

Table 2

Prediction of acute toxicity in rats using the GUSAR software product

1(a)

Rat IP LD50 Log10(mmol/kg)	Rat IV LD50 log10(mmol/kg)	Rat Oral LD50 log10(mmol/kg)	Rat SC LD50 log10(mmol/kg)
0,010 in AD	-0,886 in AD	0,185 in AD	0,037 in AD
Rat IP LD50 (mg/kg)	Rat IV LD50 (mg/kg)	Rat Oral LD50 (mg/kg)	Rat SC LD50 (mg/kg)
274,600 in AD	34,850 in AD	411,200 in AD	292,100 in AD

1(b)

Rat IP LD50 log10(mmol/kg)	Rat IV LD50 log10(mmol/kg)	Rat Oral LD50 log10(mmol/kg)	Rat SC LD50 log10(mmol/kg)
-0,075 in AD	-0,967 in AD	0,450 in AD	-0,032 in AD
Rat IP LD50 (mg/kg)	Rat IV LD50 (mg/kg)	Rat Oral LD50 (mg/kg)	Rat SC LD50 (mg/kg)
249,300 in AD	31,960 in AD	834,300 in AD	275,200 in AD

Table 3

Acute classification of rodent toxicity by chemicals under the OECD project using the GUSAR software product

1(a)

Rat IP LD50 Classification	Rat IV LD50 Classification	Rat Oral LD50 Classification	Rat SC LD50 Classification
Class 4 in AD	Class 3 in AD	Class 4 in AD	Class 4 in AD

1(b)

Rat IP LD50 Classification	Rat IV LD50 Classification	Rat Oral LD50 Classification	Rat SC LD50 Classification
Class 4 in AD	Class 3 in AD	Class 4 in AD	Class 4 in AD

As can be seen from table 1, we can say that both compounds exhibit different inhibitory ability.

Next, a forecast of acute toxicity of the test compound was carried out using the software product GUSAR (General Unrestricted Structure-Activity Relationships) presented in tables 2 and 3.

From table 3 we can conclude that the toxicity of both compounds is low, 3-4 hazard class.

Thus, the results obtained in predicting biological activity using the PASS program and the toxicity of the studied compounds using the GUSAR software product allow us to conclude that compound 1 (b) is more active than 1 (a), and the toxicity of both compounds is equal. Therefore, compound 1 (b) has a higher potential activity, and this compound can be prospectively used for further laboratory studies.

References

1. Poroykov V.V. Computer prediction of the biological activity of substances: the limits of the possible. Chemistry in Russia, 1999, No. 2, 8-12.
2. Huseynov F.I., Asadov H.A., Burangulova R.N. Moscow, Chemistry of Heterocyclic Compounds, 2001, Volume 37, No. 8, p. 1044.

МЕТОДЫ ЗАЩИТЫ ПОЛИМЕРНЫХ МАТЕРИАЛОВ ОТ СТАРЕНИЯ

Паненко Г.А., Тлехусеж М.А.

ФГБОУ ВО «Кубанский государственный технологический университет», Краснодар,
e-mail: panenko01@mail.ru

Конструкции на основе полимерных материалов стали неотъемлемой частью современ-

ной промышленности. Химические и физические свойства высокомолекулярных соединений способствуют их повсеместному использованию [1]. В рамках эксплуатации полимерных материалов требуемый срок службы может составлять несколько десятков лет. Потому исследование способов защиты полимерных материалов от старения является актуальным направлением химической науки.

Цель работы: знакомство с различными методами защиты полимерных материалов от старения.

Старение полимеров – это совокупность физических и химических превращений, происходящих при переработке, хранении и эксплуатации полимерного материала и приводящих к потере им комплекса необходимых свойств. Данный процесс сопровождается нарушением структуры и строения макромолекул. Деструкция – процесс разрушения полимера с разрывом связей макромолекул. Структурирование – процесс образования макромолекул из образовавшихся в результате деструкции осколков [2].

Основные причины, влияющие на разрушение полимерных материалов, – это окисление и биологическое воздействие.

Окисление и биологическое старение полимеров. Химическое взаимодействие полимера с кислородом, приводящее к его окислению, играет большую роль в процессе старения полимерного материала. Важнейшими факторами, влияющими на скорость окисления, являются

температура, с которой связан процесс термоокислительного старения, отравление полимера металлами, а так же солнечный свет. Для защиты полимерных конструкций от ультрафиолета применяются различные лаки и эмали, снижающие воздействие солнечного света, либо полностью перекрывающие его доступ к полимерному материалу [3].

Биологическое старение полимеров обусловлено воздействием на материал микроорганизмов (биодеструкторов) – бактерий, грибов, а так же лишайников и водорослей. В процессе своей жизнедеятельности эти микроорганизмы способны выделять различные ферменты и продукты своей жизнедеятельности, приводящие к разрушению структуры полимера. На долю биологических воздействий приходится более 20% от общего числа повреждений полимерных материалов, а так же изделий и сооружений из них.

Методы защиты от старения. Защита полимерных материалов от коррозии является комплексным процессом. Она может осуществляться на стадии производства полимера при добавлении антиоксидантов – веществ, ингибирующих процесс окисления. Антиоксиданты делятся на 2 группы: первичные и вторичные. Первичные защищают изделие весь срок службы. К ним относят вторичные ароматические амины и замещенные фенолы. Вторичные антиоксиданты изолируют полимер до его переработки в изделие (фосфиты и фосфониты, металлические соли дитиокарбаматов и дитиосульфатов, тиоэфиры) [4].

Одним из перспективных направлений химической промышленности является использование антиоксидантов, полученных из растительного сырья. Помимо малого токсического воздействия на человека, их производство практически не загрязняет окружающую среду. К примеру, для защиты от термоокисления используются меланины – природные конденсированные полимеры, для которых характерно устойчивое свободно-радикальное состояние [5].

В процессе эксплуатации противокоррозионная защита заключается в обработке полимерного материала пропитками либо покрытием эмалями. Для внешней защиты от окисления используются различные эмали. Эмали должны обладать низкой диффузной проницаемостью для того, чтобы не дать влаге извне взаимодействовать с защищаемым материалом. К таким эмалям относят, например, полиуретановые покрытия (эмали ФП-566, ВЭ-46, УР-1161 и др.), содержащие группу $[-CONH-R-NHCOO-R'-O-]_n$.

Для защиты от воздействия микроорганизмов (грибов, бактерий, водорослей) существует несколько различных путей: поддержание правильного температурного и влажностного ре-

жима, физические методы, а также химические средства. К физическим методам относится применение фильтров, электромагнитного, ультрафиолетового и радиоизлучения.

Наиболее эффективным химическим методом является внедрение в материал низкомолекулярных или полимерных биоцидов. Биоциды, используемые для уничтожения микроорганизмов, можно разделить на 2 группы: 1) фунгициды применяются для противогрибковой защиты материалов, главным образом от плесневых грибов; 2) бактерициды используются в качестве защиты от бактерий гнилостных, слизеобразующих и кислотообразующих.

Изначально в качестве добавок использовались биоциды, содержавшие олово, ртуть, свинец и мышьяк (например, триоксид мышьяка As_2O_3). Однако, позже от них отказались в пользу менее токсичных соединений на основе меди (8-оксихинолят меди $C_{18}H_{12}CuN_2O_2$) и цинка (хлорид цинка, двойные хромово-кислые соли цинка и калия, фосфат цинка, смесь фосфатов цинка и хрома, диметилдитиокарбамат цинка и др.). Механизм действия данных добавок заключается в способности проникать в клетку микроорганизма или накапливаться на ее поверхности, вызывая ингибирование ферментных систем бактерий или грибов [6].

Заключение. Невозможно назвать сферу нашей жизни, в которой бы не применялись полимерные материалы и изделия из них. В связи с этим защита полимеров от старения является актуальной задачей, требующей комплексного подхода. Факторы, влияющие на процесс разрушения высокомолекулярных соединений, различны по своей сути. Поэтому выбор методов защиты полимерных материалов от коррозии зависит от условий эксплуатации.

Список литературы

1. Медведева М.Н., Тлехусеж М.А. Пластмассы инженерно-технического назначения // Научное обозрение. Педагогические науки. 2019. № 4-4. С. 73-76.
2. Черезова Е.Н., Мукменева Н.А., Архиреев В.П. Старение и стабилизация полимеров: учебное пособие. Ч.1. – Казань: изд-во КНИТУ, 2012. – 140 с.
3. Семенова Л.В., Козлова А.А. Лакокрасочные покрытия для защиты полимерных композиционных материалов // Труды ВИАМ: электр. науч.-технич. журнал 2013. № 4. URL: http://viam-works.ru/ru/articles?art_id=28 (дата обращения: 24.12.2019).
4. Слюсарь О.А., Долгополова Е.В. Основные представления о механизме действия антиоксидантов полимеров // Международная научно-техническая конференция молодых ученых БГТУ им. В.Г. Шухова: сб. ст. Междунар. конф. (Белгород, 01-20 мая, 2017 г.). – С. 1812-1815.
5. Каблов В.Ф., Новопольцева О.М., Кочетков В.Г. Использование биоантиоксидантов растений для защиты каучуков и резин от термоокислительного старения // Резиновая промышленность: сырье, материалы, технологии: сб. докладов научно-практич. конф. (Москва, 29 мая – 02 июня 2017 г.). – С. 161-165.
6. Донскова Ю.В. Защита полимерных материалов от поражения микромицетами // Академическая публицистика. 2019. № 4. С. 12-15.

DEVELOPMENT OF NEW CATALYSTS BASED ON CHELATE COMPLEXES WITH N, O – CONTAINING ORGANIC COMPOUNDS

Tovkaleva E.V., Ermolaeva A.A.,
Diyarova N.R., Nikolaev A.Yu.

Kazan National Research Technological University,
e-mail: lavrovaom@yandex.ru

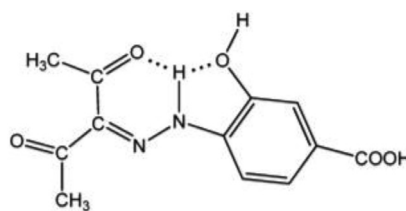
Scientific adviser: Lavrova O.M.

Currently, there is a tendency to move from single-component catalysts of simple composition to complex multi-component and multifunctional, such as complex-based catalysts. It was noted that the catalytic activity of the complex compound with the metal increases precisely with the chelate structure of the complex.

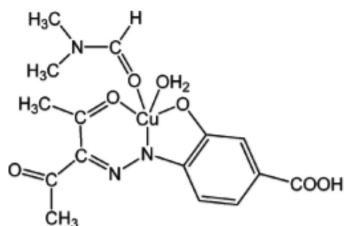
One of the known applications of copper complexes relates to their use as catalysts in various oxidation reactions, while cyclohexane oxidation is an important and widely studied catalytic conversion, which is carried out by industrial chemical processes, but with low conversions and low selectivity, therefore it is of great practical interest to develop more effective, as well as easily synthesized, reusable and environmentally friendly catalyst for this oxidation process.

The selective oxidation of alcohols to the corresponding aldehydes or ketones is another fundamental transformation in both laboratory and industrial syntheses, often used, for example, for the preparation of pharmaceuticals, flavors and fragrances. In this case, the development of new catalytic oxidation systems with high selectivity using cheap and environmentally friendly oxidizing agents (for example, molecular oxygen) is also very attractive.

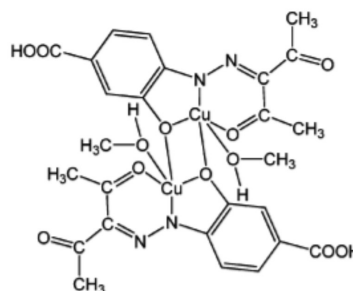
The synthesis of new heteroligand water-soluble homogeneous copper (II) -based catalysts with N,O-containing ligands is promising for stereospecific C-H functionalization in an aqueous medium. Such catalysts can be successfully used in the synthesis of multifunctional compounds that are of interest in the molecular design of heterocyclic systems.



Scheme 1 3-(2-Hydroxy-4-carboxyphenylhydrazono)pentane-2,4-dione (H₃L, 1).

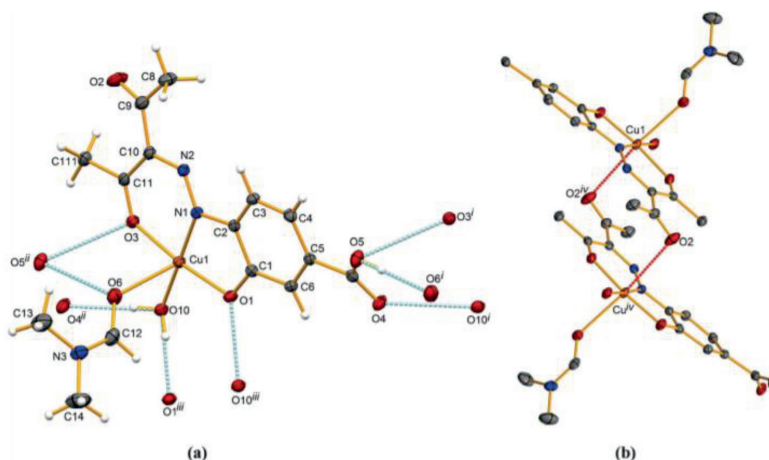


2



3

Scheme 2 Schematic representations of complexes 2 and 3.



Pic. 1. ORTEP diagrams of complex 2 (a) with the atom numbering scheme and showing the interactions of hydrogen bonds, and (b) showing the bonding of neighboring molecules through intermolecular contact interactions of CuO, generating octahedral binuclear aggregates. Ellipsoids are drawn with probability