

научной конференции, посвященной 95-летию со дня рождения чл.-кор. НАН Беларуси Е. А. Сидоровича, Минск, 9–10 марта 2023 г. / Нац. акад. наук Беларуси [и др.] ; редкол.: Ж. А. Рупасова [и др.]. – Минск : ИВЦ Минфина, 2023. – С. 117–120.

К содержанию

УДК 543.8:543.4:543.5

Е. В. ВОРОБЬЁВА, С. Г. КАРПОВА

Беларусь, Гомель, ГГУ имени Ф. Скорины

Россия, Москва, ИБХФ имени Н. М. Эмануэля РАН

ИЗМЕНЕНИЯ СТРУКТУРЫ АНТИОКСИДАНТА N-ФЕНИЛ-2-НАФТИЛАМИНА ПРИ ТЕРМОКОНТАКТЕ С МЕДЬЮ

Стабилизацию структуры полиолефинов проводят путем введения в его структуру антиоксидантов (или стабилизаторов). Среди промышленных антиоксидантов наиболее успешно используются водород-донорные антиоксиданты, которые по своей химической структуре представляют собой вторичные ароматические амины или затрудненные фенолы. Наличие металлов переменной валентности или их соединений в составе полимера приводит к катализу окисления и быстрому расходу антиоксиданта. Но в некоторых исключительных случаях влияние металла может привести к увеличению ингибирующей способности антиоксиданта. Так, установлен эффект увеличения ингибирующей способности антиоксиданта неозона Д (N-фенил-2-нафтиламина) в полиэтилене в присутствии меди или ее соединений [1; 2]. Ряд исследований, проведенных при изучении этого эффекта, показал, что причиной возрастания термоокислительных свойств полимерного материала является непосредственное взаимодействие антиоксиданта неозона Д и меди [2].

Цель работы – изучить изменения структуры N-фенил-2-нафтиламина в условиях термоконтакта с медью.

В экспериментах использовали антиоксидант неозон Д (N-фенил-2-нафтиламин, CAS 135-88-6; $C_{16}H_{13}N$) и продукт, полученный термоокислением неозона Д на поверхности меди в течение 10 ч при температуре 150 °С. Структуру получаемого продукта изучали спектрофотометрическим методом (спектрофотометры Solar PB2201A, Vertex 70), спектры регистрировали в УФ, видимой и ближней ИК областях. ЭПР-спектры (X-диапазона) регистрировали на автоматизи-

рованном спектрометре ЭПР-В (Институт химической физики РАН). Значение микроволновой мощности в резонаторе не превышало 1 мВт, что позволяло избежать эффектов насыщения, амплитуда модуляции всегда была существенно меньше ширины резонансной линии и не превышала 0,5 Гс. Запись спектров ^{13}C ЯМР осуществлялась в количественном режиме на указанном выше спектрометре с рабочей частотой для ядер ^{13}C 20 МГц. Для уменьшения T1 использовали релаксант – трис-ацетилацетонат хрома, добавляемый в исследуемый раствор.

В УФ-спектрах ацетоновых растворов окисленного продукта N-фенил-2-нафтиламина отмечен сдвиг основного пика поглощения (300–350 нм) в длинноволновую область, что указывает на появление электроноакцепторных заместителей в структуре. ИК-анализ показал снижение интенсивности полосы 1340 см^{-1} (N-H-связь), что доказывает разрушение аминных групп в окисленном соединении.

В спектре ЯМР ^{13}C (растворитель ацетон- d_6). Кроме сигналов растворителя, наблюдается ряд линий, принадлежащих ароматическим атомам углерода: $\delta = 145 \div 110$ м.д. Два самых слабых сигнала (144.4 м.д. и 142.6 м.д.) относятся к атомам углерода, связанным с аминогруппой. После нагревания образцов на медной подложке в течение 10 ч исходное соединение превращается как минимум в три других соединения, имеющих в своем составе кроме ароматических колец также гетероатомы (азот или, возможно, кислород). Это видно по появлению дополнительных сигналов в области $\delta = 148 \div 141$ м.д. Поскольку указанные сигналы имеют обычную ширину и химические сдвиги, можно заключить, что в анализируемой смеси отсутствуют не только соединения меди, но и ее комплексы.

ЭПР-анализ окисленного продукта показал наличие парамагнитных центров в его составе. Причем полученный сигнал ЭПР (дуплет при напряженности поля 3340 Гс) оказался устойчивым во времени. Измерения, проведенные шесть месяцев спустя, полностью повторили сигнал первичного анализа. Значит, при окислении N-фенил-2-нафтиламина в качестве одного из продуктов образуются стабильные радикалы, способные эффективно ингибировать радикальный процесс окисления полимера.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННОЙ ЛИТЕРАТУРЫ

1. Лин Д. Г. Влияние аминного антиоксиданта на окисление полиэтилена в контакте с медью / Д. Г. Лин, Е. В. Воробьева // Пластические массы. – 2002. – № 1. – С. 9–11.

2. Lin, D. G. On Increasing the Inhibiting Property of Amine Antioxidant in Contact with Copper and Its Compound / D. G. Lin, E. V. Vorobyova // J. of Applied Polymer Science. – 2010. – Vol. 118, № 5, iss. 3. – P. 1430–1435. DOI: 10.1002/app.32396

К содержанию

УДК 547.234.1+547.853+004.942

Г. А. ГОРДУНОВ^{1,2}, И. В. МИНЕЕВА^{1,2}

¹Беларусь, Минск, БГУ

²Беларусь, Минск, НИИ ФХП БГУ

СИНТЕЗ ПРОИЗВОДНЫХ 6-ЗАМЕЩЕННЫХ 5-ЦИАНО-2-ТИОПИРИМИДИНОНОВ И АНАЛИЗ ИХ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ БИОАКТИВНОСТИ *IN SILICO*

На сегодняшний день гетероциклические соединения находят широкое применение в синтезе фармакологически активных веществ [1]. В частности, производные таких ключевых строительных блоков ДНК и РНК, как пиримидины, проявляют различные виды фармацевтического действия, например, противовирусное [2] и антибактериальное [3]. Не так давно было обнаружено, что некоторые серии производных 5-циано-2-тиоурацила проявляют антимикробную активность по отношению к таким видам бактерий, как золотистый стафилококк *Staphylococcus aureus*, сенная палочка *Bacillus subtilis* и кишечная палочка *Escherichia coli*, а также исключительную противогрибковую активность против простейшего дрожжевого грибка *Candida albicans* и одного из видов плесневых грибов *Aspergillus niger* [4; 5]. В то же время продукты S- и N-алкилирования пиримидин-2-тиона были заявлены как новые цитотоксические средства [6], а также как уникальные ингибиторы обратной транскриптазы ВИЧ [7]. В научной литературе также описаны производные 6-арил-5-циано-2-тиоурацила и их конденсированных гетероциклов, которые проявили свою химиотерапевтическую активность в качестве противораковых агентов [8].

Целью нашего научного исследования стал синтез новых производных 6-замещенных-5-циано-2-тиопиримидинона путем реализации мультикомпонентной реакции с последующим проведением компьютерного моделирования *in silico* для прогнозирования, анализа и дальнейшей оценки их возможной биологической активности.