

Полученные соединения были охарактеризованы методами спектроскопии ядерного магнитного резонанса и рентгеноструктурной дифракции, с подтверждением наличия короткого контакта, характерного для галогенного связывания, между атомом иода в составе катиона и атомами кислорода или азота в составе аниона. Помимо рентгеноструктурного анализа наличие ГС было подтверждено *in silico* DFT расчетами

с отображением критических связевых точек и связевых путей между кислотой и основанием Льюиса. Также расчетом электростатического потенциала было продемонстрировано влияние акцепторного заместителя на выраженность области сигма-дырки.

Исследование при финансовой поддержке гранта Российского научного фонда № 23-73-10091.

### Список литературы

1. Cavallo G. et al. // *Chemical reviews*. – 2016. – V. 116. – № 4. – P. 2478–2601.
2. Wolf J. et al. // *Angewandte Chemie International Edition*. – 2020. – V. 59. – № 38. – P. 16496–16500.

## БЛОКИРОВАНИЕ СВОБОДНЫХ ФУНКЦИОНАЛЬНЫХ ГРУПП КАК МЕТОД УПРАВЛЕНИЯ ЦИТОТОКСИЧНОСТЬЮ АЛКОКСИАМИНОВ

Ю. А. Колесникова

Научный руководитель – к.х.н., доцент ИШХБМТ ТПУ П. В. Петунин

Национальный исследовательский Томский политехнический университет  
634050, г. Томск, пр. Ленина, 30  
yak35@tpu.ru

Арсенал современной противораковой химиотерапии насчитывает уже не одно поколение препаратов [1]. Однако общей проблемой остаётся системная цитотоксичность, возникновение побочных эффектов и малая специфичность, которые оказывают разрушающее действие на здоровые системы организма. Одним из подходов к снижению общей цитотоксичности является использование пролекарственных средств. Пролекарство само по себе не оказывает цитотоксического эффекта, однако в процессе биотрансформаций в условиях клеточной среды под действием нативных клеточных ферментов или естественных метаболитов клетки происходит высвобождение активного агента и, как следствие, клеточная гибель [2]. Химической основой таких препаратов могут служить прекурсоры активных алкильных радикалов. Одним из наиболее изученных в данной области классом веществ являются алкоксиамины, которые в результате гомолитического разрыва связи C–ON генерируют два вида радикалов: стабильный нитроксильный и активный алкильный радикал, выступающий в роли цитостатика [3]. В одной из последних работ было проведено исследование широкого ряда алкоксиаминов различного строения как потенциальных агентов противо-

раковой терапии [4]. Было показано, что лимитирующим фактором активации цитостатика является не только время полуреакции гомолиза алкоксиамина, но и размер молекулы, наличие функциональных групп, способных к протонированию и депротонированию, а также возможность формирования внутримолекулярных водородных связей, определяющих пространственную конформацию.

В рамках нашей работы рассматривалась трансформация ключевых функциональных групп в структуре алкоксиаминов как метод контроля их биологической активности. Благодаря наличию свободных активных групп, появляется возможность «включать» и «выключать» цитотоксические свойства вещества, так как эти группы играют решающую роль в гомолизе алкоксиамина и, как следствие, высвобождении цитостатика.

Противораковая активность модельных соединений была подтверждена в рамках *in vitro* тестов на линиях различных нормальных и опухолевых клеток. Полученные результаты лягут в основу создания противоракового препарата молекулярно-нацеленного действия. Планируется синтезировать субстрат, в структуре которого в качестве биологически активной мишени будет

присутствовать специфичный для определенной опухоли сахарный остаток. Таким образом, помимо селективного высвобождения цитостатика будет достигнута избирательность поглощения

вещества раковыми клетками ввиду их ускоренного метаболизма. Помимо синтеза будет проведено сравнительное исследование активности диастериомеров алкоксиаминов.

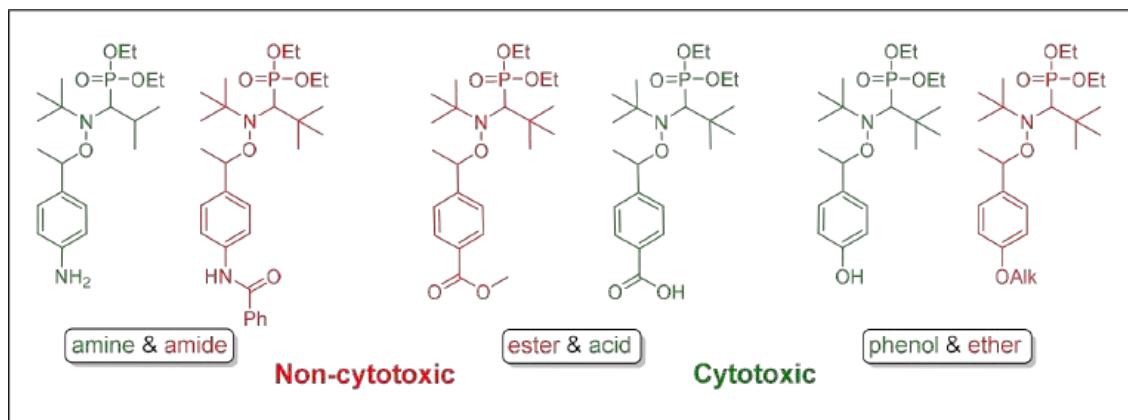


Схема 1. Структуры активных и «инактивированных» алкоксиаминов

### Список литературы

1. Thurston D.E., Pysz I. *Chemistry and pharmacology of anticancer drugs*. – CRC press, 2021.
2. Andrianomenjanahary S. et al. *Synthesis of novel targeted pro-prodrugs of anthracyclines potentially activated by a monoclonal antibody galactosidase conjugate (part 1)* // *Bioorganic & medicinal chemistry letters*. – 1992. – V. 2. – №. 9. – P. 1093–1096.
3. Audran G. et al. *Alkoxyamines: A new family of pro-drugs against cancer. Concept for therapeutics* // *Organic & biomolecular chemistry*. – 2014. – V. 12. – № 5. – P. 719–723.
4. Piris P. et al. *Conditional generation of free radicals by selective activation of alkoxyamines: towards more effective and less toxic targeting of brain tumors* // *Chemical Science*. – 2023. – V. 14. – № 29. – P. 7988–7998.

## ОПРЕДЕЛЕНИЕ ОПТИМАЛЬНОГО СООТНОШЕНИЯ РЕАГЕНТОВ ДЛЯ СИНТЕЗА АКТИВНОЙ ОСНОВЫ ИНГИБИТОРА КОРРОЗИИ

В. Д. Котехова, М. В. Куксина

Научный руководитель – д.х.н., профессор М. А. Силин; д.т.н., профессор Л. А. Магадова

ФГАОУ ВО «Российский государственный университет нефти и газа (научный исследовательский университет) имени И. М. Губкина»  
119991, Россия, г. Москва, Ленинский пр-т, д. 65  
marilasakh@mail.ru

Основной проблемой в обеспечении безопасного и надежного функционирования нефтепромышленного оборудования является коррозионное разрушение металла под воздействием окружающей среды. На сегодняшний день наиболее эффективным и экономичным методом противодействия коррозии признано применение ингибиторов.

Производные имидазолина широко распространены в качестве активной основы ингибито-

ров коррозии благодаря их сильной полярности и высоким ингибирующим свойствам. Кроме того, учитывая тенденции повышения внимания к экологической безопасности применяемых реагентов нужно обратить внимание на низкую токсичность и биоразлагаемость имидазолинов [1].

Объектами исследования являлись производные имидазолина, синтезированные на основе олеиновой кислоты и ХЭПА (Higher Ethylene