

Синтез, физико-химические характеристики и прогнозирование биологической активности (*E*)-4-нитро-2,3,5-триоксо-6-(2-(4-фенилтиазол)-2-ил)гидрозинилиден)пиперидин-4-ида и комплексных соединений на его основе

© **Боженкова¹ Светлана Сергеевна, Полянская^{1,2,*+} Надежда Александровна, Караваев^{2,3} Игорь Александрович, Титкова¹ Марина Васильевна, Хан² Зуи Линь, Ковальчукова^{1,2,*} Ольга Владимировна**

¹ *Российский государственный университет им. А.Н. Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство). ул. Садовническая, 33, стр.1. г. Москва, 115035. Россия. Тел.: +7 (495) 811-01-01.*

² *Российский университет дружбы народов (РУДН). ул. Миклухо-Маклая, 6. г. Москва, 117198. Россия. Тел.: +7 (495) 955-09-10. E-mail: polyanskaya_na@pfur.ru*

³ *Институт тонких химических технологий имени М.В. Ломоносова, МИРЭА-Российский технологический университет. р. Вернадского, 86. г. Москва, 119571. Россия. Тел.: +7 (499) 215-65-65.*

*Ведущий направление; +Поддерживающий переписку

Ключевые слова: гетероциклические азопроизводные, 2,3,5,6-тетраоксо-4-нитропиридинат аммония, 2-гидразино-4-фенилтиазол, синтез, спектральные характеристики, биологическая активность, токсичность.

Аннотация

Конденсацией 2,3,5,6-тетраоксо-4-нитропиридината аммония с 2-гидразино-4-фенилтиазолом получено гетероциклическое азосоединение – (*E*)-4-нитро-2,3,5-триоксо-6-(2-(4-фенилтиазол)-2-ил)гидрозинилиден)пиперидин-4-ид (НЛ), которое может существовать в виде трех таутомерных форм. Синтез исходного α -дикарбонильного соединения – 2,3,5,6-тетраоксо-4-нитро-пиридината аммония был проведен путем окислительного каталитического нитрования 2-амино-3-гидрокси-пиридина в присутствии оксидов редкоземельных металлов. Согласно данным ЭСП, ЯМР ¹H, ИК-спектроскопии молекула НЛ в кристаллическом состоянии и в растворах присутствует в форме азо-ОН-таутомера, стабилизированного внутримолекулярной водородной связью О-Н...N. “Подвижный” атом водорода локализован у одного из атомов кислорода 2,3,5,6-тетраоксо-4-нитропиридинового фрагмента. Методом спектрофотометрического титрования в водно-этанольных растворах определена константа кислотности (рКа = 10.20±0.14) НЛ, а также константы образования и состав комплексов кобальта(II), никеля(II), меди(II), цинка(II) и кадмия(II) с НЛ в растворах. Выделены в кристаллическом состоянии и описаны совокупностью методов исследования комплексные соединения состава ML₂-ДМФА, где М = Cu²⁺, Co²⁺, Ni²⁺, Zn²⁺, Cd²⁺. Высказано предположение о способе координации лиганда L⁻ атомами металлов. Проведено компьютерное прогнозирование потенциальной биологической активности и токсичности НЛ. Установлено, что основным типом активности является противоаллергическая, а класс токсичности четвертый/пятый в зависимости от способа введения. Тестовое крашение показало, что НЛ и его комплексные соединения имеют сродство к полиамиду, и способны окрашивать полиамидные искусственные волосы в фиолетово-розовые тона. Выкраски устойчивы к сухому трению, однако неустойчивы к стирке и практически полностью смываются через пять промывочных циклов, в связи с чем изученные соединения можно рекомендовать для использования в косметических средствах в составе оттеночных средств.

Выходные данные для цитирования русскоязычной печатной версии статьи:

Боженкова С.С., Полянская Н.А., Караваев И.А., Титкова М.В., Хан Зуи Линь, Ковальчукова О.В. Синтез, физико-химические характеристики и прогнозирование биологической активности (*E*)-4-нитро-2,3,5-триоксо-6-(2-(4-фенилтиазол)-2-ил)гидрозинилиден) пиперидин-4-ида и комплексных соединений на его основе. *Бутлеровские сообщения*. 2024. Т.79. №7. С.43-51. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-7-43

Выходные данные для цитирования русскоязычной электронной версии статьи:

Боженкова С.С., Полянская Н.А., Караваев И.А., Титкова М.В., Хан Зуи Линь, Ковальчукова О.В. Синтез, физико-химические характеристики и прогнозирование биологической активности (*E*)-4-нитро-2,3,5-триоксо-6-(2-(4-фенилтиазол)-2-ил)гидрозинилиден) пиперидин-4-ида и комплексных соединений на его основе. *Бутлеровские сообщения А*. 2024. Т.8. №3. Id.5. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-7-43/ROI-jbc-RA/24-8-3-5

The output for citing the English online version of the article:

Svetlana S. Bozhenkova, Nadezhda A. Polyanskaya, Igor A. Karavaev, Marina V. Titkova, Han Zui Lin, Olga V. Kovalchukova. Synthesis, physicochemical characteristics and prediction of biological activity of (*E*)-4-nitro-2,3,5-trioxo-6-(2-(4-phenylthiazol)-2-yl)hydrosilylidene) piperidin-4-ide and complex compounds based on it.. *Butlerov Communications A.* **2024.** Vol.8. No.3. Id.5. DOI: 10.37952/ROI-jbc-01/24-79-7-43/ROI-jbc-A/24-8-3-5