б</sup>

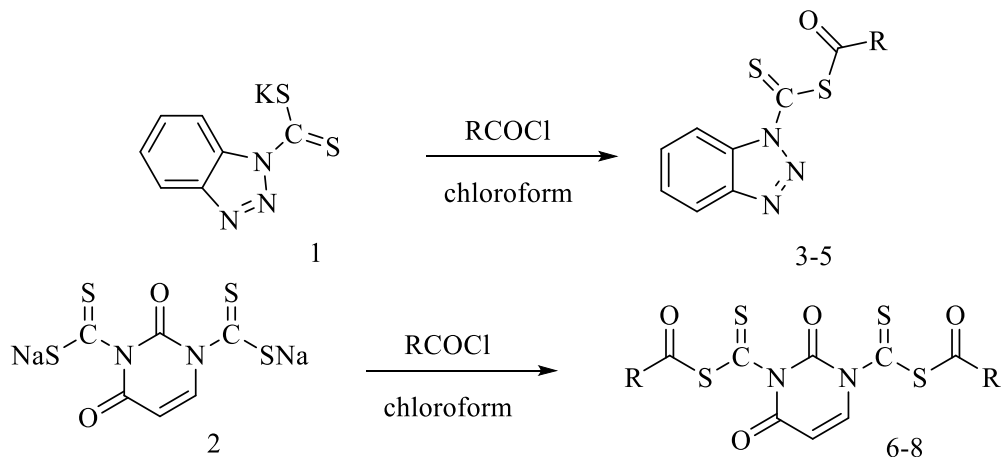
<sup>а</sup> г. Алматы, АО «Институт химических наук им А.Б. Бектурова», e-mail: [chem\\_mukan@mail.ru](mailto:chem_mukan@mail.ru)

<sup>б</sup> г. Алматы, Казахский национальный университет им. аль-Фараби

Известно, что вещества, содержащие в своем составе молекулы 1,2,3-бензотриазола и 2,4-дигидроксиимидина обладают антибактериальной, противоопухолевой, антиоксидантной, ростстимулирующей и другими видами биологической активности, находя широкое применение в медицине и сельском хозяйстве. Благодаря широкому спектру физиологической активности, данные гетероциклические соединения являются перспективными объектами для синтеза на их основе биологически активных веществ.

Продолжая научно-исследовательскую работу разработаны условия ацилирования 1*H*-бензо[d][1,2,3]триазол-1-карбодитиоата калия 1 и 2,4-диоксопиримидин-1,3-(2*H*,4*H*)-бис(карбодитиоата)натрия 2.

Реакцию ацилирования проводили взаимодействием 1*H*-бензо[d][1,2,3]триазол-1-карбодитиоата калия 1 и 2,4-диоксопиримидин-1,3-(2*H*,4*H*)-бис(карбодитиоата)натрия 2 с хлорангидридами (бутиловый, бензойный, 4-хлорбензойный) в среде хлороформа при комнатной температуре (рис.1).



R = C<sub>4</sub>H<sub>7</sub>(3, 6); C<sub>6</sub>H<sub>5</sub> (4, 7), C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>Cl (5, 8).

**Рисунок 1** – Схема синтеза тиоангидридов дитиокарбаминовых кислот

В результате синтезированы с соответствующими выходами масляный 1*H*-бензо[d][1,2,3]триазол-1-карботиоангидрид 3 (88%), масляный 2,4-диоксопиримидин-1,3-(2*H*,4*H*)-бис(карботио)тиоангидрид 6 (68%), бензойный 1*H*-бензо[d][1,2,3]триазол-1-карботиоангидрид 4 (96%), 2,4-диоксопиримидин-1,3-(2*H*,4*H*)-бис(карботиобензоилтиоангидрид) 7 (69%), 4-хлорбензойный 1*H*-бензо[d][1,2,3]триазол-1-карботиоангидрид 5 (77%), 2,4-диоксопиримидин-1,3-(2*H*,4*H*)-бис(карботио-4-хлорбензоилтиоангидрид) 8 (67%), соответственно.

Строение синтезированных соединений установлено на основании данных элементного анализа, ИК-спектроскопии и спектроскопии ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C. Среди синтезированных соединений выявлены вещества, обладающие высокой побего- и корнеобразующей активностью.

*Работа выполнена в рамках программы целевого финансирования КН МОН РК № BR10965255 «Инновационные материалы полифункционального назначения на основе природного сырья и техногенных отходов».*

## КОМПОЗИТЫ НА ОСНОВЕ ГУМИНОВОЙ КИСЛОТЫ

**Мулдахметов З.М., Газалиев А.М., Животова Т.С., Жакина А.Х.,  
Василец Е.П., Арнт О.В., Кудрявцева Е.В., Элжанқызы А.**

*г. Караганда, ТОО «Институт органического синтеза и углекислотной Республики Казахстан»,  
e-mail: [oxana230590@mail.ru](mailto:oxana230590@mail.ru)*

Большие перспективы для получения практически значимых и экологически безопасных композитов представляют природные полимеры. Наиболее широко применяемыми природными полимерами являются гуминовые кислоты, образующиеся в природе в результате биохимических преобразований наземной растительности и составляющие основную часть органической массы углей, торфа, почв и сапропелей.

Гуминовые кислоты характеризуются наличием конденсированного ароматического ядра и исключительно богатым функциональным составом. Они проявляют свойства коллоидных веществ, обладают поверхностно-активными свойствами и относятся к самоорганизующимся анионным полифункциональным полиэлектролитам. Полифункциональность гуминовых кислот определяет способность их вступать в реакции ионного обмена, окислительно-восстановительные реакции и комплексообразования [1-2]. Кроме того, гуминовые кислоты (ГК) участвуют в донорно-акцепторных, гидрофобных и сорбционных взаимодействиях. Многочисленными исследованиями доказано, что гуминовые кислоты могут связывать практически все виды экотоксикантов, включая ионы переходных металлов, радионуклиды, нефтяные и хлорированные углеводороды, пестициды, нитроароматические соединения и т.д. [3-7]. Однако присущие им такие недостатки, как высокая чувствительность к изменению рН среды и высоким температурам, низкая механическая прочность, сильное набухание, высокая пептизация, низкие щелоче- и кислотостойкость снижает эффективность их применения для этих целей. Особенно это касается создания на их основе сорбционных материалов для очистки производственных сточных вод.

Ранее нами показана эффективность устранения ряда недостатков ГК путем модифицирования методами функционализации их структуры, иммобилизации их на поверхности неорганических носителей, прививки синтетических полимеров на поверхность гуминовых кислот [8]. Эти приемы позволили повысить их сорбционные, связующие, почвоструктурирующие свойства, придавая одновременно им механическую прочность, стойкость к кислотному и щелочному гидролизу.

Одним из кардинальных и малоизученных способов повышения гуминовыми кислотами практически важных характеристик является создание на их основе композитов с аминоксодержащими соединениями.

Уже известны различные смеси гуминовых кислот, которые применяются в медицине, животноводстве, птицеводстве и технических отраслях (цементной, керамической, нефтедобывающей промышленности и т.д.) [9-10]. Известен ряд фармацевтических препаратов и кремов с добавкой гуматов, биологическая активность которых также связана, прежде всего, с проявлением ценных свойств гуматов.

В связи с отсутствием систематических исследований в области получения и применения композитных материалов на основе гуминовых кислот с органическими аминоксодержащими соединениями и учитывая высокий природный связующий и комплексообразующий потенциал гуминовых кислот, представлялось актуальным проведение исследований в этой области.

Для Республики Казахстан перспективность таких исследований определяется возможностью использования гуминовых композитов в различных отраслях и решением ряда экологических проблем.

Исследования композитов на основе гуминовых кислот с различными аминоксодержащими соединениями имеют широкие перспективы для направленной модификации гуминовых кислот и для создания наиболее экономичным и технологичным

способом нового класса композитных материалов самого разнообразного применения, которые могут проявить более высокие сорбционную способность, гидролитическую устойчивость, прочность и другие заданные свойства в сравнении с исходными соединениями.

Известно использование в качестве эффективных органоминеральных удобрений комплексы гуминовых кислот с мочевиной, так называемые гуматизированные мочевины.

Важным фактором для исследования гуматизированных мочевины в практическом плане является возможность получения на их основе сетчатых нерастворимых, гидролитически стойких и прочных гуминовых полимеров для сорбционных процессов.

В этом плане выбор мочевиноформальдегидных смол (МФС) в качестве исходного компонента для композитов ГК обусловлен их доступностью, водорастворимостью и наличием достаточного количества протонaccepторных центров, способных к комплексообразованию с ГК. МФС являются самыми дешевыми продуктами крупнотоннажного производства.

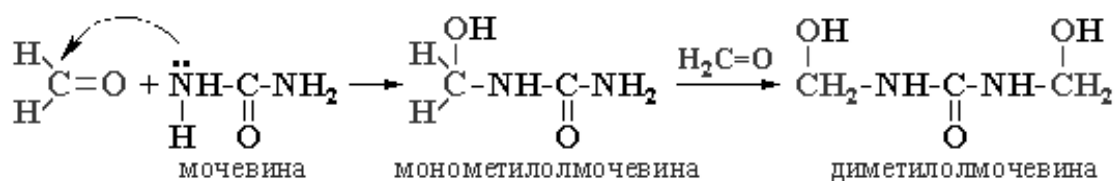
Гуминовые кислоты и мочевиноформальдегидные смолы имеют набор эксплуатационных недостатков, обусловленных их строением, которые могут быть устранены в процессе их комплексообразования.

В ходе исследования нами предложен способы получения композитов на основе гуминовой кислоты с мочевиноформальдегидной смолой и изучены некоторые их физико-химические свойства

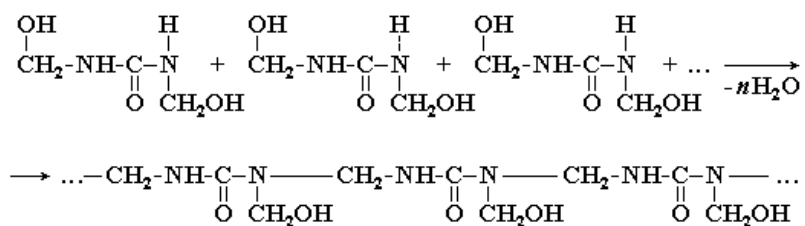
Гуминовая кислота (ГК) использована в виде нерастворимой формы и водорастворимой натриевой соли, гумата натрия (ГНа). Гумат натрия получен обработкой гуминовых кислот раствором гидроксида натрия. Характеристика ГК:  $\sum \text{COOH} + \text{OH}^- - 4,0 - 5,2 \text{ мг-экв/г}$ ,  $\sum \text{COOH}^- - 2,75 - 3,5 \text{ мг-экв/г}$ ,  $A^f - 13-15 \%$ ,  $W^a - 10 - 12\%$ ,  $\eta_{\text{пр}}$ , 1% при 20°C - 0,05 дл/г.

Мочевиноформальдегидные смолы получены по стандартной методике поликонденсацией мочевины с формальдегидом (37% водный раствор) в водном растворе при мольном соотношении М:Ф = 1: 2 в две стадии, сначала в щелочной среде при рН 7-9, затем поликонденсацию завершают в кислой среде при рН 5.

На первой стадии процесса формальдегид взаимодействует с мочевиной по типу нуклеофильного присоединения. Нуклеофил – молекула мочевины, содержащая две группы -NH<sub>2</sub> с неподеленной парой электронов на атоме азота. В избытке формальдегида реагируют обе эти группы с образованием диметилолмочевины:



На второй стадии осуществляется поликонденсация диметилолмочевины с образованием линейного полимера:

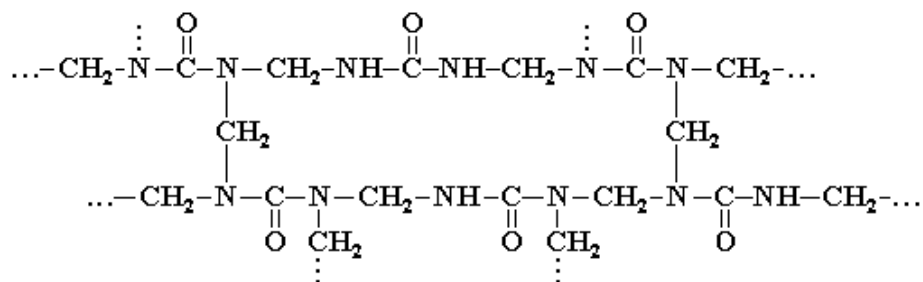


Или упрощенно обе стадии образования линейного полимера можно представить в виде:



На третьей стадии, при нагревании или в присутствии кислотных катализаторов линейный

полимер нагреванием превращают в сетчатый (трехмерный). Это происходит за счет образования поперечных межцепных связей (мостиков) -CH<sub>2</sub>- при отщеплении воды от групп -CH<sub>2</sub>OH и -NH, расположенных в разных цепях:



Характеристика МФС: массовая доля сухого остатка - 50 %, плотность – 1,20 кг/м<sup>3</sup>, условная вязкость по ВЗ-4 – 20 - 30 сек, рН 7,2 – 7,6, смешиваемость смолы с водой при которой наблюдается коагуляция, по объему 1:6, содержание свободного формальдегида – 1%, содержание метилольных групп - 9-12 %.

Композиты на основе гуминовой кислоты и мочевиноформальдегидной смолы получены путем смешения 5% водных растворов гумата натрия (гумат) с 50% водными растворами мочевиноформальдегидной смолы в объемном соотношении 4:1 (ГNa:МФС) при комнатной температуре.

В таблице 1. приведены основные характеристики исходных и полученных продуктов совмещения и отражено влияние способа получения композита на основе гуматов с МФС на их кислотный состав, вязкость, время отверждения и токсичность комплекса по содержанию свободного формальдегида.

**Таблица 1** – Характеристика исходных компонентов и композитов

№ образца	Образец	рК <sub>а</sub>	∑СООН+ОН, мг-экв/г	СН <sub>2</sub> ОН, %	η <sub>прив.</sub> , 1% вода, дл/г	Свободный СН <sub>2</sub> О, %	Время отверждения 20°С, 1% С <sub>2</sub> О <sub>4</sub> Н <sub>2</sub> , мин
1	ГК	4,6	5,04		0,05	-	-
2	МФС	7,5	-	12,2	27	1,0	23
3	ГК-МФС	7,2	2,30	11,2	0,12	0,5	30
4	ГNa-МФС	5,0	4,53	13,2	0,13	0,8	60

Как видно, при совмещении растворов ГК и МФС в результате процесса комплексообразования в продуктах снижается содержание кислотных и метилольных групп, свободного формальдегида и величина константы ионизации. Гуминовые кислоты, как поверхностно-активные вещества, в смеси оказывают разжижающее действие. Повышается жизнеспособность модифицированной МФС смолы, что выгодно при их переработке. Стабилизация МФС в присутствии гуматов связана образованием дополнительных водородных связей. Время отверждения поликомплексов МФС с гуматом возрастает, поэтому для них требуется более высокая концентрация кислотного отвердителя по сравнению с исходной смолой МФС.

Таким образом, полученные композиты представляют темно-коричневые порошки, растворимые в воде, либо в растворе щелочи. После отверждения в присутствии щавелевой кислоты они переходят в нерастворимое шитое состояние. Комплексообразование происходит посредством водородных связей между донорными группами СООН, ОН гуминовых кислот и акцепторными группами МФС (С=О. NH-). Повышение жизнеспособности, вязкости и снижение формальдегида в смеси свидетельствуют о протекающих в системе межмолекулярных взаимодействиях и образовании водородных связей между функциональными группами МФС (NH, СН<sub>2</sub>ОН и С=О) и гуминовой кислоты

(COOH, фенольной OH). Модифицированные гуматом МФС более пластичны, так как гуматы в их составе удерживают воду и нейтрализуют формальдегид. Все это снижает процессы старения карбамидных смол.

### Литература

1. Попов А. И. Гуминовые вещества: свойства, строение, образование/ Под ред. Е. И. Ермакова. - СПб.: Изд-во С.-Петербург. ун-та, 2004. - 248 с.
2. Дергачева М.И., Некрасова О.А., Оконешникова М.В., Васильева Д.И., Гаврилов Д.А., Чур К.О., Ондар Е.Э. Соотношение элементов в гуминовых кислотах как источник информации о природной среде формирования почв // Сибирский экологический журнал. - 2012. - № 5. - С. 667-676.
3. Тихова В. Д., Богданова Т. Ф., Фадеева В. П., Пиоттух-Пелецкий В. Н. Исследование фрагментного состава гуминовых кислот различного происхождения с использованием компьютерной системы «ИК-ЭКСПЕРТ» // Журнал аналитической химии. 2013. Т. 68. №. 1. С. 90-90.
4. Pan C., Troyer L. D., Liao P., Catalano J. G., Li W., Giammar D. E. Effect of Humic Acid on the Removal of Chromium(VI) and the Production of Solids in Iron Electrocoagulation // Environ. Sci. Technol. 2017. - V. 51. № 11. - P 6308–6318.
5. Мамылов С.Г., Тихова В.Д., Бычков А.Л., Ломовский О.И. Термический анализ механохимически активированных гуминовых кислот // Тез. докл. V всероссийской науч. конф. с международным участием «новые достижения в химии и химической технологии растительного сырья, Барнаул: изд. АлтГУ. -2014. - С.107-109.
6. Mirzobekzoda M. P., Maltseva E. V., Shekhovtsova N. S. Analysis of Structural Features of Humic Acids Fractions after Mechanochemical Modification // Advanced Materials Research. TransTechPublications. - 2015. - V. 1085. - P. 3-6.
7. Буркова В. Н., Мальцева Е. В., Савельева А. В., Юдина, Н. В. Влияние механоактивации бурых и окисленных углей на состав и свойства водорастворимых гуминовых комплексов // Международный журнал прикладных и фундаментальных исследований. - 2016. - №. 5-2. - С. 219- 223.
8. Аккулова З.Г., Абжалелов А.Б., Амирханова А.К., Жакина А.Х., Айтуганов К.А., Чуркина Г.Н. Наноструктурированные полимергуминовые биоматериалы для повышения урожайности зерновых культур в сельском хозяйстве // Международная научно-практическая конференция: «Современные проблемы биотехнологии: от лабораторных исследований к производству» в рамках III Международных Фарабиевских чтений 7-8 апреля, 2016 г. – Алматы: Қазақ университеті. - 2016. – с. 165.
9. Офицеров Е.Н., Рябов Г.К., Убаськина Ю.А., Климовский А. Б., Фетюхина Е. Г. Кремний и гуминовые кислоты: Моделирование взаимодействий в почве // Известия Самарского научного центра Российской академии наук. 2011. Т. 13. №4. С. 550-557.
10. Skripkina, T.S., Bychkov, A.L., Tikhova, V.D., Smolyakov, B.S., Lomovsky O.I. Mechanochemically oxidized brown coal and the effect of its application in polluted water // Environmental Technology & Innovation. – 2018. -V.11. - P. 74-82.

## СОПОЛИМЕРЫ МАЛЕИНОВОГО АНГИДРИДА С РАЗЛИЧНОЙ ФУНКЦИОНАЛЬНОЙ АКТИВНОСТЬЮ

**Мухамедова Р.Ф., Бойко Г.И., Любченко Н.П.**

*г. Алматы, Satbayev University, e-mail: [mukhamedovar@mail.ru](mailto:mukhamedovar@mail.ru)*

Путем модификации сополимеров малеинового ангидрида моно- и полифункциональными органическими соединениями содержащими атомы кислорода, азота, фосфора осуществлен синтез биологически активных, биodeградируемых макромолекулярных систем, обладающих стимулирующим рост и развитием растений, противовирусным, противовоспалительным, противобактериальным действием.

Иммобилизацией низкомолекулярных моно- и бифункциональных производных пиперидолов на макромолекулу сополимеров стирола с малеиновым ангидридом и акриловой кислотой получены полимерные водорастворимые формы биологически активных веществ (БАВ), стимуляторов роста и развития растений эффективных для широкого ряда культур- картофеля, сахарной свеклы, кукурузы, хлопчатников, кормовых культур (сорго, люцерна). Полимерные формы БАВ по активности превосходят свои низкомолекулярные аналоги. Препараты прошли испытания на острую токсичность и кумулятивность. Результаты испытаний, проводимые в течение нескольких лет, показали, что препараты обладают рядом преимуществ: препараты практически не токсичны, имеют низкие стимулирующие концентрации, обладают пролонгирующим стимулирующим действием, отсутствует ингибирующий эффект, упрощение технологии обработки сельскохозяйственных культур.

Модификацией сополимера СтМА гуминовой кислотой синтезированы полимерные водорастворимые биологически активные вещества, стимулирующие рост и развитие растений, повышающие устойчивость растений к стрессовым ситуациям. Применение природных гуминовых препаратов как средства повышения плодородия бедных почв, а также активации ростковых процессов выявил ряд недостатков: действие их кратковременно из-за низкой биологической стойкости, при высыхании они быстро теряют свою активность, за период вегетации требуется двух-, трехкратное опрыскивание. Полимерные водорастворимые препараты гуминовой кислоты позволяют продлить сроки биологического действия.

Результаты фенологических наблюдений и биометрического учета во время роста растений в полевых условиях показали, что обработка клубней картофеля растворами препаратов активизирует прорастание клубней, ускоряет появление всходов на 3-4 дня, растения раньше вступают в фазу бутонизации и цветения, повышает количество стеблей по сравнению с контролем на 2,1-2,3 штук, отмечен также активный рост ботвы. Стимуляторы роста оказались фактором, воздействующим на рост ассимиляционной поверхности и, в итоге урожайности клубней, по сравнению с их мономерной формой на 2,7 т/га или 12%.

Особенности структуры макромолекулы сополимера (регулярно чередующие звенья ангидридных групп, и характер распределения их по длине макромолекулы), а также возможность регулирования сорбирующих свойств и консистенции абсорбента изменением pH и условий позволили синтезировать гидрогели, которые можно использовать в качестве эффективных абсорбентов для поглощения воды, биологических жидкостей, извлечения редких и благородных металлов, в гель проникающей хроматографии, медицине, сельском хозяйстве. Комплексом физико-химических методов установлены особенности формирования трехмерной структуры сеток с участием малеиновых групп сополимера и гидроксильных триэтиленгликоля. Изучены сорбционные свойства гидрогелей и материалов на их основе.



## ПОЛУЧЕНИЕ И ПРИМЕНЕНИЕ ГУМИНОВЫХ КОМПОЗИЦИОННЫХ МАТЕРИАЛОВ

**Нургалиева Г.О., Джусипбеков У.Ж., Баяхметова З.К., Шакирова А.К.**

*г. Алматы, АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова», e-mail: [n\\_gulzipa@mail.ru](mailto:n_gulzipa@mail.ru)*

Казахстан входит в десятку крупнейших производителей угля на мировом рынке, а среди стран СНГ занимает 3-место по запасам, второе – по добыче и первое место – по добыче угля на душу населения. Государственным балансом учтены запасы по 49 месторождениям, составляющие 33,6 млрд. тонн, в том числе каменных углей – 21,5 млрд. тонн, бурых углей – 12,1 млрд. тонн. Уголь является основным источником получения электроэнергии в Республике, около 80% электроэнергии производится на угольных электростанциях. Однако, ведущие страны в мире отказываются от использования угля в энергетике, главным образом из экологических соображений. Несмотря на низкую стоимость угля в сравнении с природным газом и печным топливом (мазутом) даже в пересчете на 1 кВт·ч выработанной энергии, при использовании угля в качестве топлива для выработки энергии существует немало проблем. Основная из них – высокий уровень выбросов от сжигания – газообразных и твердых (зола). При сжигании угля на тепловых электростанциях образуется в 2 раза больше CO<sub>2</sub>, чем в процессе сжигания природного газа. Интенсивность выбросов CO<sub>2</sub> в Казахстане в 2016 г. достигла 0,604 кг на единицу ВВП, по выбросам CO<sub>2</sub> страна занимает 4-е место в мире[1]. В большинстве стран действуют жесткие требования к уровню выбросов, допустимых при сжигании угля, в странах ЕС применяются жесткие штрафные санкции к ТЭЦ, превышающим нормы (вплоть до 50 евро за каждый выработанный мегаватт электроэнергии в час). С 2023 г. в ЕС вводится углеродный налог carbon tax, если не скорректировать тренд на снижение эмиссии парниковых газов, то конкурентоспособность казахстанской продукции на экспортных рынках будет ухудшаться, что приводит к сокращению экспорта угля Казахстана и продукции из угля. В соответствии с Парижским соглашением по климату (Paris Agreement) Казахстан взял обязательства по сокращению парниковых газов до 25% к 2030г., это способствует снижению вредных выбросов в атмосферу и сокращению потребления угля. С учетом мировых трендов, а также перехода Казахстана на «зеленую» экономику уголь не будет использоваться в традиционных сегментах. В связи с этим назрела острая необходимость в развитии новых направлений использования угля и получение из угля продукции нового поколения с высокой степенью передела. Это направление может обеспечить качественное изменение потребительских свойств продукции и, соответственно, увеличить ее рыночную цену, а самое главное – позволит выйти за пределы рынка энергетического угля.

В Казахстане имеются большие запасы бурых углей, которые являются ценным сырьем для получения гуминовых соединений, находящихся широкое применение в различных отраслях промышленности. В сельском хозяйстве гуматсодержащие продукты применяются как органические удобрения, стимуляторы роста растений, компоненты органо-минеральных удобрений и кормовых добавок, структурообразователи и детоксикаторы почв, в нефтяной промышленности - стабилизаторы буровых растворов и ингибиторы коррозии при транспортировке нефти, в аккумуляторной – расширители и ингибиторы коррозии аккумуляторов, в строительстве – разжижители цементных шламов, в металлургии и фосфорной промышленности – для агломерации руд, в медицине и косметологии – компоненты лекарственных препаратов, мазей, гелей и др.[2]. Особый интерес вызывает их способность связывать токсичные неорганические (тяжелые и радиоактивные металлы) и органические соединения (нефть, нефтепродукты и др.), содержащихся в различных жидких средах и почве. Имеющиеся на рынке аналогичные препараты (ростостимуляторы, фунгициды, сорбенты, протекторы, флокулянты, антигельминтики, расширители и др.) закупаются в странах ближнего и дальнего зарубежья.

В АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова» исследованы физико-химические основы процессов извлечения гуминовых соединений из бурых углей Казахстана, разработаны энерго- и ресурсосберегающие технологии получения гуминовых продуктов и гуматсодержащих композиционных материалов многофункционального действия

использованием принципов «зеленой» химии. Отличие разработанной в Институте технологии получения гуматсодержащих материалов заключается в проведении процесса в «мягких условиях». При этом, варьируя технологические параметры и условия процесса можно получать гуматсодержащие продукты с регулируемым составом и разнообразными свойствами, что делает возможным их применение в качестве стимуляторов роста растений, удобрений, расширителей, сорбентов, ингибиторов и др.

Установлена высокая ростстимулирующая и удобрительная эффективность гуматсодержащих продуктов на различных сельскохозяйственных культурах и разных типах почв. Испытания осуществлены в хозяйствах Алматинской, Кызылординской, Жамбылской, Северо-Казахстанской, Акмолинской, Кустанайской, Атырауской и Мангистауской обл. на зернобобовых, технических, плодово-ягодных и овощных культурах. Их применение позволило увеличить урожайность сельскохозяйственных культур в среднем на 15-45% и сократить сроки вегетации и созревания на 5-7 дней. При этом улучшается качество готовой продукции, а также повышается устойчивость растений к неблагоприятным климатическим условиям, болезням, избыточной кислотности, засоленности и загрязненности почв. Важным моментом использования гуматсодержащих препаратов является то, что их применения не вызывают генетическую модификацию сельхозпродукции. Гуматсодержащие продукты также использованы для выращивания цветочных, декоративных, лиственных, хвойных и др. культур в гг. Нур-Султан, Алматы, Актау и Жанаозен. Результаты многочисленных опытов на территории Мангистауской области (на участках ГКП «Коктем», ТОО «Caspian Operating», ТОО «Экспо-Трейдинг» и ООО «Агророст» (г. Актау), средней школы №20 г. Жанаозен, пос. Куланды, промышленных площадках АО «Озенмунайгаз», Бейнеуском, Каракиянском и Мангистауском районе) показали, что применение препарата способствует формированию более разветвленной и мощной корневой системы, повышению коэффициента использования растениями почвенной влаги, регулированию отдачи питательных элементов и улучшению минерального питания растений, сокращению сроков их вегетации, усилению защитного действия растений к неблагоприятным факторам. Установлено, что применение гуминовых композиционных препаратов приводит к пескозадержанию и вовлечению в оборот опустыненных земель.

В ходе опытно-промышленных испытаний установлена эффективность гуматсодержащих композиционных материалов в качестве расширителей отрицательных электродов свинцово-кислотных аккумуляторных батарей и связующих агломерационных шихт. В ДГП «Центр физико-химических методов исследования и анализа» РГП «КазНУ им. аль-Фараби» МОН РК методом УФМ-радиометрии определены суммарные значения  $\alpha$ - и  $\beta$ -активностей загрязненного ураном-235 и ураном-238 растворов до и после контакта с гуматсодержащими материалами. Установлено, что степень очистки загрязненных радионуклидами растворов составляет более 60%. Проведенные в РГП «Национальный ядерный центр Республики Казахстан» работы по очистке штольных вод Дегелена (Семипалатинский ядерный полигон) с использованием гуматсодержащих композиционных материалов показали, что степень очистки загрязненных тяжелыми металлами, РЗЭ и радионуклидами растворов достигает 98%. Как при статических, так и при динамических условиях активность  $^{137}\text{Cs}$  в подкисленной воде снизилась в пределах 10-50%.

## Литература

1. [https://stat.gov.kz/ecologic/greenhouse\\_gas\\_emissions?lang=ru](https://stat.gov.kz/ecologic/greenhouse_gas_emissions?lang=ru)
2. Попов А.И. Гуминовые вещества свойства, строение, образование. – Санкт-Петербург: Изд-во С-ПбГУ, 2004. – 248 с.

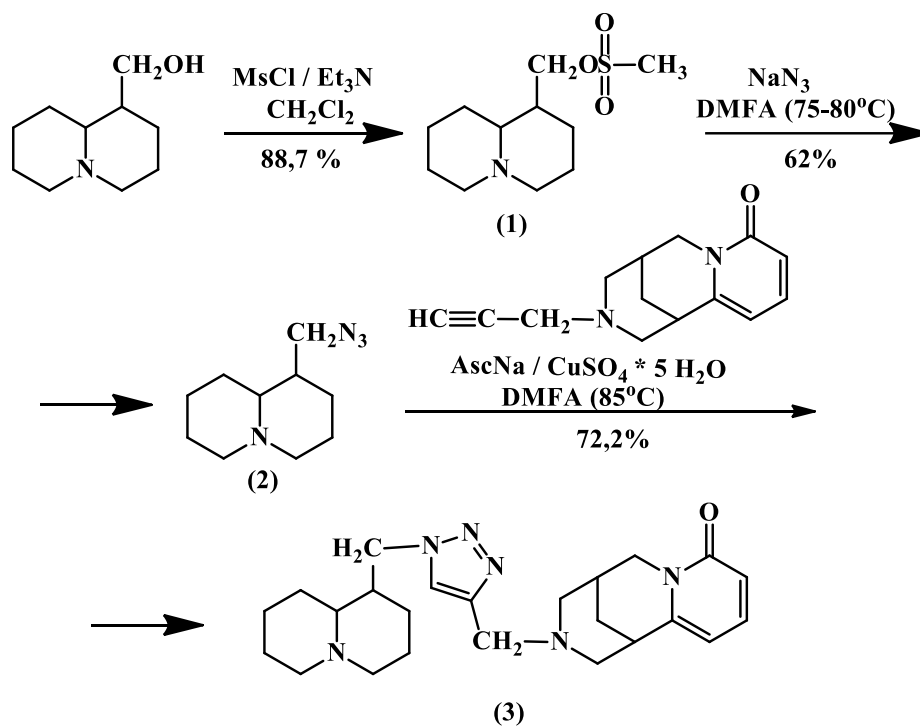
**СИНТЕЗ 1,2,3-ТРИАЗОЛСОДЕРЖАЩЕГО ПРОИЗВОДНОГО  
АЛКАЛОИДОВ ЛУПИНИНА И ЦИТИЗИНА**

**Нуркенов О.А., Кишкентаева А.С., Нурмаганбетов Ж.С.,  
Фазылов С.Д., Газалиев А.М.**

*г. Караганда, Институт органического синтеза и углекислотной РК,  
e-mail: [nurkenov\\_oral@mail.ru](mailto:nurkenov_oral@mail.ru)*

В последнее время много внимания уделяется синтезу 1,2,3-триазолов, конденсированных с другими гетероциклами и изучению их биологической активности [1, 2]. Значительную роль в качестве базовых молекул для химической модификации и получения веществ с разнообразной биологической активностью играют вторичные метаболиты растений, к которым относятся хинолизидиновые алкалоиды цитизин и лупинин [6, 7].

С целью получения нового биологически активного вещества (**3**), содержащего одновременно фрагменты алкалоидов цитизина, лупинина и фармакофорного 1,2,3-триазольного фрагмента, нами выбран метод азид-алкинового циклоприсоединения, катализируемого соединениями меди. Исходный азид лупинина (**2**) получали реакцией нуклеофильного замещения азид-ионом соответствующего мезилат-производного лупинина (**1**). В качестве алкинового компонента в данной реакции циклоприсоединения был использован N-пропаргилцитизин. Реакцию азид лупинина (**2**) с N-пропаргилцитизин проводили при нагревании (85°C) реагентов в ДМФА в присутствии  $\text{CuSO}_4 \cdot 5\text{H}_2\text{O}$  и аскорбата натрия.



Соединения (**1-3**) очищали колоночной хроматографией на окиси алюминия. Строение соединений (**1-3**) было подтверждено методами ЯМР<sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C спектроскопии, масс-спектрометрии и РСА.

**Литература**

1. Shafran E. A., Bakulev V. A., Rozin Ya. A., Shafran Ya. M. // Chem. Heterocycl. Comp., 2008. Vol. 44. P.1040-1045. doi 10.1007/s10593-008-0155-9
2. Dheer D., Singh V., Shankar R. // Bioorg. Chem., 2017. Vol. 71. P.30. doi 10.1016/j.bioorg.2017.01.010

## ТЕОРЕТИЧЕСКИЕ ОСНОВЫ МОДЕЛИРОВАНИЯ НОВЫХ СОЕДИНЕНИЙ ПИПЕРИДИНА

**Омарова Р.А.<sup>а</sup>, Бошкаева А.К.<sup>а</sup>, Пралиев К.Д.<sup>б</sup>, Ахметова Г.С.<sup>б</sup>, Бекежанова Ф.А.<sup>а</sup>**

<sup>а</sup> г. Алматы, НАО «Казахский национальный медицинский университет имени С.Д. Асфендиярова»,  
e-mail: [kenes65@mail.ru](mailto:kenes65@mail.ru)

<sup>б</sup> г. Алматы, АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова»

### Введение

Теоретическое исследование молекулярного строения новых лекарственных веществ основывается на применении компьютерных методов конструирования и моделирования и представляет в настоящее время новое направление в создании лекарственных средств целенаправленного действия. Квантово-химические исследования потенциальных лекарственных средств позволяют не только всесторонне оценить химические свойства рассматриваемой структуры, но и проводить виртуальный скрининг при создании соединения-лидера.

Предпосылками для создания нового лекарственного вещества являются теоретические сведения о характере связи между химической структурой, физическими свойствами и фармакологической активностью. Количественная связь «структура — активность» определяется комплексом физических и химических свойств, обусловленных строением молекулы нового соединения. Поиск веществ с вероятной биологической активностью требуют значительного времени, прогнозирующего связь между их структурой и свойствами.

Таким образом, математические методы прогнозирования предполагают существование перспективных биологически активных химических соединений и отсеивания из них бесперспективных. Затем осуществляют проверку биологической активности перспективных веществ (доклинические испытания). Эти теоретические предсказания молекул оцениваются в эксперименте.

Материалы и методы исследования: два новых производных 1-(2-этокси-этил)-4-гидроксипиперидина, синтезированные в Институте химических наук им. А.Б. Бектурова под руководством академика НАН РК К.Д. Пралиева; полуэмпирический квантово-химический метод РМЗ, входящий в программный блок HyperChem.

### Результаты и обсуждение

Разнообразные по химическому строению алкилокси-, арилокси- и гетераарилоксипропинилкарбинолы зарекомендовали себя, как реакционноспособные соединения в органическом синтезе. Направленный синтез новых соединений с потенциальной фармакологической активностью, с введением в молекулы дополнительных фармакофоров, осуществляется по реакции конденсации 1-(2-этокси-этил)-4-гидроксипиперидина с феноксипропаргилом и циклопропанкаронилхлоридом. Квантово-химическое изучение двух новых химических соединений было проведено на основе 1-(2-этокси-этил)-4-гидроксипиперидина. При помощи программы HyperChem была доказана возможность существования данных соединений путем оптимизации молекул и построения графиков потенциальной энергии. По графикам были обнаружены максимумы и минимумы, что подтверждает существование молекулы по квантовым расчетам. Произведен расчет пространственного, электронного строения и энергетических характеристик смоделированных соединений производных 4-гидроксипиперидина. Расчетными методами получен набор конформаций рассматриваемых изолированных молекул, соответствующие минимуму потенциальной энергии. Как известно при молекулярном моделировании должен рассматриваться энергетический оптимум не отдельных молекул лиганда и химического реагента, а целого единого комплекса, т.е. продукта синтеза.

Результаты прогнозирования позволили объяснить термодинамическую устойчивость новых соединений, которую определяли по отрицательным значениям энтальпий

образования. Для оптимизации структур целевых соединений была определена реакционная способность, отвечающая тем или иным нуждам синтеза. Реакционная способность исследуемых моделей оценена путем сопоставления значений рассчитанных энергий граничных молекулярных орбиталей (МО). Значительные по величине отрицательные значения разницы между энергиями граничных МО и величины дипольных моментов свидетельствует о том, все исследованные модели обладают высоким коэффициентом жесткости. Значения рассчитанных зарядовых характеристик свидетельствует о значительном перераспределении в исходной молекуле 1-(2-этокси-этил)-4-гидроксипиперидина при введении в ее структуру новых заместителей.

Заключение: с помощью полуэмпирического метода PM3, входящего в программу HyperChem, было проведено исследование особенностей геометрического и электронного строения двух новых производных 1-(2-этокси-этил)-4-гидроксипиперидина, позволившее оценить: электронодонорный центр в новых соединениях; их термодинамическую стабильность; реакционную способность и потенциальную возможность применения в качестве лекарственных веществ.

Таким образом, разработка новых походов компьютерного конструирования молекулярных структур химических соединений открывает перспективные возможности для направленного синтеза лекарственных веществ.

### Литература

1. Юдин А.Л. Лабораторный практикум. Квантово-химическое моделирование соединений в пакете HyperChem: Учебно-методическое пособие. - Кемерово, 2013. - 175 с.
2. Семенов С.А. Пакет прикладных программ HyperChem. Квантовая механика: Учебное пособие. - М.: МИТХТ им. Ломоносова, 2006. - 30 с.
3. Хельтье Х.-Д., Зипль В., Роньян Д. и др. Молекулярное моделирование: теория и практика. - М.: Бином. Лаборатория знаний, 2013.
4. Пралиев К.Д. С- и N-замещенные моно- и бициклические пиперидины: синтез, стереохимия, превращения и свойства. Новые синтетические анальгетики и анестетики // Материалы IМеждународ. конф. «Азотистые гетероциклы и алкалоиды». - М., 2001. - С. 130-138.
5. Ахметова Г.С. Синтез и строение 1-(3-этоксипропил)-4-фенил-4-гидроксипиперидина и его некоторых сложных эфиров // Вестник Национальной академии наук Республики Казахстан, 2010. - № 4. - С. 63-66.

## ОСОБЕННОСТИ СТРОЕНИЯ РАСТЕНИЯ EWERSMANNI BUNGE ИЗ СЕМЕЙСТВА LEONTICE

**Омирзакова Н.К., Датхаев У.М., Киекбаева Л.Н., Ахтаева Н.З., Бошкаева А.К.**

г. Алматы, НАО «Казахский национальный медицинский университет имени С.Д. Асфендиярова»,  
e-mail: [nazgul\\_omirzakova@mail.ru](mailto:nazgul_omirzakova@mail.ru)

Из перспективных Казахстанских эндемичных лекарственных видов растений практический интерес представляют роды Леонтице Эверсмана (*Leontice ewersmanni* Bunge) характеризующийся наличием разнообразных классов биологически активных веществ, которые не были подвергнуты систематическому исследованию, в связи с этим изучение химического состава, разработка методов выделения потенциально биологически активных веществ, использование собственных ресурсов лекарственного растительного сырья и создание на их основе высокоэффективных, конкурентоспособных и экономически доступных препаратов является актуальным.

Лекарственным сырьем являются клубни, которые собирают в феврале или начале марта. В клубнях находится 3,5% алкалоидов, среди них обнаружен алкалоид леонтамин, представляющий собой бесцветную жидкость, легко растворимую в эфире, бензоле и спирте. Родственные виды, в частности леонтица Эверсмана, содержат алкалоиды леонтамин, леонтидин и другие.

Леонтица Эверсмана (*Leontice ewersmannii* Bunge) — высота особей 30–40 см. Кистевидные соцветья многоцветковые, листья прикорневые в количестве 1–2, стеблевые — 2–5. В подземной части на глубине 25–35 см находится клубень яйцевидной формы диаметром 4–5 см. На клубне образуется множество тонких корешков диаметром до 1 мм, направленных горизонтально в стороны и одновременно углубляющихся вниз. Последние дают корни второго и третьего порядков. Глубина проникновения корней — 110–130 см, диаметр корневой системы — 90–135 см.

Группа леонтицевая растительность (*Leontice ewersmannii* Bunge) представлена разнотравно-эфемеровым типом. Леонтица Эверсмана распространены на не больших территориях Арысского района, на границах между зарослями Полыни цитварной и Полыни туранской 8 км к юга западу от населенного пункта Шагыр, по пологим склонам и равнинам на сероземах светлых южных обычных суглинистых. Вид распространен в высотном интервале 325–367 м над уровнем моря, где она входит состав первого яруса. Встречаются на кординатах Шагыр-1, в комплексе с разнотравно-эфемеровыми и эфемерово-разнотравно-цитварнополыными растительности. Доминант — Леонтица Эверсмана. Субдоминанты — эфемеры (мятлик луковичный, осока толстостолбиковая, костер безостый). Модификация образована с участием двучленника пузырчатого.

Фармакологические свойства растения отличается своей богатой структурой по гелановым продуктам. Гелановые продукты — экстракты и настои леонтицы — усиливают секреторную и моторную функции желудочно-кишечного тракта, малотоксичны. Применение этого растения в народной медицине широкое. В медицине используются клубни, собираемые в конце февраля — в начале марта. В народной медицине Грузии леонтице Смирнова — Отавник применяется для лечения туберкулеза. В Грузии Леонтице Смирнова называют «Круглым лекарством» так же применяется при заболеваниях желудка с пониженной Для лекарственных целей природные запасы достаточны. Ежегодный сбор клубней составляет 60–80 тонн. Растение служит ценным сырьем для получения спирта. В туркменской народной медицине из-за содержания алкалоидов (леонтоалбин, леонтамин, леонтидин, леонтин, леонтисин) применяется в виде крахмала при гипертонии, аменорее, метеоризме, камнях в мочеточниках.



**НОВЫЕ МЕТОДЫ СИНТЕЗА И ПРЕВРАЩЕНИЯ  
БИЦИКЛИЧЕСКИХ БИСМОЧЕВИН ПОД ДЕЙСТВИЕМ  
ОКСИЭТИЛИЛЕНДИДИСФОНОВОЙ КИСЛОТЫ**

**Паньшина С. Ю., Бакибаев А. А.**

*ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский Томский государственный университет»*

На основе бициклических бисмочевин (гликольурилов) в промышленных масштабах выпускают вещества, которые нашли применение в качестве дезинфицирующих компонентов, лекарственных препаратов, стабилизаторов в синтезе полимеров, взрывчатых веществ и их компонентов, и т. д.

Впервые разработан высокоэффективный и экологичный метод синтеза гликольурилов в воде с применением 1-оксиэтилидендифосфоновая кислоты (ОЭДФ) в качестве «зеленого» катализатора. В ходе изучения процесса образования гликольурилов идентифицированы промежуточные и побочные продукты, на основании, чего предложены вероятные маршруты реакций образования гликольурилов.

Изучено влияние фосфорсодержащих катализаторов на ход процесса N-ацетилирования гликольурила уксусным ангидридом и в результате анализа продуктов данной реакции высказано предположение о том, что с одной стороны ОЭДФ выступает как катализатор, а с другой стороны ведет себя как гидролизующий реагент. Предложена последовательность химических превращений протекания этих реакций, объясняющая двоякую роль ОЭДФ.

Показано, что использование ОЭДФ в реакциях N-нитрозирования некоторых гликольурилов обеспечивает существенно лучшие результаты, чем N-нитрозирование в присутствии минеральных кислот.

Установлено, что тетрагидроксиметилгликольурил подвергается дегидроксиметилированию, что позволило впервые использовать его в качестве мягкого и селективного метиленирующего реагента для синтеза ряда ароматических аминалей.

Найдено, что реакция тетрагидроксиметилгликольурила со спиртами под действием ОЭДФ приводит к образованию алкоксилированных димерных и тримерных продуктов – синтетических предшественников макромолекулярных и супрамолекулярных систем.

Обнаружено, что реакция гликольурила с параформальдегидом в присутствии ОЭДФ может выступать в качестве конкурентноспособного метода синтеза кукурбит [6] урила.



## МАТЕМАТИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ПРОЦЕССА ГИДРООЧИСТКИ ДИЗЕЛЬНОГО ТОПЛИВА КАК СЛОЖНОЙ МНОГОКОМПОНЕНТНОЙ РЕАКЦИОННОЙ СИСТЕМЫ

Самойлов Н.А.

Уфимский государственный нефтяной технический университет,  
e-mail: [naum.samoilow@yandex.ru](mailto:naum.samoilow@yandex.ru)

Гидроочистка дизельного топлива является одним из наиболее сложно исследуемых и моделируемых химических процессов в силу большого числа одновременно протекающих каталитических процессов (гидродесульфуризация, гидродеазотирование, гидрирование и др.), в которых участвуют сотни компонентов сырья различной природы. Данная статья ограничивается только анализом обессеривания дизельного топлива.

Пока требования к качеству дизельного топлива оставались низкими, грубая гидроочистка с невысокой точностью описывалась по закону действия масс как некая обобщенная квазигомогенная реакция первого порядка с константой скорости  $k$ , определяемой по изменению содержания общей серы в гидрогенерате во времени  $\tau$  по классическому уравнению

$$k = \frac{\ln(C_0/C)}{\tau}, \quad (1)$$

где  $C_0$  и  $C$  – соответственно совокупная концентрация исходных компонентов реакции сырья и их концентрация в продуктах реакции к моменту времени протекания реакции  $\tau$ .

Рассчитанная по уравнению (1) константа скорости объединения протекающих реакций достаточно условна и носит эффективный характер и ее правильнее записывать как  $k_{\text{эф}}$ , поскольку численное значение константы скорости опосредовано учитывает вседопущения неизбежно принимаемые при расчете кинетики процесса, в частности:

- постоянство скоростей локальных струй потока и гидродинамический режим идеального вытеснения в реакторе;
- стационарность процесса в течение проведения всего эксперимента;
- квазигомогенность системы газ-жидкость-твердое тело в реакторе;
- постоянство активности катализатора в каталитическом эксперименте.

По мере ужесточения требований к качеству дизельного топлива в соответствии с евростандартами и снижения уровня допустимого содержания серы с 500 до 10 ppm потребовалось существенно увеличить время контакта очищаемого топлива с катализатором и, как следствие, количество загружаемого в реактор гидроочистки катализатора. Эта ситуация требует при математическом моделировании процесса гидроочистки перехода от формального определения содержания общей серы в сырье к достаточно корректному учету состава топлива по гидрируемым сераорганическим соединениям из-за того, что скорость гидрирования различных компонентов существенно уменьшается в ряду меркаптаны > сульфиды > тиофены > бензотиофены > дибензотиофены, что весьма трудоемко и затратно..

Можно существенно сократить и упростить экспериментальную часть, если разделить исходное сырье на несколько узких фракций, в каждой из которых совокупность сераорганических веществ рассматривать как псевдокомпонент, концентрацию которого легко определять по анализу на общую серу [1 2].

При приборном исследовании и математическом моделировании реакционных сложных многокомпонентных систем преимущественно процесс классически исследуется при постоянном времени контакта сырья с катализатором с расчетом константы скорости реакции гидроочистки сырья как постоянной характеристики процесса, однако в немногочисленных исследованиях, выполняемых при варьировании объемной скорости подачи сырья (ОСПС) и времени контакта реакционной смеси с катализатором, наблюдаются ситуации, противоречащие классическим подходам – константа скорости реакции существенно изменяется в ходе процесса.

Ниже приводятся некоторые данные по наиболее детальным исследованиям гидроочистки дизельного топлива на пилотной установке на CoMo катализаторе, когда рассматривалось изменение содержания общей серы в гидрогенизате при постоянстве всех параметров процесса кроме ОСПС [3].

Наблюдаемое изменение  $k_{эф}$  во времени процесса позволяет считать, что химизм процесса гидроочистки в целом должен характеризоваться не вырождающимися по сущности постоянства константами скорости реакции, а переменными по величине **кинетическими характеристиками**  $K$ , изменяющимися в ходе процесса как зависимость  $K(\tau) = f(\tau)$ .

Анализ особенностей гидроочистки как реального, так и ряда вариантов модельного сырья позволяет сделать вывод, что в широком диапазоне распределения концентрации сераорганики по псевдокомпонентам независимо от его спецификационная от времени процесса около двух часов кривая изменения концентрации общей серы в гидрогенизате выходит на асимптоту к линии концентрации наиболее трудногидрируемого компонента. Это позволяет рекомендовать эксперименты по гидроочистке проводить при ОСПС не только при  $2\text{ ч}^{-1}$  и  $1\text{ ч}^{-1}$ , но и при  $0.5\text{ ч}^{-1}$ , чтобы обеспечить с одной стороны учет при моделировании лимитирующие глубину очистки в целом трудногидрируемые компоненты, а с другой – расчет нескольких значений  $K(\tau)$ , формирующих для дальнейшего анализа кинетической характеристики набор исходных данных.

Основой расчетов служат экспериментальные данные по гидроочистке дизельного топлива (фракция 160-300 °С), содержащей 9200 ppm общей серы, на Co-Mo катализаторе, выполненные при различном времени контакта сырья с катализатором при 350 °С, давлении 4 МПа и кратность циркуляции водородсодержащего газа  $200\text{ м}^3/\text{м}^3$  сырья (табл.1), приведенные в [3].

Расчет констант скоростей реакции гидродесульфуризации выполнялся по квазигомогенной модели изотермического реактора идеального вытеснения

$$\frac{dC}{d\tau} = -k_{эф}C - w \frac{dC}{dl}, \quad (1)$$

где  $w$  – скорость потока реакционной смеси. Модель учитывала распределение концентраций псевдокомпонентов  $C$  во времени  $\tau$  и длине  $l$  от начальной  $C_{вх}$  до конечной  $C_{вых}$  концентраций суммы сераорганики по общей сере, рассматриваемой как псевдокомпонент.

**Таблица 1**– Кинетика гидроочистки дизельного топлива

ОСПС, $\text{ч}^{-1}$	Условное время контакта, ч	Содержание серы, ppm
1	1.000	150
2	0.500	250
3	0.333	400
4	0.250	500
5	0.200	600
6	0.162	700
7	0.147	900
$\infty$	0	9200

Тогда константа скорости реакции  $k_{эф}$  изменяется во времени процесса (рис. 1,а) и находится как

$$k_{эф} = \frac{\ln(C_0/C)}{\tau}, \quad (2)$$

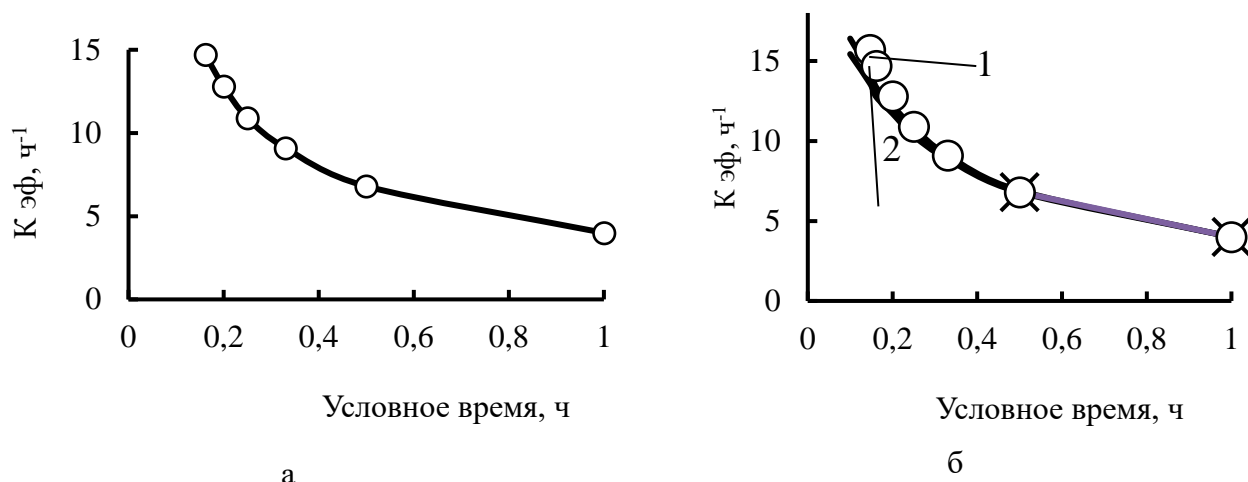
где  $C_0$  и  $C$  – соответственно совокупная концентрация исходных компонентов реакции в сырье и их концентрация в продуктах реакции к моменту времени протекания реакции  $\tau$ .

Кинетическая характеристика типа  $K(\tau)=f(\tau)$  аппроксимируется уравнением вида

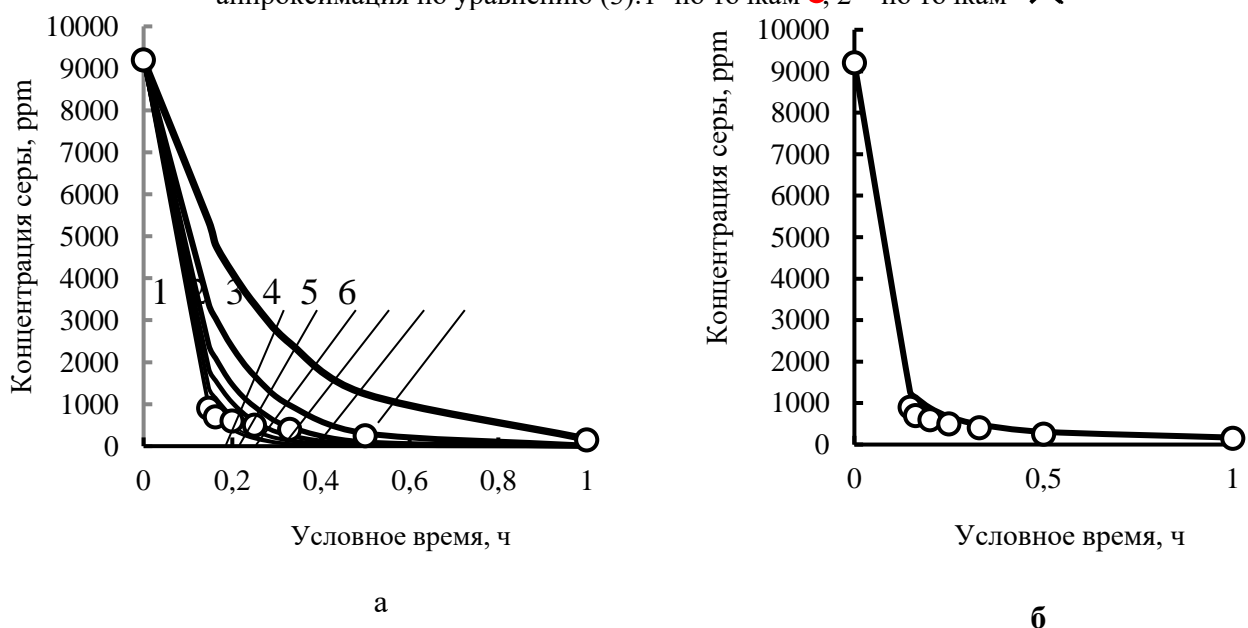
$$K(\tau) = \frac{A}{1+B\tau}, \quad (3)$$

где  $A$  и  $B$  – коэффициенты, которые с удовлетворительной точностью могут быть рассчитаны даже по двум расчетным значениям  $K_{эф}$ , полученным при различных значениях ОСПС (рис. 1,б).

Расчет кинетики гидроочистки показал, что при использовании в модели локальных значений эффективных констант скорости реакции  $K_{эф}$  получают комплект независимых кинетических кривых, каждая из которых близка экспериментальным данным только в окрестности времени фиксации  $K_{эф}$  (рис.2,а).



**Рисунок 1**– Зависимость эффективных констант скорости реакции  $K_{эф}$  от времени (а) и ее аппроксимация по уравнению (3): 1- по точкам ●, 2 – по точкам ×



**Рисунок 2** – Расчет кинетики гидроочистки по константам  $K_{эф}=15.7(1), 14.7(2), 12.8(3), 10.9(4), 9.1(5), 6.8(6)$  (а) и по кинетической характеристике (б); точки –опытные данные в точке расчета соответствующих  $K_{эф}$ .

При использовании в модели кинетической характеристики, динамично отражающей поведение реального сложного процесса гидроочистки, расчеты по модели достаточно валидны (рис. 2,б).

### Литература

1. *Samoilov N. A., Zhilina V. A.* On the formation of organosulfur pseudo-components in the raw materials of the diesel fuel hydrotreating process // *Progress in petrochemical science.* – 2020. – V. 3. – № 5. –Р. 380-381.
2. *Самойлов Н. А., Жилина В. А.* Принципы формирования сераорганических псевдокомпонентов при расчете процесса гидроочистки дизельного топлива. // *Башкирский химический журн.* – 2020. – № 4. –С. 42-48
3. *Логинов С.А., Лебедев Б.Л., Капустин В.М., Луговской А.И., Курганов В.М., Рудяк К.Б.* Разработка новой технологии процесса гидрообессеривания дизельных топлив // *Нефтепереработка и нефтехимия.* 2001. № 11. С. 67-74.

## ОСОБЕННОСТИ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СЛОЖНЫХ РЕАКЦИОННЫХ СИСТЕМ ПО КИНЕТИЧЕСКИМ ХАРАКТЕРИСТИКАМ

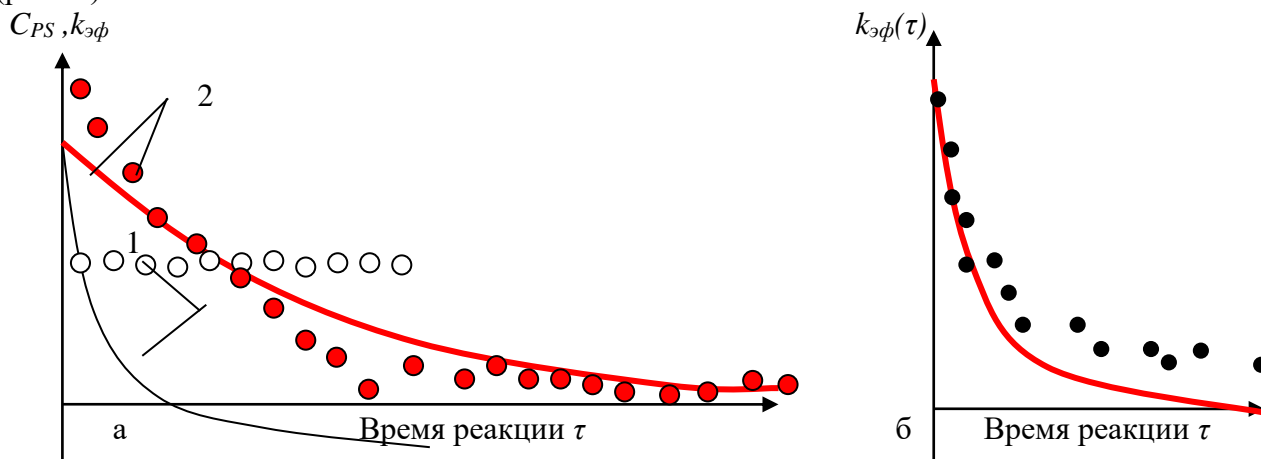
Самойлов Н.А.

Уфимский государственный нефтяной технический университет,  
e-mail: [naum.samoilow@yandex.ru](mailto:naum.samoilow@yandex.ru)

Особенностью математического моделирования сложных многокомпонентных реакционных систем, таких как каталитической крекинг, гидроочистка топлив, коксование нефтяных остатков, окисление битума является практическая невозможность создания четкой детерминированной модели процесса в силу следующих факторов:

- большое число различных компонентов сырья, вступающих в целевые реакции (например, сераорганика в процессе гидроочистки) с различной реакционной активностью;
- сложные маршруты реакций с образованием промежуточных продуктов;
- многофазность реакционной системы (газовые реагенты, жидкое сырье, твердый катализатор), которая часто не позволяет даже достаточно точно рассчитать время реакции в кинетических исследованиях, из-за чего применяется условный параметр «средний объемный расход основного сырья на единицу объема катализатора в реакторе за час или кратко - объемная скорость подачи сырья – ОСПС» ( $\text{ч}^{-1}$ ), обратная величина которого пропорциональна времени контакта сырья с катализатором и экспериментальное исследование выполняют только при 1-2 значениях ОСПЧ.

Совокупность этих факторов не позволяет использовать при математическом моделировании классический закон действия масс с определением, например численных констант скорости реакции по расходу сырья или образованию новых компонентов, поскольку в ходе реакционного процесса в реакционной смеси происходит вначале реакция с наиболее активными компонентами сырья и, соответственно, с высокими константами скорости реакции, и лишь затем начинают заметно реализовываться медленные реакции с низкими константами скорости реакции. Таким образом, в ходе сложного процесса рассчитываемые константы скорости реакции изменяются неопределенным образом (рис.1а).



**Рисунок 1**– Кинетика мономолекулярной (1) и сложной (2) реакций (а) [линии – кинетика, точки – константы скорости реакции] и формирование кинетической характеристики сложной реакции (б) [линия – аппроксимация  $k_{эф}(\tau)=f(\tau)$ ].

В связи с этим предлагается для сложных процессов перейти от понятия константы скорости реакций к понятию кинетической характеристики процесса как закона непрерывного изменения констант скорости реакции (рис.1б). Введение его в математическую модель сложного химического процесса позволяет одновременно упростить модель и корректировать ее результативность. Для повышения точности

моделирования предлагается разделять сырье на несколько узких фракций с формированием кинетической характеристики псевдокомпонента, участвующего в реакции как совокупности сырьевых компонентов данной узкой фракции. Тогда математическая модель сложного химического процесса, например, гидроочистки примет вид:

$$\left. \begin{aligned} \frac{dC_{S1}}{d\tau} &= -k_{\text{эф}1}C_{S1} \\ \frac{dC_{S2}}{d\tau} &= -k_{\text{эф}2}C_{S2} \\ &\dots \\ \frac{dC_{Si}}{d\tau} &= -k_{\text{эф}i}C_{Si} \\ &\dots \\ \frac{dC_{Sm}}{d\tau} &= -k_{\text{эф}m}C_{Sm} \end{aligned} \right\} \quad (1)$$

$$C_{PS} = C_{S1} + C_{S2} + \dots + C_{Sm} \quad , \quad (2)$$

$$\frac{dC_{PS}}{d\tau} = K(\tau)C_{PS} \quad , \quad (3)$$

где  $C_{Si}$  и  $k_{\text{эф}i}$  – соответственно концентрация сераорганического  $i$ -го компонента и эффективная константа скорости  $i$ -й реакции гидрогенолиза при известных  $m$  сераорганических компонентах в сырье гидроочистки или соответственно концентрация сераорганического  $i$ -го псевдокомпонента по общей сере и константа скорости  $i$ -й реакции гидрогенолиза  $i$ -го псевдокомпонента при принятых  $m$  сераорганических псевдокомпонентах в сырье гидроочистки;  $C_{PS}$  – текущая концентрация сераорганики в гидрогенизате по общей сере;  $K(\tau)$  – кинетическая характеристика в виде зависимости, формализующей изменение  $k_{\text{эф}i}$  во времени  $\tau$ .

Анализ результатов расчета ряда гипотетических сложных смесей и процесса гидроочистки дизельного топлива показал, что кинетическая характеристика типа  $K(\tau)=f(\tau)$  аппроксимируется гиперболическим уравнением вида

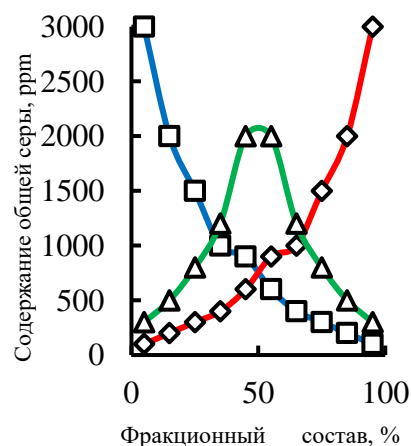
$$K(\tau) = \frac{A}{1+B\tau}, \quad (4)$$

где  $A$  и  $B$  – коэффициенты, которые с удовлетворительной точностью могут быть рассчитаны даже по двум расчетным значениям  $k_{\text{эф}}$ , полученным при различных значениях ОСПЧ.

В данной работе эта задача рассмотрена как анализ кинетической характеристики для трех вариантов модельного сырья (табл.1, рис.2).

**Таблица 1** – Характеристика вариантов модельного сырья гидроочистки

Номер псевдокомпонента	Константа скорости реакции, ч <sup>-1</sup>	Содержание сераорганики в псевдокомпоненте, ppm		
		вариант 1	вариант 2	вариант 3
1	19	3000	100	300
2	17	2000	200	500
3	15	1500	300	1000
4	13	1000	400	1200
5	11	900	600	2000
6	9	600	900	2000
7	7	400	1000	1200
8	5	300	1500	1000
9	3	200	2000	500
10	1	100	3000	300



**Рисунок 2**– Концентрирование серы во фракциях сырья: легкой (1), тяжелой (2) и средней (3).

Адекватность описания зависимости  $k_{\text{эф}}(\tau)=f(\tau)$  уравнением (4) оценивалась по величине критерия Фишера  $F$ :

$$F = \frac{S_y^2}{S_M^2} = \frac{(\sum_{i=1}^{i=N} (y_i - \bar{y})^2) / (N-1)}{(\sum_{i=1}^{i=N} (y_i - \hat{y}_i)^2) / (N-2)}, \quad (5)$$

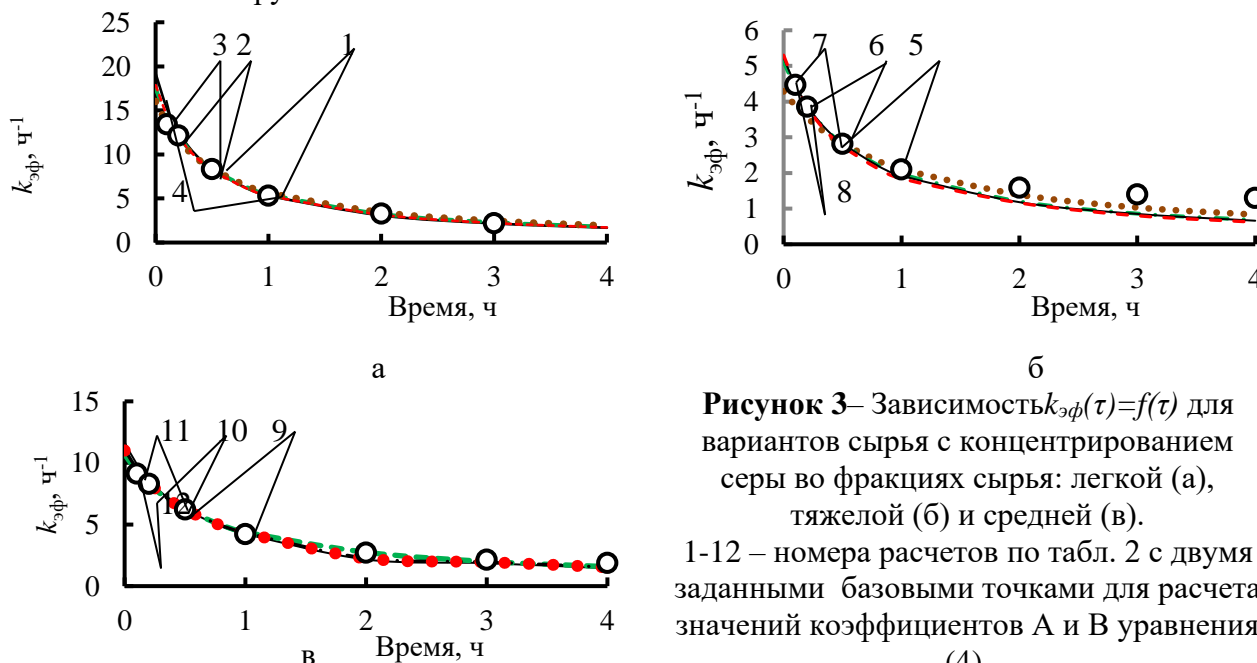
где  $S_y^2$  и  $S_M^2$  – дисперсии,  $N$  – число опытных значений  $k_{эф}$ ,  $y_i$  – опытное значение  $k_{эф,i}$ ,  $\bar{y}$  – среднее значение опытных  $k_{эф}$ ,  $\hat{y}_i$  расчетное значение  $K(\tau)$  по уравнению (4).

Уравнение (4) адекватно, если критерий Фишера, рассчитанный по (5) больше табличного значения  $F_T$  (табл. 2).

**Таблица 2** – Оценка адекватности уравнения (4)

Сырье	Номер расчета	$\tau_1$ , ч	$\tau_2$ , ч	A	B	$S_y^2$	$S_M^2$	F	$F_T$
1	1	0.5	1	19.18	2.60	22.5	0.89	25.3	6.26
	2	0.2	0.5	17.46	2.19		0.18	125.0	
	3	0.1	0.5	16.03	1.85		0.13	173.1	
	4	0.2	1	17.86	2.35		0.24	93.7	
2	5	0.5	1	4.29	1.04	1.58	0.169	9.35	4.95
	6	0.2	0.5	5.12	1.63		0.170	9.29	
	7	0.1	0.5	5.23	1.71		0.124	12.7	
	8	0.1	0.2	5.30	1.83		0.144	10.9	
3	9	0.5	1	11.67	1.75	9.41	0.178	52.86	4.95
	10	0.2	0.5	10.70	1.44		0.016	588.1	
	11	0.1	0.5	11.00	1.54		0.075	125.5	
	12	0.1	0.2	11.02	1.55		0.075	125.5	

Как показано на рис.3, для каждого вида сырья выполнено по четыре варианта расчета  $k_{эф}(\tau)=f(\tau)$  с различными базовыми точками  $\tau_1$  и  $\tau_2$ . Результаты расчета по (4) достаточно близки, основные расхождения между вариантами наблюдаются при  $\tau = 0-0.3$  ч, что не влияет на результаты моделирования процесса гидроочистки, инвариантного по отношению к выбору базовых точек.



**Рисунок 3**– Зависимость  $k_{эф}(\tau)=f(\tau)$  для вариантов сырья с концентрированием серы во фракциях сырья: легкой (а), тяжелой (б) и средней (в). 1-12 – номера расчетов по табл. 2 с двумя заданными базовыми точками для расчета значений коэффициентов A и B уравнения (4).

## ИЗУЧЕНИЕ ПРОЦЕССА СОРБЦИИ СУЛЬФАТ-ИОНОВ КИСЛОТО- И ХИТОЗАНМОДИФИЦИРОВАННЫМИ ЦЕОЛИТАМИ

Султанбаева Г.Ш., Джусипбеков У.Ж., Кусаинова М.Ж., Кайынбаева Р.А.,  
Кожобекова Н.Н.

г. Алматы, АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова», e-mail: [sultanbaeva@mail.ru](mailto:sultanbaeva@mail.ru)

Известно, что природные воды и кислые отходы многих производств, а также фосфорные кислоты загрязнены  $\text{SO}_4^{2-}$  анионами. Кроме того, одним из трех основных анионов солевого состава воды являются сульфаты, превышение содержания которых происходит одновременно с повышением общей жесткости и общего солесодержания. Потребность очистки воды от сульфатов возникает при подготовке технологической воды для производств, а также подготовке питьевых вод в частных домах и крупных объектах промышленности. Наиболее подходящим и дешевым способом является сорбционный метод с использованием недорогих и доступных сорбентов, обладающих хорошими сорбционными свойствами. В этом плане перспективными являются цеолиты. Их применение в разных областях науки и технологии основано на ионообменных свойствах. Использование цеолита в процессах очистки воды от сульфатов возможно, однако для повышения его анионнообменной способности необходима предварительная модификация. Модификация природного цеолита позволит получить новый сорбент с улучшенными сорбционными характеристиками.

В данной работе проведена модификация Шанканайского цеолита соляной кислотой и хитозаном различной концентрации с их дальнейшей сушкой при различной температуре и анализ анионнообменных характеристик полученных сорбентов по отношению к  $\text{SO}_4^{2-}$  анионам.

Исследована сорбционная способность модифицированных соляной кислотой и хитозаном цеолитов по отношению к сульфат-ионам в зависимости от ряда основных факторов процесса (времени, температуры и концентрации  $\text{SO}_4^{2-}$  ионов) методом математического планирования (ортогональный рототабельный 3-х факторный эксперимент 2-го порядка) [1,2].

Переменными факторами процесса являлись: время, температура и концентрация  $\text{SO}_4^{2-}$  ионов. Постоянным фактором взято соотношение «сорбент (Т): сульфатсодержащий раствор (Ж)» равное 10: 100. Определяемым параметром являлось остаточное содержание  $\text{SO}_4^{2-}$  ионов ( $Y_{\text{SO}_4}$ ) в исследуемой системе «модифицированный цеолит - сульфатсодержащий раствор» после их сорбции сорбентами.

Анализ полученных данных показал, что оба модифицированных цеолита сорбируют сульфат-ионы из исследуемой системы. С использованием компьютерной обработки экспериментальных данных проведён регрессионный анализ по [3]. Графическая обработка полученных результатов показала, что кривые сорбции  $\text{SO}_4^{2-}$  анионов кислотомодифицированным цеолитом для каждого из исследуемых факторов в каждом блоке носят однотипный характер. Сорбционные кривые от времени носят экстремальный характер с минимумом при (40-45) мин. Снижение или повышение времени способствует росту остаточного содержания сульфат-ионов в жидкой фазе системы. Например, при 20°C из раствора с  $C_{\text{SO}_4} = 6,38\%$  за 5 мин сорбируется 1,83 %  $\text{SO}_4^{2-}$  анионов ( $K_c=28,7$  %), за 45 мин – 2,18 %  $\text{SO}_4^{2-}$  ( $K_c=27,9$  %) и за 60 мин – 1,85 %  $\text{SO}_4^{2-}$  ( $K_c=29,0$  %).

С ростом температуры до 40°C кривые сорбции возрастают и далее остаются практически постоянными с небольшой тенденцией к снижению. То есть, при низкой температуре (20°C) сорбируется большая часть  $\text{SO}_4^{2-}$  ионов. Например, за 5 мин из раствора с  $C_{\text{SO}_4} = 6,38$  % при 20°C сорбируется 3,19 %  $\text{SO}_4^{2-}$  анионов ( $K_c=50$  %), при 40°C – 1,83 %  $\text{SO}_4^{2-}$  ( $K_c=28,7$  %) и при 70°C - 1,88 %  $\text{SO}_4^{2-}$  ( $K_c=29,5$  %).

Во всем исследуемом интервале времени и для всех температур с ростом концентрации  $\text{SO}_4^{2-}$  ионов до 4,0 % остаточное содержание сульфат-анионов в жидкой фазе



исследуемой системы возрастает, соответственно степень сорбции уменьшается. В сульфатсодержащих растворах с  $C(SO_4)$  свыше 4% остаточное содержание сульфат-анионов остается практически постоянным. То есть, в таком растворе процесс сорбции достигает максимума и в более концентрированных системах сорбция  $SO_4^{2-}$  ионов практически не повышается. Так, если в низкоконцентрированных сульфатсодержащих растворах (до 1,5 %  $SO_4^{2-}$ ) степень сорбции может достигать (99-100 %), то в растворах с  $C(SO_4)=5$  % степень сорбции не будет превышать (36-44) %, а с  $C(SO_4)$  равном 8 % - (59,6-65,0) %. В растворах, содержащих от 0 до 1,5 %  $SO_4^{2-}$  ионов, максимальная степень сорбции (99,5-100,0 %) во всем исследуемом интервале времени (5-60) мин достигается при (20-70)°С.

Далее исследовали влияние времени, температуры и концентрации  $SO_4^{2-}$  анионов на процесс их сорбции модифицированным хитозаном цеолитом.

На процесс сорбции цеолитом, модифицированным хитозаном, наибольшее влияние оказывает концентрация сульфат-ионов.

Из полученных результатов следует, что на сорбцию сульфат-анионов время процесса не влияет. Кривые сорбции имеют прямолинейный характер и расположены параллельно оси абсцисс. Анионы  $SO_4^{2-}$  сорбируются хитозанмодифицированным цеолитом за первые 5-10 мин процесса. Например, из раствора с  $C(SO_4^{2-})$  равной 6,38 % независимо от времени при 20°С сорбируется 2,07 %  $SO_4^{2-}$  анионов ( $K_c=32,4$  %), при 30°С – 1,83 % ( $K_c=28,68$  %), 70°С – 0,7 % ( $K_c=10,97$  %). С повышением температуры процесса остаточное содержание  $SO_4^{2-}$  анионов в исследуемой системе повышается незначительно, соответственно степень сорбции изменяется в небольших пределах. Так, для всех исследуемых концентраций с повышением температуры процесса от 20 до 70°С остаточное содержание  $SO_4^{2-}$  анионов увеличивается с 4,37 до 5,32 %, соответственно  $K_c$  уменьшается с 31,5 до 16,6 %.

Кривая сорбции  $SO_4^{2-}$  анионов в зависимости от их концентрации в исследуемой системе носит экстремальный характер с максимумом при  $C(SO_4^{2-})$  равной 5,5%. Уменьшение либо увеличение концентрации сульфат-ионов приводит к снижению их остаточного содержания в растворе, соответственно к повышению степени сорбции. Например, при концентрации в растворе  $SO_4^{2-}$  анионов равной 2,0 % после сорбции их остаточное содержание равно 1,8 %, при  $C(SO_4^{2-})$  равной 5,5 % - 4,5 %, а при  $C(SO_4^{2-})$  равной 8,0 % - 3,0 %  $SO_4^{2-}$ .

Сравнение сорбционной способности кислотомодифицированного цеолита с модифицированного хитозаном цеолитом показало, что первый сорбент проявляет высокие сорбционные свойства в слабокислых (до 1,5 %  $SO_4^{2-}$ ) сульфатсодержащих растворах. Однако и в растворах с более высоким содержанием анионов  $SO_4^{2-}$  сорбционная способность кислотомодифицированного цеолита по отношению к ним выше, чем у цеолита, модифицированного хитозаном. При этом на процесс сорбции хитозанмодифицированного цеолита не оказывает влияние время и температура, в то время как для кислотомодифицированного цеолита эти факторы оказывают существенное влияние.

## Литература

1. Liu Y. L., Hsu C. Y., Su Y. H., Lai J. Y. Chitosan-silica complex membranes from sulfonic acid functionalized silica nanoparticles for pervaporation dehydration of ethanol-water solutions // *Biomacromolecules*.-2005.- Vol.6, №1. - P.368-373.
2. Ахназарова С.Л., Кафаров В.В. Оптимизация эксперимента в химии и химической технологии. - М., 1978. - 319 с.
3. Умирбаева Р.С., Шевко В.М. Применение метода рототабельного планирования экспериментов второго порядка в изучении разрушения шламовой структуры твердофазными сорбентами // *Механика и моделирование процессов технологии*. - Жамбыл, 1996. - № 2. - С. 219-223.

## ПРИМЕНЕНИЕ УЛЬТРАЗВУКА В РЕГЕНЕРАЦИИ ОТРАБОТАННЫХ МОТОРНЫХ МАСЕЛ

Сырманова К.К., Ковалева А.Е., Калдыбекова Ж.Б., Байжанова Ш.Б.

г. Шымкент, Южно-Казахстанский университет им. М. Ауэзова, e-mail: [anastasiya2301@mail.ru](mailto:anastasiya2301@mail.ru)

Моторное масло может быть рассмотрено как неотъемлемая часть техники и как конструкционный материал. По завершению срока эксплуатации появляются значительные объемы отработанных моторных масел, которые в настоящее время являются одним из основных типов техногенных отходов, которые оказывают негативное влияние на окружающую среду [1].

До 50 процентов от используемых смазочных материалов необратимо теряется в ходе эксплуатации техники: испаряется, сгорает в двигателях, проливается, смывается и т.д. Остальные 50 процентов подвергаются сильным изменениям под действием условий эксплуатации и подлежат удалению из техники.

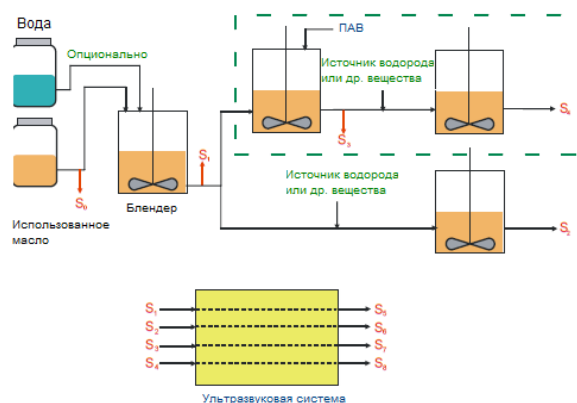
В моторных маслах при работе двигателя активно происходят термохимические процессы, которые приводят к понижению качества масла по причине срабатывания присадок и образования продуктов превращений (нерастворимые продукты) [2].

Схема старения моторного масла во многом зависит от конструкционных особенностей двигателя, а также характера процесса его работы. Например, термохимические превращения, происходящие в маслах, в случае дизельного двигателя, обусловлены наличием продуктов неполного сгорания топлива, сажи, содержанием серы в топливе, а в бензиновых – оксидов азота, продуктов превращения топлив, содержащих антидетонаторы и т.д [3].

Проведенные исследования возможности снижения содержания в отработанных моторных маслах ароматических и полиароматических углеводородов с помощью ультразвукового излучения подтвердили эффективность технологии при последующей адсорбционной доочистке вермикулитовым сорбентом.

Установлено, что указанные виды воздействий позволяют значительно снизить содержание металлов и полиароматических углеводородов в составе смазочных средств.

Затем соответствующее количество отработанных проб масла (75 мл) помещалось в пробирки для обработки ультразвуком или в смеситель для получения образцов эмульсии (в зависимости от содержания воды). На рис. 1 представлена схема воздействия ультразвука на образцы отработанного масла.



**Рисунок 1**– Экспериментальная установка по изучению влияния ультразвука на отработанное моторное масло.

Для отбора навесок из образцов отработанного моторного масла, полученного из разных источников, емкости для хранения и бутылки встряхивались с инверсией в течение 30 секунд, а затем выдерживались в покое 15 секунд. Это позволяло осесть крупным

частицам, но сохраняло образцы других компонентов в гомогенном состоянии.

Для каждого образца отработанного масла, чтобы узнать, достаточны ли условия эмульгирования для эффективной реакции ультразвуковой обработки, изучалось эмульсионное состояние «вода-масло» под микроскопом. Также было измерено содержание воды в исходном отработанном масле для достижения состояния эффективного образования пузырьков и мицелл в эмульсии вода-в-масле, чтобы ультразвуковая обработка могла разрушить загрязняющие вещества или стимулировать их разложение. Рекомендуемое содержание воды в эмульсии – 15-20%. В случае наличия в исходном образце меньшего количества воды, необходимо довести этот показатель до рекомендуемого путем разбавления. В некоторых случаях положительное влияние оказывает введение в систему эмульгатора.

Навеску отработанного моторного масла массой 75 г переносили в 125-мл реакционную емкость и подвергали ультразвуковой обработке. Водяная баня используется для поддержания рабочей температуры при  $25 \pm 5^\circ\text{C}$ . Во время процесса обработки ультразвуком вводили сжатый аргон со скоростью  $5 \text{ м}^3/\text{мин}$ . Перед началом обработки, в систему вводится раствор 1% вес. перекиси водорода для предотвращения быстрого выделения водорода из образца и получения достаточного количества радикалов в системе.

В процессе ультразвуковой обработки, являющейся сонохимическим воздействием, коагулированные асфальто-смолистые вещества разрушаются до молекулярного состояния. Отделяются от механических примесей смолистые составляющие. Время ультразвукового воздействия может варьироваться от массовой доли механических примесей в отработанном моторном масле.

Далее активированное масло планируется направлять на фильтр адсорбционной очистки. Аппаратное оформление адсорбционной очистки отработанных моторных масел включает комплекс оборудования и его обвязки, обеспечивающий следующие технологические операции: подачу сточных вод в адсорбер, контакт масла с вспученным вермикулитовым сорбентом в адсорбере, отделение очищенного масла от адсорбента и его вывод из адсорбционной аппаратуры, вывод отработанного адсорбента из адсорбера с утилизацией или регенерацией его, загрузку в адсорбер чистого адсорбента.

Вермикулиты характеризуются высокой адсорбционной способностью поглощать продукты окисления углеводородов — смолы, кислородные и другие гетероорганические соединения. Рекомендуется, использовать активированный вермикулит, т.к. при активации происходит растворение значительной части оксидов магния, железа, алюминия, и за этот счет содержание  $\text{SiO}_2$  в образцах увеличивается, что влечет повышение поглотительной способности [4].

Исходя из дисперсного состава адсорбента (вермикулита) и фильтрующей загрузки, выбрали принципиальную конструкцию адсорбционных установок с неподвижной загрузкой, через которую масляной поток фильтруется нисходящим потоком со скоростью до 10 м/ч.

Полученные в результате комплексной обработки отработанных моторных масел данные, свидетельствуют о том, что способ обеспечивает эффективную регенерацию масла, т.к. наблюдается снижение содержания металлов, ароматических и полиароматических углеводородов в составе масла (табл. 1), также адсорбционная доочистка вермикулитовым сорбентом позволяет значительно снизить содержание механических примесей и воды.

Используемый комбинированный фильтр-адсорбер легко регенерируется водой, нагретой до  $60^\circ\text{C}$ , а вермикулит не теряет своих свойств после многократных циклов «очистки-регенерации».

**Таблица 1**–Физико-химические свойства моторных масел

Показатели	Отработанные моторные масла		Регенерированные моторные масла	
	№1	№2	№1	№2
Вязкость, мм <sup>2</sup> /с - при 40 °С - при 100 °С	60,59 9,52	59,74 9,57		
Содержание механических примесей, %, не более	0,087	0,072	0,016	0,023
Содержание воды, %, не более	0,03	0,01	-	-
Температура вспышки, °С, не менее	190	205	205	217
Температура застывания, °С, не более	-23	-22	-29	-30
Плотность, кг/м <sup>3</sup> , не более	880	882	875	877
Содержание (ppm): - серы; - бензола; - толуола; - ксилола; -полиароматические углеводороды.	0,3139 23,4 406 823 11,8	0,3443 12,8 307 594 7,8	0,2432 - - - -	0,2156 - - - -
Содержание (ppm): - свинец (Pb); - цинк (Zn); - алюминий (Al); - кальций (Ca); - магний (Mg); - медь (Cu); - хром (Cr).	21,16 402,96 57,94 171,94 436,12 37,85 18,26	10,69 387,56 41,36 203,12 440,96 32,48 7,95	0,98 140,99 12,65 67,54 124,36 3,54 5,89	0,89 138,25 11,03 63,41 122,15 3,03 2,18

Способ регенерации отработанных моторных масел путем ультразвуковой обработки в условиях диспергирования асфальтосмолистых соединений с последующей очисткой вермикулитовым сорбентом универсален, т.к. применим для различных сортов масел, а также обеспечивает эффективную регенерацию масла по экологически чистой, не энергоемкой и дешевой технологии.

### Литература

- Капустин В.М., Тонконогов Б.П., Фукс И.Г. Технология переработки нефти: Учеб. пособие. В 4-х частях. Часть третья. Производство нефтяных смазочных материалов. – М.: Химия, 2014. – 328 с.
- Ковальский. Б. П. Методы и средства повышения эффективности использования смазочных материалов / Б. П. Ковальский. - Новосибирск : Наука. 2005. - 341 с.
- Лашхи В.Л.,Меджибовский А.С., Мещерин Е.М., Шор Г.И. Повышение работоспособности моторных масел в условиях эксплуатации – М.: ГОСНИТИ, 2003. – с. 52.
- Malis J., Kristkova M. Structure of vermiculite modified by organic molecules //Acta Geodyn. Geomater.-2005.- Vol.2, №.2. -P.105-111.

## ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ РЕЗИНОВОЙ КРОШКИ ТОО «ЭКО-ШИНА» В КАЧЕСТВЕ КОМПОНЕНТА АСФАЛЬТОБЕТОННЫХ СМЕСЕЙ В ДОРОЖНОМ СТРОИТЕЛЬСТВЕ

**Сырманова К.К.<sup>а,б</sup>, Алипбекова Ж.К.<sup>а</sup>, Калдыбекова Ж.Б.<sup>а</sup>, Байжанова Ш.Б.<sup>а</sup>,  
Боташев Е.Т.<sup>а</sup>, Агабекова А.Б.<sup>б</sup>**

<sup>а</sup> г.Шымкент, Южно-Казахстанский университет им.М.Ауэзова

<sup>б</sup> г.Шымкент, Университет «Мирас»

<sup>с</sup> г. Кентау, Казахско-немецкий политехнический колледж,  
e-mail: [syrmanova.kulash@mail.ru](mailto:syrmanova.kulash@mail.ru)

Анализ современных представлений о структуре нефтяных битумов и полимерно-битумных вяжущих показал, что перспективным направлением модификации битумов является использование добавок резиновой крошки. В связи с этим поиск эффективной технологии для получения резино-битумных вяжущих на основе местных материалов и техногенных отходов из отработанных шин является актуальной проблемой.

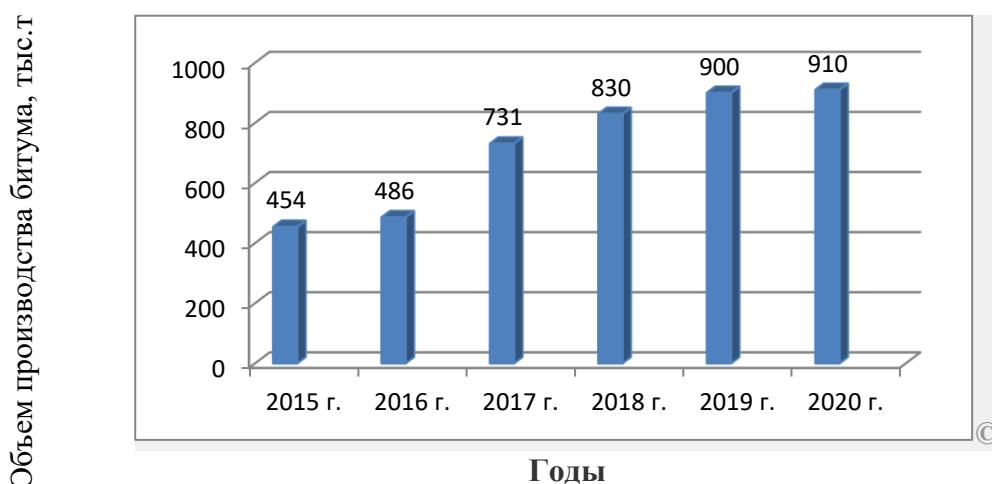
В статье приведены экспериментальные данные изменения основных эксплуатационных характеристик резино-битумных вяжущих - глубина проникновения иглы, при 0<sup>0</sup>С и 25<sup>0</sup>С, температура размягчения по кольцу и шару, растяжимость и эластичность, приготовленных в зависимости от времени смешения в температурном диапазоне 150-220<sup>0</sup>С в смесителе.

Как известно, наиболее универсальным материалом для применения в качестве вяжущего при устройстве дорожных покрытий, является нефтяной битум, благодаря способности выдерживать без разрушения воздействие низких температур, температурных перепадов, различных деформационных нагрузок. В настоящее время в Казахстане работают 4 завода по производству дорожного битума, суммарной мощностью 1,2 млн тонн в год [1]. Отечественное производство полностью обеспечивает потребность дорожной отрасли. В 2016 году запущено основное производство битума на предприятии Каспийбитум. Анализ основных показателей Министерства энергетики РК за 2016-2019 годы показал, что объем производства битума с 2015 года вырос в 2 раза (рисунок 1).

В последнее время все большее распространение получают технологии модификации нефтяных битумов различными полимерами, в том числе и резиновой крошкой. И если большинство полимеров, применяемых для модификации битумов, представляют собой продукцию химической промышленности, что не может не отражаться на повышении стоимости вяжущих, то резиновая крошка представляет собой продукт механической переработки резинотехнических многотоннажных отходов, имеющий стоимость, сопоставимую со стоимостью нефтяного битума. Согласно ориентировочным данным, в Европе ежегодно образуется около 2 млн т, а в США – 2,8 млн т изношенных шин [2].

Данная проблема имеет важное экологическое значение. В настоящее время изношенные шины практически полностью уничтожаются путем сжигания или захоронения в оврагах, свалках, что сильно загрязняет окружающую среду. Например, в Швейцарии отходы автопокрышек сжигаются почти полностью, а в США – 75 – 80 % [3]. В России 96 % отработанных автопокрышек просто вывозится на свалки. Необходимо также учитывать тот факт, что шины обладают высокой пожароопасностью. Кроме очевидного вреда от разлагающейся резины и проникновения в воздух, воду и землю, в одной тонне старых покрышек содержится около 650 кг резины и до 340 кг корда, которые можно использовать снова, тем самым экономя природные ресурсы. Ежегодный объем образования изношенных шин в РК: 100,000 тонн. Объем переработки изношенных шин (в 2016 году), % 13-15%. Годовая суммарная производственная мощность реально действующих предприятий РК по переработке изношенных шин (приблизительно) 60,000 тонн. По предприятию «ЭКО Шина» переработка изношенных шин составляет 4000 тонн в год, а выпуск резиновой

крошки - 3200 тонн в год[4].



**Рисунок 1** – Развитие битумной отрасли Республики Казахстан за 2015-2020 гг.

Сопоставительные исследования эффективности разных способов модификации битумов показали, что перспективным направлением модификации битумов является использование добавок резиновой крошки. Конечные свойства РБВ зависят от многих факторов, основными из которых являются количественное соотношение и качество исходных компонентов, последовательность их смешивания, аппаратное оформление, а также температурно-временной режим процесса. Благодаря многочисленным исследованиям известно, что оптимальная температура (в зависимости от свойств исходных компонентов) для приготовления полимерно-битумных вяжущих при модификации полимерами, находится в интервале 160–200°C. Температурный режим влияет на продолжительность общего процесса, а также на конечные свойства получаемого продукта, поэтому подбор оптимальной температуры смешивания компонентов является одной из приоритетных задач при формировании технологического регламента установки. При высокой температуре процесс диспергирования резиновой крошки протекает с большой скоростью, и производительность установки модифицирования, таким образом, повышается. Но при этом могут иметь место нежелательные процессы, связанные с окислением битума и термодеструкцией полимерных молекул [5]. Также верхний предел температуры ограничивают в соответствии с нормами пожарной безопасности, принимая во внимание температуру вспышки наиболее легких компонентов смеси. Нижний предел температуры диспергирования полимера для введения в битум устанавливают, исходя главным образом из продолжительности процесса. Длительное смешивание приводит к нерациональным тратам времени, энергетических ресурсов и в итоге к низкой рентабельности производства. Таким образом, подбор оптимальной температуры смешивания является актуальной задачей при проектировании процесса производства полимерно-битумных материалов. На основе экспериментальных данных проводили определение оптимальной температуры введения модифицированной резиновой крошки в битум на основе анализа кривой зависимости времени смешивания от температуры в смесителе. Известно, что при увеличении температуры смешивания компонентов время, затрачиваемое на диспергирование резиновой крошки, уменьшается неравномерно, а зависимость имеет вид кривой, по которой можно установить наиболее приемлемые условия технологического процесса. Для построения этой зависимости потребовалось приготовить серию образцов РБВ при различной температуре и определить продолжительность процесса в каждом случае. Изменение характеристик получаемых образцов позволяет оценить влияние выбранной температуры и продолжительности

смешивания на качество конечного продукта. Для этого для каждого приготовленного образца РБВ были определены температура размягчения, пенетрация и растяжимость 25°С.

Для испытаний была использована композиция: битум БНД 70/100 и модифицированная резиновая крошка, диспергированная в битуме с образованием трехмерной пространственной структуры. Приготовление образцов РБВ заключалось в нагреве определенной массы битума до заданной температуры – в пределах 140–220°С и в постепенном введении расчетного количества порошкообразной модифицированной резиновой крошки полимера при постоянном перемешивании. После внесения всей массы резиновой крошки, каждые 45 минут проверяли однородность продукта согласно ГОСТ Р 52056-2003.

В результате проведенных экспериментов было установлено, то при температуре ниже 140°С время диспергирования резиновой крошки в битуме составляет более 4 часов. Это значение представляется в рамках данных исследований максимальным, так как при большей продолжительности стадии диспергирования резиновой крошки производительность всего процесса приготовления РБВ не может считаться рентабельной. Оптимальным является 5-7 часов перемешивания. Верхнее значение температуры эксперимента 220°С, из-за того, что при этом начинает активно протекать термическая деструкция резиновой крошки

Таким образом, оптимальной температурой приготовления РБВ является температура в интервале 150-170°С. При этом необходимо отметить, что при сокращении продолжительности смешивания компонентов при одновременном увеличении температуры процесса в полимерно-битумном вязущем интенсивно протекают процессы, при которых изменяются эксплуатационные показатели вязущего. Можно отметить, что правильное определение температурного режима позволяет сэкономить рабочее время и энергоресурсы, увеличить производительность установки и наилучшим способом реализовать потенциал резиновой крошки, как высокоэффективного модификатора битума.

### Литература

1. К.К.Сырманова, Ж.К.Алипбекова, Боташев Е.Т. Анализ использования полимерно-битумных вязущих в Казахстане и за рубежом Труды международной научно-практической конференция «Ауэзовские чтения-17: новые импульсы науки и духовности в мировом пространстве» Шымкент 2019-стр 280-283
2. Разгон Д.Р. Вторичное использование и переработка изношенных шин. 2004/1/7 [Электрон.ресурс]: [статья] / Д.Р. Разгон.– Режим доступа:<http://www.recyclers.ru/modules/section/article.php?articleid=26> (дата обращения: 20.01.2007).
3. Прокопец В.С. Модификация дорожного асфальтобетона резиновыми порошками механоактивационного способа получения: монография / В.С. Прокопец, Т.Л.Иванова. – Омск: СибАДИ, 2012. –116 с.
4. Сырманова К.К., Агалакова Е.И., Ахметова К.А., Жумабай Н.С. Использование вторичного сырья в производстве товаров народного потребления на ТОО «ЭКО-Шина» эффективный путь ресурсосбережения региона Труды республиканской студенческой научной конференции на тему «Молодежь Мәңгілік ел-гарант независимости» по естественным, техническим, социально – гуманитарным и экономическим наукам, 2021, том 1, с.23-25
5. Колбановская А.С., Михайлов В.В. Дорожные битумы. М., Транспорт 2003, – 284 с.



## СОВРЕМЕННЫЕ ПЕРСПЕКТИВЫ ПРИМЕНЕНИЯ РЕГУЛЯТОРОВ РОСТА РАСТЕНИЙ В СЕЛЬСКОМ ХОЗЯЙСТВЕ

**Сычева Е.С.<sup>а</sup>, Муканова М.С.<sup>а</sup>, Сейлханов О.Т.<sup>б</sup>, Ержанов К.Б.<sup>а</sup>**

<sup>а</sup> г. Алматы, АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова»,  
e-mail: [yelena-sycheva@yandex.kz](mailto:yelena-sycheva@yandex.kz)

<sup>б</sup> Кокшетауский государственный университет им. Ш. Уалиханова

Анализ мирового рынка средств защиты растений показывает, что в настоящее время по темпам расширения производства, реализации и использования регуляторы роста растений занимают лидирующее положение во всем мире. На сегодняшний день выделено и синтезировано огромное количество соединений (растительного, микробного и химического происхождения), обладающих стимулирующим эффектом. Ученые считают, что уже в середине XXI века ростстимулирующие вещества будут являться источником основной доли прибавки урожая [1].

Возделывание плодово- и сельскохозяйственных культур должно проводиться с использованием комплексного подхода (минеральных удобрений, микроэлементов, регуляторов роста растений (РРР), химических и биологических средств защиты), повышающих устойчивость растений к действию неблагоприятных факторов окружающей среды.

Естественно, РРР невозможно заменить жизненно важные факторы для растений: свет, вода, тепло и питательные вещества. Однако, они гармонично дополняют комплексную технологию выращивания и защиты растений. Обладая комплексным воздействием на растительный организм (активизация физиолого-биохимических процессов, развитие, стимуляция темпов роста, иммунитет, антистрессовая активность и т.д.), большинство стимуляторов роста в конечном итоге повышают продуктивность растений в среднем на 8-15% [2]. Обладая антистрессовыми свойствами, РРР повышают устойчивость растений к низким и высоким температурам, избытку и недостатку воды, засухе и заморозкам [3, 4]. Анализ источников [5] свидетельствует о перспективности разработок в области создания новых РРР.

Одним из средств повышения стимуляции роста и развития растений, повышения урожайности, приживаемости посадочного материала (черенков, семян, саженцев) и повышения всхожести семенного материала, а также устойчивости растений к болезням и вредителям являются стимуляторы роста растений – вещества как природного, так и синтетического происхождения. Наиболее популярными являются препараты на основе индолилмасляной кислоты (гетероауксин, корневин, ризопон и др.). Однако эти препараты имеют ряд недостатков, главным из которых является разрушение растворов под действием света [6].

В последние годы на основе передовых научных достижений разработаны РРР, обладающие широким спектром физиологической активности, и безопасные для человека и окружающей среды [7, 8]. Среди средств защиты сельскохозяйственных растений наибольшее предпочтение отдается стимуляторам роста полифункционального действия, то есть препаратам с комплексным эффектом (одновременно проявляют рострегулирующие и защитные свойства) [9, 10]. Применение таких препаратов является одним из путей решения экологических проблем в сельском хозяйстве и мощным средством повышения эффективности защиты растений от фитопатогенов.

Разработка современных аграрных технологий для повышения продуктивности сельскохозяйственного производства, улучшение приживаемости плодовых и декоративных деревьев и кустарников, и решение экологических проблем с помощью современных экологически чистых регуляторов роста растений, являются необходимым элементом современного земледелия.

Также неослабевают интерес к проблемам гормональной регуляции и поиску инновационных путей применения регуляторов роста в сельскохозяйственной практике.

Если начальный период изучения регуляторов роста был преимущественно связан с установлением их физиологических эффектов на феноменологическом уровне, то сегодня исследователи проникли уже на молекулярный уровень, познавая тонкие механизмы систем регуляций в растениях. Этот прогресс позволяет в ближайшее время ожидать новых биотехнологических и генно-инженерных практических выходов, направленных на совершенствование технологий выращивания сельскохозяйственных культур с использованием регуляторов роста растений [11 – 13].

Применение современных РРР в плодоводстве, овощеводстве и декоративном цветоводстве показывает, что основными целями являются: прерывание покоя, регуляция процесса плодо- и побегообразования (его ограничение или, наоборот, активизация), улучшение качества плодов, регуляция роста вегетативных органов, повышение устойчивости к абиотическому и биотическому стрессам, индукция заложения генеративных органов и цветения, задержка и ускорение до уборочного созревания плодов, задержка и ускорение созревания плодов при хранении. Многие препараты обладают комплексным действием, что позволяет еще более эффективно регулировать с их помощью процесс образования продукта [14 – 16]. В результате снижаются затраты на обрезку, ускоряется начало плодоношения, увеличивается урожайность растений и повышается качество плодов. Следует отметить, что разработка новых регуляторов роста, наряду с традиционными методами органического синтеза и последующего скрининга соединений, сегодня проводится и с использованием биотехнологических подходов.

Одним из важных направлений научно-исследовательских работ Института химических наук им. А.Б. Бектурова является разработка и внедрение инновационных отечественных стимуляторов роста растений для сельского хозяйства, биотехнологии и охраны окружающей среды [17 – 18]. Особенностью разработанных препаратов является низкая доза применения, безопасность, универсальность и эффективность, которые могут найти широкое применение в сельском хозяйстве при озеленении, лесовосстановительных мероприятиях и в борьбе с опустыниванием.

В настоящее время продолжают исследования в области синтеза различных производных гетероциклических, ациклических и ароматических дитиокарбаматов и их производных с целью создания новых экологически безопасных высокоэффективных средств защиты растений для повышения урожайности, приживаемости и стрессоустойчивости декоративных и сельскохозяйственных культур [19].

Таким образом, поиск и апробация новых низко дозированных, экологически безопасных регуляторов роста растений с широким спектром действия, которые оказывают не только ростстимулирующее, но и защитное действие от неблагоприятных факторов и болезней, являются актуальными для сельского хозяйства.

*Работа выполнена при финансовой поддержке КН МОН РК в рамках грантового проекта молодых ученых № АР09057956 «Разработка биоорганических комплексов с природными полисахаридами в качестве экологически безопасных средств защиты растений».*

## Литература

1. Ержанов К.Б., Визер С.А., Сычева Е.С. Создание инновационных регуляторов роста растений широкого спектра действия. – Алматы, 2017. – 158 с.
2. Шаповал О.А., Можарова И.П., Коршунов А.А. Регуляторы роста растений в агротехнологиях // [Защита и карантин растений](#). – 20214. – №.6. – С. 16-20.
3. Пономаренко С.П. Регуляторы роста растений. – Киев, 2003. – 319 с.
4. Вакуленко В.В., Шаповал О.А. Новые регуляторы роста в сельскохозяйственном производстве. Научное обеспечение и совершенствование методологии агрохимического обслуживания земледелия России. – М. 2000. – С. 71 – 89.
5. Справочник пестицидов (ядохимикатов), разрешенных к применению на территории Республики Казахстан. Астана, 2019. – 250 с.

6. Князева Т.В. Регуляторы роста растений в краснодарском крае. – Краснодар, 2013. – 128 с.
7. Патент на полезную модель РК № 3938 Комплекс включения проп-2-инилморфолиндитиокарбамата с  $\beta$ -циклодекстрином в качестве стимулятора корнеобразования / Муканова М.С., Сычева Е.С., Ержанов К.Б., Муканова Г.С. / по заявке № 2019/0023.2 от 10.01.2019г.; Оpubл. 03.05.2019г, Бюл. № 18.
8. Патент на полезную модель № 2788 РК. Стимулятор роста риса / Сычева Е.С., Ержанов К.Б., Визер С.А., Турдиев Т.Т./ Бюл. № 18. Оpubл. 21.05.2018.
9. Котлованов А.А., Обыденнов К.Л., Калинина Т.А., Высокова О.А., Галущинский А.Н., Глухарева Т.В. Исследование фунгицидной активности 1,3-тиазолидин-4-онов в отношении фитопатогенов // Современные подходы и методы в защите растений Сборник материалов конференции, Екатеринбург. – 2018. – С. 23-25.
10. Бурьгин Г.Л. Физиолого-биохимические основы защиты растений ризосферными бактериями // Современные подходы и методы в защите растений Сборник материалов конференции, Екатеринбург. – 2018. – С. 10-11.
11. Кириллов П.С., Трофимук Л.П. Использование нового регулятора роста для микроразмножения некоторых видов рода *crataegus* // Вестник Санкт-Петербургского Университета – 2016. – Сер.3. – Вып. 4. – С. 62-75.
12. Мишина О.С., Белопухов С.Л., Ющенко Ю.А. Применение биорегуляторов в интенсивных агротехнологиях выращивания гречихи // Известия Вузов. Прикладная химия и биотехнология – 2016. – Т. 6.– №.3. – С. 72-80.
13. Шатилова Т.И., Герчиу Я.П., Бобков А.А., Тюленева Е.А., Попова С.А., Витол И.С., Карпиленко Г.П. Препараты фиторегуляторов в производстве и формировании качества зерновых культур // Известия ТСХА – 2007. – Вып. 3. – С. 75-82.
14. Соловых Н.В., Янковская М.Б. Индукция адвентивного морфогенеза *invitro* в изолированных тканях растений рода *Rubus* с использованием цитокининов из групп аденина и дифенилмочевины // Садоводство и виноградарство.– 2020. – №2. – С. 21-27. <https://doi.org/10.31676/0235-2591-2020-2-21-27>
15. Усова К.Е., Белопухов С.Л., Шайхиев И.Г. Экологически безопасные высокоэффективные регуляторы роста растений для цветочно-декоративных культур // Вестник технологического университета. – 2016. – Т.19, №21. – С. 193 – 198.
16. Алексеева К.Л., Сметанина Л.Г. Биологическая защита томата от фузариозного увядания // Современные подходы и методы в защите растений Сборник материалов конференции, Екатеринбург. – 2018. – С. 13-14.
17. Патент на полезную модель РК № 5095. 3,4-Диметоксибензойный 1Н-1,2,4-триазол-1-карботиоевый тиоангидрид, обладающий ростстимулирующей активностью / Сычева Е.С., Муканова М.С., Сарсенбаева Г.Б., Мухамадиев Н.С. / Бюл. № 40. Оpubл. 09.10.2020г.
18. Патент на полезную модель РК № 5094. 3-Морфолинопропилкарботиоевый бензойный тиоангидрид в качестве стимулятора побегообразования / Энуарбекова И. Н., Муканова М.С., Муканова Г.С. / Бюл. № 40. Оpubл. 09.10.2020г.
19. Ануарбекова И.Н., Сычева Е.С., Сейлханов О.Т., Муканова М.С. Синтез карбонидитиоангидридов // Сборник тезисов докладов XXXI Российской молодежной научной конференции с международным участием, посвященной 90-летию со дня рождения профессора В.М. Жуковского. – Екатеринбург, 20-23 апреля 2021. – С. 236.

## НОВЫЕ ПРОИЗВОДНЫЕ ЭКДИСТЕРОНА С ЗАДАНЫМИ СВОЙСТВАМИ

Тулеуов Б.И., Темиргазиев Б.С., Кожанова А.М., Жанарбек А.,  
Мендибаева А.Ж., Адекенов С.М.

г. Караганда, АО «Международный научно-производственный холдинг «Фитохимия»,  
e-mail: [alhss@mail.ru](mailto:alhss@mail.ru)

Фитоэкдизоны могут выступать как анаболические, адаптогенные, противовоспалительные, антиревматические, диуретические, антимикробные, нейропротекторные и гипогликемические агенты [1,2].

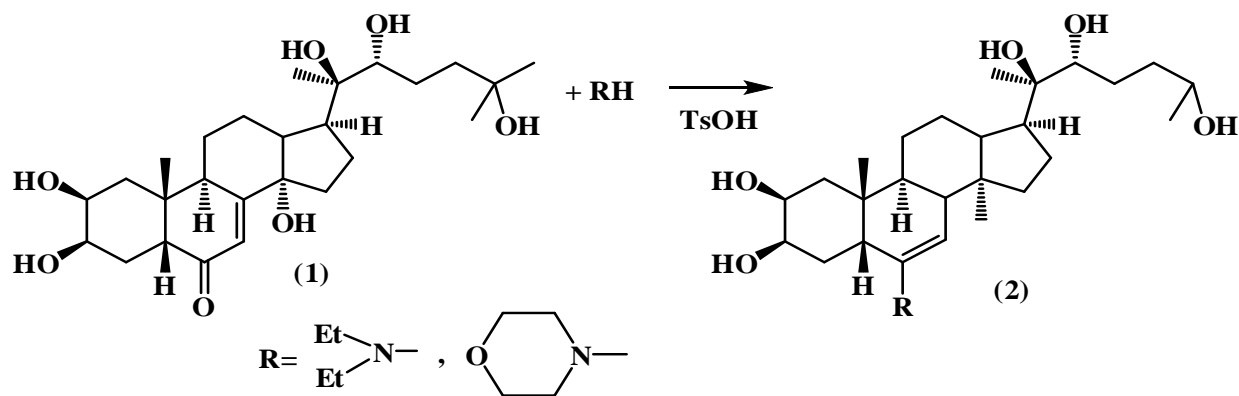
Экдизонсодержащие препараты могут быть перспективными для снятия общей и хронической усталости, снижения нервной и мышечной утомляемости, уровня сахара, улучшения памяти, в восстановлении постинфарктных и постинсультных состояний и повышении общего жизненного тонуса.

Однако, одной из причин недостаточного применения фитоэкдизонов и препаратов на их основе в фармацевтике является их низкая растворимость в воде.

В связи с этим создание инновационных методов синтеза и технологии получения новых нанокapsулированных и гидрофильных форм фитоэкдизонов остается очень актуальной и востребованной.

С целью проведения направленного синтеза новых производных на основе технологически доступного фитоэкдизона – 20 – гидроксидекдизона (экдистерона) нами проведены квантово-химические расчеты для выявления и подтверждения активных реакционных центров и реакционной способности его молекулы и компьютерный биоскрининг по программе PASS для предварительного выявления у синтезированных производных фармакологической активности.

Далее для последующего получения их водорастворимых супрамолекулярных ансамблей с циклодекстринами проведена реакция енаминирования исходного фитоэкдизона (1). При этом обработкой TsOH сопряженную 14  $\alpha$ -окси- $\Delta^7$ -6-кетогруппировку экдистерона превращали в диэтиламин (морфолин) – енамины (2).



Тонкие структуры новых производных-синтонов подтверждены данными двумерных корреляции спектров ЯМР  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  TOCSY,  $^1\text{H}$ - $^1\text{H}$  ROESY,  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  HMQC и  $^1\text{H}$ - $^{13}\text{C}$  HMBC.

### Литература

1. Тулеуов Б.И. Технология фитостероидных препаратов. – Караганда: «Глассир», 2017.-112с.
2. Рамазанов Н.Ш., Бобаев Н.Д., Сыров В.Н., Сагдуллаев Ш.Ш., Маматханов А.У. Химия, биология и технология получения фитоэкдистероидов. – Ташкент: «Fanvatexnologiya», 2016.-260с.

## ХИМИЧЕСКАЯ МОДИФИКАЦИЯ СИНТЕТИЧЕСКИХ КАУЧУКОВ ПРИРОДНЫМИ МИНЕРАЛАМИ

Туребекова Г.З., Бейсенбаев О.К., Пусурманова Г.Ж.

г. Шымкент, Южно-Казахстанский университет им. М.Ауезова

В Послании народу Казахстана в 2018 г Первый президент РК – Елбасы Н. Назарбаев подчеркнул, что **«индустриализация должна стать флагом внедрения новых технологий»**.

Именно ее результаты стали одним из основных **стабилизирующих факторов** в кризисных годах, когда цены на нефть резко снизились. Поэтому ориентир на **обрабатывающий сектор** с высокой производительностью труда неизменен. В то же время индустриализация должна стать **более инновационной**, используя **все преимущества** нового технологического уклада **4.0.**» Поэтому важной задачей химической промышленности Республики Казахстан в рамках 4 промышленной революции является вовлечение в производство экологически чистых соединений природного происхождения. Использование минеральных наполнителей в эластомерах позволяет улучшить их эксплуатационные свойства.

Резиновая смесь – многокомпонентная система, включающая каучук и прочие ингредиенты, равномерно распределенные в массе каучука: вулканизирующие вещества, ускорители, активаторы вулканизации, противостарители, пластификаторы и мягчители, наполнители и другие материалы специального назначения. Каждый компонент выполняет определенные функции. Особую роль в производстве резиновых смесей играют наполнители, благодаря которым существует возможность модификации свойств синтетических каучуков. Действие наполнителей определяется множеством факторов: количеством наполнителя, формой и размерами частиц, особенностями взаимодействия с полимером и другими. Введение наполнителей приводит к изменению практически всех свойств полимерных материалов – синтетических каучуков. Действие наполнителя определяется множеством факторов: формой и размером частиц, особенностями взаимодействия между частицами наполнителя в среде полимера, количеством наполнителя и другими. При введении наполнителей в каучук между ними возможно адсорбционное, а в некоторых случаях и химическое взаимодействие макромолекул полимера и наполнителя на границе двух фаз. Это взаимодействие тем сильнее, чем больше поверхность контакта макромолекул полимера с наполнителем, т.е. чем меньше размер частиц наполнителя и соответственно, больше его суммарная поверхность. Адсорбционное и химическое взаимодействие на границе раздела фаз существенно зависят от природы полимера и наполнителя, от свойств поверхности наполнителя, наличия низкомолекулярных веществ, а также от условий смешения синтетического каучука (эластомера) с наполнителем. Введение наполнителей приводит к изменению практически всех свойств полимерных материалов. Наполнитель может активно (вплоть до образования ковалентных связей) или пассивно взаимодействовать с полимерной матрицей. В первом случае частицы наполнителя играют роль аналогичную кристаллитам в аморфных полимерах и величина энергии взаимодействия изменяется в широких пределах. Наиболее важной особенностью влияния наполнителей на эластомеры является их модифицирующие и усиливающие свойства. Усиление эластомеров обусловлено адсорбционными силами физического характера. В то же время адсорбционное взаимодействие не исключает хемосорбционного. Усиление и модификация синтетических каучуков заключается в том, что при введении тонкодисперсных наполнителей в резиновые смеси происходит существенное увеличение прочности и улучшение некоторых физико-механических свойств вулканизатов в высокоэластичном состоянии: сопротивление истиранию, раздиру, модулей и т.п. При модификации эластомеров существует оптимум наполнения – такое содержание наполнителя, при котором достигаются максимально прочностные показатели.



Оптимум наполнения для различных вулканизатов не одинаков и возрастает с повышением температуры.

Важнейшим фактором, определяющим усиливающее действие наполнителей, является их дисперсность, характеризуемая размером частиц или удельной поверхностью. Взаимодействие эластомера с наполнителем определяется природой наполнителя или характером его поверхности. Чем больше полярность самого наполнителя или его поверхности, тем меньше он взаимодействует с неполярными эластомерами, и наоборот. Свойства поверхности можно изменять адсорбцией поверхностно-активных веществ или прививкой на его поверхности определенных функциональных групп, чем больше взаимодействие макромолекул эластомера с наполнителем, тем как правило, выше эффект усиления и модификации. Минеральные наполнители природного происхождения нашли широкое применение в качестве ингредиентов резиновых смесей, с самого начала развития резиновой промышленности. Они улучшают физические свойства вулканизатов, придавая им ряд положительных свойств, но основной целью их применения было снижение стоимости резиновых изделий. С расширением производства синтетических каучуков возникла необходимость в применении наполнителей, обеспечивающих в результате их модификации высокую термостойкость, стойкость к различным агрессивным средам, негорючесть и другие свойства. Улучшение свойств каучуков заключается в том, что при введении тонкодисперсных наполнителей в резиновые смеси происходит существенное увеличение прочности и улучшение некоторых физико-механических свойств вулканизатов в высокоэластическом состоянии: сопротивления истиранию и раздиру, прочность при удлинении, твердость и т.п. Важнейшим фактором, определяющим модифицирующее действие наполнителей, является их дисперсность, характеризуемая размером частиц или удельной поверхностью. Положительные стороны применения их в резинах очевидны: природные минералы экологически безопасны, доступны, недороги и обладают определенной физико-химической активностью, что позволяет улучшить свойства резиновых изделий и самое главное – снизить техногенную нагрузку при переработке эластополимеров и изготовлении резин. По результатам проведенных нами исследований показано, что из многочисленных природных минералов наиболее перспективными для использования в резинах являются цеолиты. Цеолит благодаря своему химическому составу обладает уникальными свойствами; по своей структуре они являются пористыми кристаллами, их алюмосиликатный каркас пронизан регулярными полостями и каналами, в которых находятся катионы натрия, калия, лития кальция магния, бария и др., а также молекулы воды. В состав цеолита входит оксид кремния, но в виде алюмосиликатного каркаса, что и снижает токсичность оксида кремния в цеолитах и позволяет использовать без вреда на производстве.

В работе проанализированы свойства резин на основе изопреновых синтетических каучуков, наполненных измельченным минералом цеолитом, представляющим собой каркасный алюмосиликат. Добывают его открытым способом во многих странах мира, в том числе и в Казахстане. В настоящее время широко применяются 3 модификации природных цеолитов: клиноптилолит, шабазит и морденит.

В наших исследованиях использован цеолит Чанканайского месторождения, форма индивидуальных частиц которого приближается к сферической размером 1,6-4 мк. Минеральная форма данного цеолита- клиноптилолит. Химический состав цеолитного сырья, мас. %:  $\text{SiO}_2$  60-72;  $\text{Al}_2\text{O}_3$  0,07-0,7;  $\text{Fe}_2\text{O}_3$  1,4-5,83;  $\text{MnO}$  0,067-0,199;  $\text{MgO}$  0-2,12;  $\text{CaO}$  0,13-6,40;  $\text{Na}_2\text{O}$  0,61-5,45;  $\text{K}_2\text{O}$  0,66-4,03;  $\text{P}_2\text{O}_5$  0,12-0,173;  $\text{H}_2\text{O}$  0-4,09. Подобный состав и строение цеолитов указывают на его высокую поверхностную активность, способность образовывать дополнительные связи и открывает широкие возможности для использования их в качестве ингредиентов полифункционального действия. Для определения характера действия цеолита большое значение имеет его дозировка в резиновых смесях. При дозировках менее 10 масс.ч. наблюдается преимущественно модификация эластомерных цепей, в этом случае цеолит будет играть роль модификатора.

При больших дозировках в эластомерах возникает гетерофаза гомополимера, химически связанная с каучуком и играющая роль активного наполнителя. При использовании цеолита в качестве наполнителя для бреккерных смесей его добавляли в смеси в количестве 10-50 масс.ч. на 100 масс.ч. каучука.

Для улучшения технических свойств резин были проведены эксперименты по модифицированию и наполнению их цеолитами. В резиновые смеси цеолиты вводились для частичной или полной замены дефицитного сырья белой сажи (каолина) и технического углерода. Технология подготовки цеолита к смешению состояла из следующих стадий: размол цеолита, просеивание его через сито и прокаливание. Резиновые смеси готовились в две стадии в резиносмесителях ЦЗЛ ТОО «Эластополимет». Цеолит вводили в резиновую смесь на I стадии смешения. Серу вводили на лабораторных вальцах. Проведенные опыты показали, что технология смешения, переработка резиновых смесей и вулканизация при добавлении цеолита практически не отличается от стандартного режима, указанного в технологическом регламенте.

Технология подготовки цеолита к смешению состояла из следующих стадий: размол целита, просеивание через сито и прокаливание. Использовались стандартные рецептуры бреккерных резиновых смесей, где частично и полностью заменялась белая сажа. Для определения особенностей вулканизации смеси в присутствии цеолита исследованы реологические характеристики на реометре Р-100 Фирмы «Monsanto» Определение вулканизационных свойств исходной резины и модифицированных цеолитами смесей практически не отличаются от стандартной. Вулканизация образцов проведена при 155 С в течение 15 мин. Испытание образцов на старение проводили в автоклаве при 393 К в среде насыщенного водяного пара при давлении 0,2 МПа в течение 40 ч, а также в аналогичных условиях при постоянном орошении 5%-ным водным раствором NaCl в течение 8ч.

Для определения технологических и физико-механических свойств резиновых смесей и их вулканизаторов применяли стандартные методы испытаний. Эффект наполнения резин цеолитами оценивали путем сопоставления комплекса свойств опытных и эталонных бреккерных резин (таблица 1).

**Таблица 1** – Результаты физико-механических испытаний

Показатель	Эталон	Содержание цеолита, на 100 масс.ч каучука				
		1	2	3	4	5
Напряжение при удлинении 300% МПа	11,8	12,1	11,9	10,8	12,0	12,2
Условная прочность при разрыве, МПа	21,1	20,3	21,5	23,1	22,8	21,0
Относительное удлинение, %	470	475	480	490	485	480
Остаточное удлинение, %	28	20	21	21	20	21
Прочность связи по Н-методу, Н	205	205	210	223	220	210

Проведенные исследования показали увеличения прочности при разрыве, относительного удлинения, т.е. резина стала более прочной и эластичной. Как видно из данных, представленных в таблице 1, введение цеолитов приводит к увеличению одного из важнейших показатели для бреккерных резин – прочности связи с кордом.

Таким образом, использование цеолита в резиновой промышленности, обеспечивает формирование более совершенной надмолекулярной структуры эластомера в результате модификации природным минералом и, следовательно, это приводит к улучшение прочностных свойств вулканизаторов.



## МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ НЕКОТОРЫХ ВАЖНЫХ МОНОМЕРОВ, ВХОДЯЩИЕ В ЦЕПЬ БЕЗ ИЗМЕНЕНИЯ МАССЫ

Тусупкалиев Е.А., Баимбетов М.Н., Жумагалиев С.Ж., Хакимбулатова К.Х.

г. Алматы, АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова», e-mail: [t\\_ersin@mail.ru](mailto:t_ersin@mail.ru)

С самого появления масс-спектрометрии как структурно-аналитического метода, химии пытались применить ее для исследования полимеров. Однако технические возможности большинства старых приборов не позволяли этого сделать (перевод образца с газообразного состояния в диапазон масс).

Благодаря появлению так называемых десорбционных методов ионизации как бомбардировка быстрыми атомами (FAB) и десорбция полем (FB), ученые могли анализировать интактные молекулы олигомеров сравнительно с низкой молекулярной массой (до нескольких тысяч Дальтон). В последние 20-25 лет число исследований интактных полимеров с очень высокой молекулярной массой ( $>10^5$  Да) масс-спектрометрическим методом резко возросло с приходом современной техники ионизации молекул как матрично-активированная лазерная десорбция/ионизация (MALDI), ионизация электрораспылением (ESI) и масс-спектрометрия вторичных ионов (SIMS).

Продолжая исследование наиболее важных мономеров [1] методом масс-спектрометрии с ионизацией электронами (ИЭ), позволяющих проводить надежную идентификацию, нами рассмотрены масс-спектры 13 мономеров, входящие в цепь без изменения массы [2].

Масс-спектры исследуемых мономеров (1-13) приведены в Таблице 1. Стабильность молекулярных ионов ( $W_{ми}$ ) мономеров (1-13) колеблется в пределах 1,4 – 20,75% (Таблица 2).

**Таблица 1**– Масс-спектры некоторых мономеров (1-13) для полимеризации

№ соед.	Название	Масс-спектр: m/z ( $I_{отн.}$ , %)*
1	Этиленоксид	$M^+$ 44 (65), 43 (15,5), 42 (12), 29 (100), 28 (6,5), 26(14), 16 (8), 15 (65), 14 (26), 13 (8)
2	Пропиленоксид	$M^+$ 58 (81), 57 (7,5), 43 (37), 39 (6), 31 (31,5), 29 (36), 28 (100), 27 (49,5), 26 (27,5), 15 (10,5)
3	1,1-Диметилэтиленоксид	$M^+$ 72 (49,5), 57 (8), 43 (49), 42 (77), 41 (100), 40 (17), 39 (25), 31 (6,5), 29 (15), 27 (35,5)
4	Этиленсульфид	$M^+$ 60 (76), 59 (69), 58 (20), 57 (8), 45 (100), 34 (12), 32 (8), 28 (8), 27 (44,5), 26 (19)
5	Циклопентен	$M^+$ 68 (44,5), 67 (100), 66 (6), 65 (5,5), 53 (22), 42 (8), 41 (15,5), 40 (13), 39 (24), 27 (8)
6	Бицикло[2.2.1]гептен-2	$M^+$ 94 (8), 79 (10,5), 77 (6,5), 67 (6,5), 66 (100), 65 (5,5), 41 (3), 40 (4,5), 39 (10,5), 27 (5)
7	2,5-Фурандион	$M^+$ 98 (20), 55 (3,5), 54 (100), 53 (10), 44 (4), 41 (3,5), 28 (6), 26 (95,5), 25 (12,5), 13 (3)
8	Винилциклогексан	$M^+$ 110 (25), 95 (20,5), 82 (39), 81 (100), 68 (22,5), 67 (68), 55 (12,5), 54 (29), 39 (14)
9	N-винил-2-пирролидинон	$M^+$ 111 (49,5), 82 (7,5), 68 (7), 56 (100), 55 (7), 54 (10), 41 (11), 39 (6), 28 (24), 27 (11)
10	Капролактам(2-Азациклогептанон)	$M^+$ 113 (54), 85 (36,5), 84 (37), 56 (43), 55 (67), 42 (39), 41 (33), 30 (100), 28 (23,5), 27 (15)
11	Капролактон (2-Оксациклогептанон)	$M^+$ 114 (21), 84 (44), 70 (21,5), 56 (30), 55 (96,5), 42 (100), 41 (50), 39 (21), 28 (26), 27 (22,5)
12	Лактид (3,6-Диметил-2,5-диокса-1,4-диоксан)	$M^+$ 144 (8), 57 (10), 56 (100), 55 (20), 45 (92), 44 (20), 43 (81), 29 (40), 28 (100), 27 (46), 26 (26)
13	Малеиновая кислота (2-Бутендиовая кислота)	$M^+$ 116 (2), 99 (31), 98 (22,5), 72 (100), 55 (32,5), 54 (34), 53 (17), 46 (16,5), 45 (66,5), 27 (36,5), 26 (46)

**Таблица 2** – Стабильность молекулярных ионов к действию ионизационных электронов ( $W_{ми}$ ) и интенсивность характеристических фрагментных ионов от полного ионного тока

Соединение	$W_{ми}$ (%)	$m/z$ ( $J_{пит.}$ %)*				
		$F_1/F_1^1$	$F_2$	$F_3$	$F_4$	$F_5$
1	19,7	43 (4,6)	42 (3,5)	29 (29,4)	26 (4,1)	15 (19,0)
2	20,0	43 (8,9)	31 (7,6)	29 (8,6)	28 (24,1)	27 (12,0)
3	12,3	43 (11,75)	42 (18,5)	29 (3,6)	41 (24,1)	27 (8,5)
4	20,75	59 (17,25)	58 (5,0)	45 (25,0)	34 (3,0)	27 (11,1)
5	17,0	67 (37,0)	53 (8,1)	41 (5,7)	39 (8,8)	27 (3,0)
6	4,7	79 (5,9)	77 (3,5)	66 (58,8)	39 (6,1)	27 (2,8)
7	7,6	54 (36,3)	26 (34,5)	–	–	–
8	6,2	95 (4,8)	81 (23,25)	67 (15,8)	54 (6,7)	41 (6,2)
9	19,25	83 (2,2)	82 (2,7)	68 (2,6)	56 (37,0)	28 (8,8)
10	10,8	85 (6,85)	84 (6,9)	55 (12,5)	42 (7,25)	30 (18,7)
11	4,4	84 (8,8)	70 (4,2)	55 (19,5)	42 (20,2)	41 (10,0)
12	1,4	56 (17,7)	45 (16,3)	43 (14,3)	28 (17,7)	27 (8,1)
13	1,6	99 (6,0) 98 (4,4)	72 (19,6)	55 (6,5)	54 (6,6)	45 (13,0)

\*  $m/z$  – отношение массы к заряду фрагментных ионов ( $F_1$ –  $F_5$ )

$J_{пит.}$  – интенсивность пиков  $F_1$ –  $F_5$  от полного ионного тока

В результате исследования охарактеризованы и показаны особенности масс-спектров и фрагментации молекулярных ионов изученных мономеров. Установлено, что фрагментация зависит от природы входящих элементов и структуры мономера. Для каждого мономера выявлены характеристические фрагментные ионы. Определены стабильность молекулярных ионов к действию ионизации электронами. В случае малеиновой кислоты в условиях масс-спектрометрии, при ионизации электронами происходят одновременно процессы распада молекулярного иона: дегидратация и декарбоксилирование.

### Литература

1. Хакимбулатова К.Х., Жумагалиев С.Ж., Тусупкалиев Е.А., Баимбетов М.Н., Кайнарбаева Ж.Н. Измерение масс-спектров наиболее важных мономеров некоторых производных этена //Химический журнал Казахстан.-2020.-№2.- С.24-39.
2. Mass spectral NIST.-2012.V.-2.2.

## МАСС-СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЕ ПОВЕДЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ПРОИЗВОДНЫХ ПИРРОЛА ПРИ ИОНИЗАЦИИ ЭЛЕКТРОНАМИ

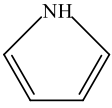
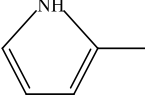
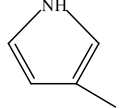
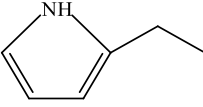
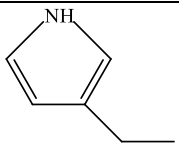
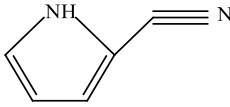
Тусупкалиев Е.А., Муканова М.С., Хакимболатова К.Х., Баимбетов М.Н.,  
Кайнарбаева Ж.Н., Жумагалиев С.Ж.

г. Алматы, АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова», e-mail: [t\\_ersin@mail.ru](mailto:t_ersin@mail.ru)

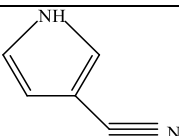
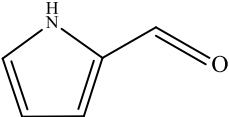
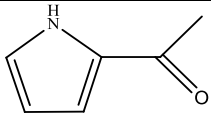
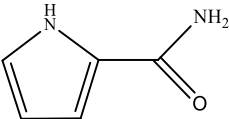
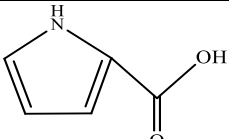
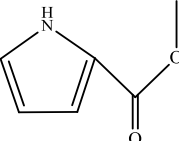
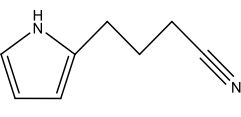
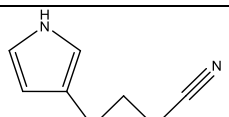
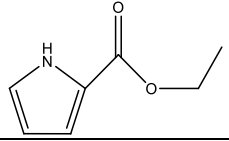
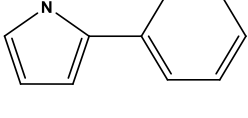
Производные пиррола широко распространены в природе. К их числу относятся такие тетрапиррольные соединения, как хлорофилл, гемоглобин, витамины В<sub>12</sub> и другие имеющие важные физиологическое и биологическое значение. Во многих из этих соединений содержится особая группировка, состоящая из четырех пиррольных ядер-ядро порфина [1-2].

При замещении атомов водородов в β – положении пиррольных ядер на радикалы образуются порфирины. Некоторые из них образуют металлические хелатные комплексы. Так, порфирин крови – входящий в состав гемоглобина (пигмент крови), содержит комплексно связанный двухвалентный атом железа, парфирин хлорофилла (пигмент зеленых растений) – магний, а порфирин В<sub>12</sub> – кобальт. Отсюда очевидна необходимость систематические исследования основных представителей этих весьма важных классов органических соединений методом масс-спектрометрий с целью выявления общих закономерности поведения их при ионизации электронами (ИЭ) и получить необходимые данные для идентификации и качественного анализа, а также сложных органических соединений, содержащих в качестве фрагментов пиррольных ядер [3-4].

**Таблица 1** – Масс-спектры некоторых 1,2-замещенных производных пиррола (1-16)

Номер соединения	Формула и название соединения	Масс-спектр, m/z (I <sub>отн</sub> )
1	 Пиррол	68(4,5) M <sup>+</sup> 67 (100), 66(8), 41(63), 40(54), 39(68), 38(25), 37(17), 28(51), 26(5,5). ΣI =400, W <sub>ми</sub> =26
2	 2-метилпиррол	M <sup>+</sup> 81(71), 80(100), 53(11), 52(3), 51(3), 41(2,5), 40(2,5), 39(3), 28(12), 27(5). ΣI =215, W <sub>ми</sub> =33
3	 3-метилпиррол	M <sup>+</sup> 81(73,5), 80(100), 78(7,5), 53(39,5), 52(15,5), 51(13,5), 50 (11), 41(5,5), 40(7). ΣI =275, W <sub>ми</sub> =26,7
4	 2-этилпиррол	M <sup>+</sup> 95(56,5), 94(11,5), 81(7), 80(100), 53(12), 52(7), 51(4,5), 40(6), 39(7), 38(4,5). ΣI =220, W <sub>ми</sub> =25,7
5	 3-этилпиррол	M <sup>+</sup> 95(53,5), 94(11), 93(4),81(6), 80(100), 78(5), 67(7), 65(5), 53(21),41(5). ΣI =220, W <sub>ми</sub> =24,3
6	 2-цианопиррол	93(6), M <sup>+</sup> 92(100), 65(20), 64(10,5), 52(6,5), 41(19), 39(10), 38(13), 37(8,5), 28(10). ΣI = 210, W <sub>ми</sub> = 50,4

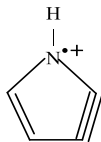
## Продолжение таблицы 1

Номер соединения	Формула и название соединения	Масс-спектр, m/z ( $I_{отн}$ )
7	 3-цианопиррол	93(6,5), $M^+$ 92(100), 66(4,5), 65(21,5), 64(12), 63(3,5), 41(16), 38(9,5), 37(6), 28(9). $\Sigma I=190$ , $W_{ми}=56,0$
8	 2- карбальдегид-пиррол	96 (7), $M^+$ 95 (100), 94 (67,5), 66 (53,5), 41 (6,5), 40 (8), 39 (27), 38 (8,5), 37 (5), 28 (7). $\Sigma I= 310$ , $W_{ми}= 35,6$
9	 2-Ацетилпиррол	110 (6), $M^+$ 109 (75), 95 (6), 94 (100), 67 (6), 66 (53), 43 (11), 40 (8), 39 (31), 38 (8). $\Sigma I= 310$ , $W_{ми}= 26,0$
10	 2-карбалид-пиррол	111 (5,5), $M^+$ 110 (100), 94 (45,5), 93 (28,5), 66 (22), 65 (10,5), 64 (3,5), 54 (4), 44 (11,5), 41 (6). $\Sigma I= 240$ , $W_{ми}= 44,0$
11	 2-карбоксил-пиррол	$M^+$ 111 (100), 94 (21,5), 93 (84), 66 (23,5), 65 (34,5), 40 (8), 39 (30,5), 38 (21), 37 (9,5), 28 (19). $\Sigma I= 355$ , $W_{ми}= 29,0$
12	 2-метил-карбоксилатпиррол	$M^+$ 125 (67), 95 (7), 94 (100), 93 (38), 67 (5), 66 (38), 65 (12,5), 40 (6,5), 39 (35,5), 38 (12,5). $\Sigma I= 330$ , $W_{ми}= 20,3$
13	 2-цианно-пропилпиррол	$M^+$ 134 (27), 94 (8,5), 93 (9), 92 (11), 81 (8), 80 (100), 53 (13), 39 (7,5), 28 (7,5), 27 (5,5). $\Sigma I = 200$ , $W_{ми} = 13.5$
14	 3-циано-пропилпиррол	$M^+$ 134 (28), 94 (7,5), 93 (8,5), 81 (14), 80 (100), 53 (15), 52 (5,5), 39 (7), 28 (7,5), 27 (5,5). $\Sigma I = 200$ , $W_{ми} = 14.0$
15	 2-этил-карбоксилат-пиррол	$M^+$ 139 (26), 111 (20), 95 (16), 94 (100), 93 (95), 67 (20), 66 (44), 65 (22), 39 (44), 38 (16). $\Sigma I = 405$ , $W_{ми} = 6.4$
16	 2-фенилпиррол	144 (12,5), $M^+$ 143 (100), 142 (8,5), 117 (9,5), 116 (27), 115 (53,5), 89 (9), 72 (9), 63 (8), 39 (7). $\Sigma I = 250$ , $W_{ми} = 45.0$

В таблице 1 представлены десять наиболее интенсивных пиков в масс-спектрах производных пиррола (2-16), в том числе самого пиррола (1). Стабильность МИ к ИЭ ( $W_{ми}$ ) и интенсивность характеристических ионов ( $F_1 - F_5$ ) от полного ионного тока приведены в таблице 2. Как видно из таблицы 1 что интенсивность их пиков в масс-спектре во многих случаях максимальные и варьируются в пределах 26 – 100% ( $I_{отн}$ ) и стабильность МИ к ИЭ ( $W_{ми}$ ) высокие и колеблется в пределах 6,4 – 54% ( $I_{пит}$ ).

Для 2- и 3-замещенных метил – и этилпирролов характерны стабильные МИ ( $W_{ми}=$

24,3 ÷ 33,0%) и основные ионы  $[M - H]^+$  (для метилзамещённых),  $[M-CH_3]^+$  (для этилзамещённых) пирролов за счет  $\beta$  – разрыва и их интенсивности в масс-спектрах самый максимальный (100%). Замена алкильных заместителей на карбальдегид (-CH=O), карбоксил (-COOH), карбонил (-C=O), амид (-CONH<sub>2</sub>), оксометокси (-C(O)OCH<sub>3</sub>) и оксоэтокси (-C(O)OC<sub>2</sub>H<sub>5</sub>) приводит к стабильному характеристическому фрагментному иону оксония R-C≡O<sup>+</sup> (m/z 94), пик которого интенсивный (I<sub>отн</sub> = 21,5 ÷ 67,5%) или самый максимальный (I<sub>отн</sub> = 100%). Замена алкильных радикалов на нитрил (-CN) приводит к высокостабильному МИ цианпирролов (W<sub>МИ</sub> = 50,4 ÷ 56,0%), распад которого происходит с



трудом с образованием катион-радикала с m/z 65, за счет выброса HCN. В случае введения в молекулу пиррола цианопропила в положение С2- или С3 стабильность МИ к действию ИЭ резко падает и главным его направлением фрагментации  $\gamma$ -разрыв (С-С, протона) с образованием высокостабильного характеристического иона с m/z 80, аналогично метил- и этилпирролам.

Таким образом стабильности молекулярных и фрагментных ионов в основном будет определять действительные направление фрагментации и сделанные на основании полученных данных общие выводы могут быть использованы при установлении строения более сложных соединений, содержащих пиррольные ядра.

### Литература

1. Жумагалиев С.Ж., Сагинаев А.Т., Абилхайров А.И., Сериков Т.М. Масс-спектры и особенности фрагментации некоторых 2-замещённых Тиофенов // Известия НАН РК, сер.хим.технол. – 2015. - № 3. - С. 17-26.
2. Parker J.K., Hassell G.M.E., Mottram D.S., Guy R.C. Sensory and instrumental analyses of volatiles generated during the extrusion cooking of oat flours // J.Agric. Food Chem. - 2000. – 48. – P. 3497-3506
3. Лебедев А.Т. Масс-спектрометрия в органической химии // Москва: Техносфера. - 2015. - P.704
4. Заикин В.Г., Варламов А.В., Микая А.И., Проштаков Н.С. Основы масс-спектрометрия органических соединений // М: МАИК «Наука / Интерпериодика». - 2017. - С. 286

## КОМПОЗИЦИОННЫЕ МАТЕРИАЛЫ НА ОСНОВЕ АРИЛАЛИЦИКЛИЧЕСКИХ СОПОЛИИМИДОВ С РАЗЛИЧНЫМИ ДОБАВКАМИ С УЛУЧШЕННЫМИ СВОЙСТВАМИ

Умерзакова М.Б., Сариева Р.Б., **Кравцова В.Д.**

г. Алматы, АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова», e-mail: [umerzak@mail.ru](mailto:umerzak@mail.ru)

В настоящее время при создании новых термостойких композиционных материалов, в частности имидсодержащих, с улучшенными эксплуатационными свойствами широко используется модификация исходных полимеров. Известно, что одним из эффективных путей модификации высокомолекулярных соединений является синтез сополимеров. В процесс получения сополиимидов наряду с хорошо известными и наиболее изученными ароматическими мономерами все более успешно вовлекаются алифатические, кардовые, адамантансодержащие исходные соединения. Проведенными авторами настоящего сообщения исследованиями показано, что полимерные композиции с высоким уровнем технических характеристик могут быть получены в результате применения полиимидов алициклического строения, разработанных в АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова». Актуальность проведения исследований в указанном направлении обусловлена необходимостью улучшения их ряда свойств.

В настоящей работе приведены результаты исследований по созданию ариналициклических сополиимидов на основе алициклического диангирида (аддукта бензола, АБ и др.), диангиридов бензофенон- (БЗФ) и дифенилоксид- (ДФО) тетракарбоновой кислоты с 4,4'-оксианилином при различных соотношениях АБ и ДФО или БЗФ. Однако этот путь модификации к желаемому улучшению основных свойств композиционных материалов на основе данных сополиимидов не привел. В связи с этим был использован другой подход к модификации полимеров: введение в ариналициклический сополиимид низко- или других высокомолекулярных соединений, способствующих повышению характеристик полимерной матрицы. Исходя из этого были изучены особенности получения новых композиций на основе ариналициклических сополиимидов (СПИ) с полиэтиленгликолем (ПЭГ), полиакриламидом, монтмориллонитом, кремнийсодержащими соединениями, солями металлов и свойства материалов на основе полученных композиций.

В результате осуществления этих исследований созданы новые композиционные пленки на основе СПИ и указанных добавок. Показано, что при оптимальном их содержании пленки обладают улучшенными термическими, прочностными свойствами и др., превышающими аналогичные свойства исходного ариналициклического сополимера, при этом эластичность имеет допустимые для подобного материала значения. В связи с тем, что монтмориллонит и его алкилированная (АММ) форма не растворяются в органических растворителях и не проявляют совместимость к СПИ частицы АММ были модифицированы ПЭГ. Показано, что из композиций на основе СПИ+АММ+ПЭГ получены пленки с улучшенными на 4–25°C термическими и на 5–31 МПа прочностными свойствами по сравнению с исходными сополиимидами, при этом эластичность материала осталась на приемлемом уровне.

Найдено, что в случае применения в качестве добавок солей металлов наблюдается ускоряющее влияние солей металлов на процесс образования полиимида, а также увеличение приведенной вязкости полиимида в их присутствии. Полученные новые металлосодержащие композиционные пленки наряду с более высокой термической устойчивостью по сравнению с немодифицированным СПИ обладают стойкостью к воздействию агрессивных реагентов, меньшими значениями удельного объемного и поверхностного сопротивлений, а также различной окраской в зависимости от природы соли.

Установлено, что введение в СПИ кремнийсодержащих соединений позволило получить новые полимерные системы, из которых можно формировать пористые пленки. В свою очередь, их поры могут быть заполнены другими соединениями, что, может привести к получению новых материалов с отличными от исходных свойствами.

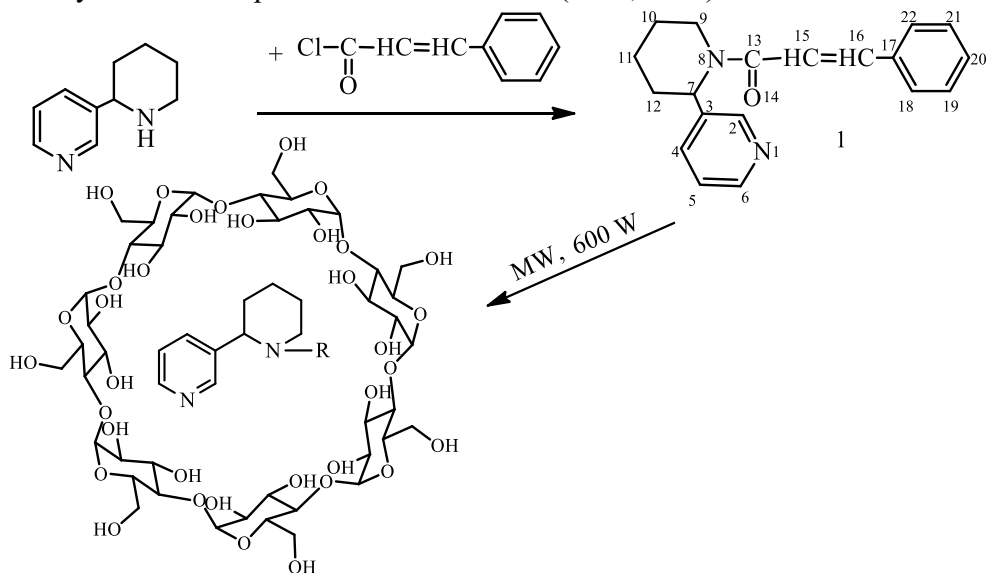
## СИНТЕЗ И ИЗУЧЕНИЕ НАНОСТРУКТУРИРОВАННЫХ СУПРАМОЛЕКУЛЯРНЫХ ПРОИЗВОДНЫХ АЛКАЛОИДА АНАБАЗИНА

Фазылов С.Д.<sup>а</sup>, Нуркенов О.А.<sup>а</sup>, Буркеев М.Ж.<sup>б</sup>, Сарсенбекова А.<sup>б</sup>,  
Пустолайкина И.<sup>б</sup>, Жумагалиева Т.<sup>б</sup>

<sup>а</sup> г. Караганда, Институт органического синтеза и углекислотной РК, e-mail: [iosu8990@mail.ru](mailto:iosu8990@mail.ru)

<sup>б</sup> Карагандинский университет им. Е.А.Букетова

Многие циннамоилсодержащие соединения рекомендованы к применению в медицине в качестве лечебных средств острых коронарных синдромов, нарушений сердечного ритма, гипертензии, сердечной недостаточности, а также как антибактериальные средства [1,2]. В данной работе представлены результаты изучения синтеза и исследования физико-химических свойств циннамоильного производного анабазина и перевода его в супрамолекулярную инкапсулированную водорастворимую форму. N-циннамоиланабазин получен в среде бензола ацилированием алкалоида хлорангидридомциннамоила (92-93%). Целевой продукт представляет собой белое кристаллическое вещество, растворимое в органических растворителях. С целью сравнительного изучения физико-химических и биологических свойств анабазина и N-циннамоиланабазина получены их водорастворимые формы использованием олигосахарида β-циклодекстрина. Клатратные комплексы включения анабазина и N-циннамоиланабазина (соотношения 1:1, 1:2, 1:3 и 1:4) получены в водно-спиртовой среде в условиях микроволновой активации (80°C, 120с).



Построены компьютерные модели полученных клатратных комплексов с использованием программы ChemOffice 12.0. и оценкой полных энергий исследуемых систем. Спектральные свойства комплексов характеризуются данными ИК, <sup>1</sup>H ЯМР-спектроскопии. Получены результаты термографических измерений на дифференциальном сканирующем калориметре. Рассмотрено влияние клатратообразования на кинетические параметры термической деструкции β-циклодекстрина и комплекса включения “β-циклодекстрин:субстрат”. Рассчитана энергия активации реакции термо-окислительной деструкции полученных клатратных комплексов и определены кинетические параметры процессов их терморазрушения.

### Литература

1. Takagi K., Tanaka M., Murakami Y., Morita H., Aotsuka T. // Eur. J. Med. Chem. Chim. Ther. 1986. Vol.21. P.65-68.
2. Bangroo P.N., Arora H.C. // Indian Journal of Chemistry. 1991. Vol.30A. P.816-818.

Работа выполнена при финансовой поддержке КН МОН РК, проект ПЦФ № BR10965230



## УЛЬТРАЗВУКОВАЯ АКТИВАЦИЯ В СИНТЕЗЕ ПРОИЗВОДНЫХ 9,10-АНТРАХИНОНА

**Харламова Т.В.**

*г. Алматы, АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова»*

Интерес к химии производных 9,10-антрахинона вызван тем, что они обладают фармакологической активностью и входят в состав многих природных и синтетических лекарственных препаратов. Особый интерес представляют производные антрахинона с различными функциональными группами, присутствие которых вызывает различные биологические эффекты [1]. Настоящее исследование является продолжением данной работы и посвящено сравнительному анализу методов синтеза производных с применением традиционных методик, а также с использованием факторов физического воздействия, таких как ультразвуковая активация. Химические процессы, протекающие в условиях сонохимической активации, привлекают большое внимание исследователей. Данный подход влияет на интенсификацию процесса, что может способствовать устранению некоторых проблем синтеза и увеличить выход целевого продукта. Использование ультразвука в химическом синтезе является одним из перспективных методов, поскольку ультразвук существенно влияет на скорость и направление реакций, а в некоторых случаях использование ультразвука повышает селективность химических процессов [2,3].

В последнее время наблюдается повышенный интерес к соединениям, содержащим в своей структуре фрагменты насыщенных циклических карбоновых кислот, в связи с их биологическим и фармацевтическим применением. В связи с этим была получена серия антрахиноновых производных, на основе 1,2- и 1,2,4-гидроксиантрахинонов, а также проведен сравнительный анализ методик с целью выявления оптимальных параметров синтеза монозамещенных продуктов. Введение ацильного остатка RCO-(ацила) в состав органического соединения, является широко используемым методом химической модификации. Одним из удобных методов введения ацильного остатка является использование галогенангидридов карбоновых кислот.

В работе использованы различные температурные режимы (30 °С, 45 °С и 65 °С), а также различное соотношение реагентов – от 1:1 до 1:3 (вещество:хлорангидрид). Синтез проводили при интенсивном перемешивании и нагревании реакционной смеси. Исследовано взаимодействие гидроксипроизводных 9,10-антрахинона с хлорангидридом циклопропан-, циклобутан-, циклопентан- и циклогексанкарбоновой кислоты. Для их получения реакции проводили в пиридине или хлороформе, при непродолжительном нагревании реакционной смеси, контролируя ход реакции с помощью ТСХ.

Показано, что в традиционном варианте наилучшим вариантом проведения синтезов для получения монозамещенных производных является использование в качестве растворителя пиридина, при соотношении реагирующих веществ 1:1-1,5. Использование избытка хлорангидрида приводит к получению полизамещенных производных, что значительно затрудняет хроматографическое выделение монозамещенных соединений, за счет образования смеси моно- и ди(три)замещенных продуктов [4].

Другим вариантом протекания процесса явилось использование ультразвука. Синтез при интенсивном перемешивании и нагревании реакционной смеси показал, что использование ультразвука сокращает время синтеза. Так, если использовать традиционный вариант реакции, время синтеза колеблется в пределах 3-3,5 часа, тогда как при ультразвуковой активации процесс завершился за 2-2,5 часа.

Во всех вариантах синтеза, для выделения монозамещенных производных была использована колоночная хроматография. В качестве сорбента был использован силикагель, а в качестве элюента – гексан и смесь гексан-этилацетат, с постепенным увеличением объемного содержания этилацетата. Физические и спектральные характеристики соединений, полученных как при традиционном синтезе, так и при ультразвуковой обработке, идентичны.

Результаты исследования показали, что использование ультразвука сокращает время синтеза и позволяет увеличить выход продуктов. Таким образом, применение альтернативного метода сонохимической активации показало лучшие результаты по сравнению с проведением процессов в традиционных условиях.

### **Литература**

1. V. YA. FV.YA. Fajr. 9,10 – Antrahinony i ih primenenie. [9,10 – Anthraquinones and their application.] Centr fotohimii RAN, Moskva, 1999, 92s. (in Russian).
2. S.R. Shirsath, S.H. Sonawane, P.R. Gogate, Intensification of extraction of natural products using ultrasonic irradiations-A review of current status, Chemical Engineering and Processing: Process Intensification 53 (2012) 10–23.
3. M. Toma, M. Vinatoru, L. Paniwnyk, T.J. Mason, Investigation of the effects of ultrasound on vegetal tissues during solvent extraction, Ultrason. Sonochem. 8 (2) (2001) 137–142.
4. T.V. Kharlamova, R.B. Seidakhmetova, K.D. Praliev, Chem Nat Compd. 55 (2019) 622- 625.

*Исследования выполнены при финансовой поддержке КН МОН РК, ПЦФВР10965255*

## АНАЛИЗ СТРУКТУРА-ФУНГИЦИДНАЯ АКТИВНОСТЬ В РЯДУ ПРОИЗВОДНЫХ АНТРАХИНОНА СОДЕРЖАЩИХ ФРАГМЕНТ ЦИКЛИЧЕСКОЙ КАРБОНОВОЙ КИСЛОТЫ

Харламова Т.В.

г. Алматы, АО «Институт химических наук им. А.Б. Бектурова»

Одним из приоритетных направлений создания новых лекарственных веществ является химическая модификация природных соединений и их синтетических аналогов путем введения в молекулу различных функциональных групп и конструирования молекул, усиливающих основной терапевтический эффект или приводящих к трансформации их биологической активности. Структурно сходные с антрациклинами, классом применяемых химиотерапевтических средств широкого спектра действия, антрахиноны представляют собой группу полициклических органических природных соединений, обладающих разнообразной биологической активностью и проявляющих различные фармакологические эффекты [1].

В связи с этим была получена серия антрахиноновых производных, на основе 1,2- и 1,2,4-гидроксиантрахинонов, путем взаимодействия гидроксипроизводных 9,10-антрахинона с хлорангидридом циклопропан-, циклобутан-, циклопентан- и циклогексанкарбонической кислоты, и исследовано влияние структурных особенностей на проявление биологической активности [2]. Для структур исходных соединений характерно наличие ОН-групп при С-1 и С-2 скелета антрахинона, так как именно этот структурный фрагмент присутствует в молекуле ализарина и пурпурина, а отличия заключаются в присутствии у последнего ОН группы при С-4.

В последние десятилетия отмечается значительный рост грибковых заболеваний [3]. В группах высокого риска находятся пациенты с нарушенной иммунной функцией, пациенты с множественными сопутствующими заболеваниями и пациенты в условиях интенсивной терапии [4]. Большинство используемых противогрибковых препаратов имеют различные недостатки с точки зрения токсичности, эффективности, а также стоимости, а их частое применение привело к появлению резистентных штаммов. Следовательно, существует большая потребность в разработке противогрибковых лекарственных средств и несмотря на открытие новых молекул, поиск новых противогрибковых агентов и характеристика новых мишеней являются актуальными.

В работе проведен анализ структура-фунгицидная активность в ряду производных антрахинона содержащих фрагмент циклической карбонической кислоты. Данные по исследованию фунгицидной активности соединений основаны на экспериментальных данных по отношению к штамму *Candidaalbicans* ATCC 10231, которое проведено методом диффузии в агар. Экспериментальные данные показали, что для пурпурина и его монозамещенных производных содержащих фрагмент циклопропан- и циклобутановой кислоты в концентрации в 1 мг зона задержки роста составила  $15 \pm 0,1$  (0,2) мм. То есть, введение циклического циклопропан- и циклобутанового фрагмента в структуру тригидроксантрахинона не влияло на увеличение фунгицидной активности по отношению *Candidaalbicans* ATCC10231, однако изменение размера цикла приводит к исчезновению активности, которая для тестируемых производных с циклопентан- и циклогексановым фрагментом в той же концентрации не была обнаружена.

Таким образом, одним из структурных параметров, оказывающем влияние на биологическую активность антрахиноновых молекул, является наличие гидроксильных групп. Базовые структуры имеют одинаковый антрахиноновый скелет, состоящий из двух кетогрупп в положении С-9 и С-10 и гидроксильных группы (при С-1, С-2 (С-4)), а различия в химически модифицированных соединениях заключаются в наличии или в отсутствии полярных функциональных групп (ОН-группы) при С-4 и в химической

природе заместителя при С-2 и антрахиноновой системы, которые отражаются на проявлении биоактивности. Исходя из данных по активности производных можно сделать заключение, что присутствие в молекулах циклического фрагмента не оказывало влияние на усиление фунгицидного действия. С увеличением размера цикла, входящего в состав заместителя в  $\beta$ -положении антрахиноновой системы, активность производных падает. Наличие в структуре пурпурина дополнительной гидроксильной группы при С-4 кольца А, делает тестируемые соединения более активными, чем соответствующие производные, полученные на основе 1,2-дигидроксиантрахинона, у которого данная функциональная группа отсутствует.

### Литература

1. J. Duval, V. Pecher, M. Poujol, E. Lesellier Research advances for the extraction, analysis and uses of anthraquinones: A review// Industrial Crops and Products. 94 (2016) 812-833.
2. T.V. Kharlamova, R.B. Seidakhmetova, K.D. Praliev //Chem Nat Compd. 55 (2019) 622-625.
3. K.M. Pianalto, J.A. Alspaugh, New horizons in antifungal therapy, J. Fungi 2 (2016) 1–24.
4. R.J. Hay, N.E. Johns, H.C. Williams, I.W. Bolliger, R.P. Dellavalle, D.J. Margolis et al. The global burden of skin disease in 2010: An analysis of the prevalence and impact of skin conditions. The Journal of Investigative Dermatology. 134(6) (2013) 1527-1534.

*Исследования выполнены при финансовой поддержке КН МОН РК, ПЦФ BR10965255*

## АЛФАВИТНЫЙ УКАЗАТЕЛЬ

### А

Абдиюсупов Г.Г. – с. 9  
Абилов Ж.А. – с. 56  
Абюров А.Ж. – с. 9  
Агабекова А.Б. – с. 90  
Агатаева А.А. – с. 10  
Ағатаева А.А. – с. 58  
Адекенов С.М. – с. 96  
Айтуарова А.Ш. – с. 31  
Алипбекова Ж.К. – с. 90  
Алтынбекова И.Ә. – с. 29  
Ануарбекова И.Н. – с. 12  
Аппазов Н.О. – с. 13  
Арипбай Е.А. – с. 16  
Арнт О.В. – с. 67  
Асылханов Ж.С. – с. 56  
Ахмедов У.К. – с. 34, 36  
Ахметова Г.С. – с. 38, 64, 65, 75  
Ахтаева Н.З. – с. 77

### Ә

Әлжанқызы А. – с. 67

### Б

Бажыкова К.Б. – с. 16, 18  
Базарбаев Б. М. – с. 13  
Баимбетов М.Н. – с. 100, 102  
Байгузина А.Р. – с. 62  
Байжанова Ш.Б. – с. 87, 90  
Байтурсынова Г.П. – с. 23, 46  
Бакибаев А. А. – с. 78  
Бакирова Р.Е. – с. 39  
Бактыбаева Л.К. – с. 55  
Баяхметова З.К. – с. 32, 72  
Бейсенбаев О.К. – с. 34, 36, 97  
Бекежанова Ф.А. – с. 75  
Бектенов Н.А. – с. 19  
Берганаева Г.Е. – с. 21, 22  
Бойко Г.И. – с. 71

Боташев Е.Т. – с. 90  
Бошкаева А.К. – с. 75, 77  
Буркеев М.Ж. – с. 39, 106

### В

Василец Е.П. – с. 67  
Вологжанина А.В. – с. 23, 46  
Воробьева И.С. – с. 50

### Г

Газалиев А.М. – с. 67, 74  
Губенко М.А. – с. 23

### Д

Датхаев У.М. – с. 38, 64, 65, 77  
Даулет Г. – с. 55  
Джиембаев Б. Ж. – с. 13  
Джусипбеков У.Ж. – с. 10, 72, 85  
Диярова Б.М. – с. 13

### Е

Ергалиева Э.М. – с. 18, 23, 46  
Ергожин Е.Е. – с. 27  
Ержанов К.Б. – с. 12, 56, 93  
Ермаков В.Е. – с. 53

**Ж**

Жакина А.Х. – с. 67  
Жанарбек А. – с. 96  
Жарқынбек Т.Е. – с. 29  
Животова Т.С. – с. 67  
Жолдыбаев С. – с. 9  
Жумагалиев С.Ж. – с. 100, 102  
Жумагалиева Т. – с. 106  
Жумалиева Г.Т. – с. 31  
Жуманова Н.А. – с. 55  
Жунусбекова Н.М. – с.30  
Жусупова А.И. – с. 31  
Жусупова Г.Е. – с. 31  
Жүсіпбеков Ө.Ж. – с. 32, 58

**И**

Иса А.Б. – с. 34, 36  
Исаева У.Б. – с. 38  
Искакова Т.К. – с. 21, 22, 30  
Искинеева А.С. – с. 39

**К**

Кадирбеков К.А. – с. 9  
Кайнарбаева Ж.Н. – с. 102  
Кайынбаева Р.А. – с. 10, 85  
Калдыбекова Ж.Б. – с. 87, 90  
Калугин С.Н. – с. 40, 56  
Камбарова Э.А. – с. 19  
Касымова Д.Т. – с. 31  
Каюкова Л.А. – с. 23, 46  
Киекбаева Л.Н. – с. 77  
Ким Ю.Ю. – с. 49  
Кичатов К.Г. – с. 50  
Кишкентаева А.С. – с. 74  
Ковалева А.Е. – с. 87  
Ковригина Т.В. – с. 27  
Кожобекова Н.Н. – с. 85  
Кожанова А.М. – с. 96  
Комарова Е.В. – с. 51, 53  
Кошетьова Ж.А. – с. 55  
Кравцова В.Д. – с. 105

Кудрявцева Е.В. – с. 67  
Кузьмина А.А. – с. 56  
Курмангалиева А.Б. – с. 46  
Кусаинова Г.К. – с. 30  
Кусаинова М.Ж. – с. 85

**Қ**

Қайыңбаева Р.А. – с. 58  
Қалдыбаева А.Б. – с. 61  
Қожабекова Н.Н. – с. 58

**Л**

Лангер П. – с. 18  
Ли Т. – с. 61  
Лутфулина А.Р. – с. 62  
Любченко Н.П. – с. 71

**М**

Максатова А.М. – с. 64, 65  
Малмакова А.Е. – с. 55, 61  
Машина О.А. – с. 66  
Мельников Е.А. – с. 27  
Мендибаева А.Ж. – с. 96  
Муканова М.С. – с. 12, 66, 93, 102  
Мулдахметов З.М. – с. 67  
Мурзагулова К.Б. – с. 31  
Мурзакасымова Н.С. – с. 19  
Мустафаева А. – с. 39  
Мухамедова Р.Ф. – с. 71

**Н**

Никитина А.П. – с. 53  
Нурбосынова С.Б. – с. 31  
Нурғалиева Г.О. – с. 72  
Нуркенов О.А. – с. 74, 106  
Нурмаганбетов Ж.С. – с. 74  
Нұрғалиева Г.О. – с. 32

**О**

Омарова Р.А. – с. 75  
Омирзакова Н.К.– с. 77  
Омырзаков М.Т. – с. 38, 64, 65

**П**

Паньшина С. Ю. – с. 78  
Пралиев К.Д. – с. 29, 38, 46, 49, 55, 61, 64, 65, 75  
Просочкина Т.Р. – с. 50  
Пустолайкина И. – с. 39, 106  
Пусурманова Г.Ж. – с. 97

**С**

Самойлов Н.А. – с. 79, 82  
Сариева Р.Б. – с. 105  
Сарсенбекова А. – с. 39, 106  
Сейлханов О.Т. – с. 38, 93  
Султанбаева Г.Ш.– с. 85  
Сұлтанбаева Г.Ш. – с. 58  
Сырманова К.К. – с. 87, 90  
Сычева Е.С. – с. 12, 66, 93

**Т**

Темиргазиев Б.С. – с. 96  
Тен А.Ю. – с. 29, 49  
Ткачев А.В. – с. 16  
Токсеитова А.Д. – с. 61  
Трапезникова Е.Ф. – с. 53  
Тулеев Б.И.– с. 96  
Туребекова Г.З.– с. 97  
Тусупкалиев Е.А. – с. 100, 102

**У**

Умерзакова М.Б.– с. 105

**Ф**

Фазылов С.Д.– с. 39, 74, 106

**Х**

Хакимболатова К.Х. – с. 27, 100, 102  
Харламова Т.В.– с. 107, 109  
Худайбергенов Н.С. – с. 30

**Ц**

Цукерман М.В. – с. 56

**Ч**

Чернякова Р.М. – с. 10, 58  
Чалов Т.К. – с. 27  
Чинибаева Н.С. – с. 30

**Ш**

Шакирова А.Қ. – с. 32, 72

**Ю**

Ю В.К. – с. 29, 49, 55, 61

**Я**

Ящук К.В. – с. 66