

Вараўка В. А., Галуц С. А.

ЗАЛЕЖНАСЦЬ РАСТВОРАЛЬНАСЦІ ОКСА-ЗЛУЧЭННЯЎ АД ПРЫРОДЫ КАРБАНІЛЬНАЙ ГРУПЫ І БУДОВЫ РЭЧЫВАЎ

Навуковы кіраўнік канд. хім. навук, дац. Лахвіч Т. Т.

Кафедра біяарганічнай хіміі

Беларускі дзяржаўны медыцынскі ўніверсітэт, г. Мінск

Актуальнасць. Наяўнасць кетоннай ці альдэгіднай групы ў складзе окса-злучэнняў уплывае на шэраг фізіка-хімічных уласцівасцяў. Так, увядзенне ў структуру рэчыва окса-групы падвышае гідрафільнасць, пры гэтым, у адрозненне ад аміна- і гідраксільнай груп, ліпафільнасць не змяняецца. Гэтыя асаблівасці трэба ўлічваць падчас пошуку новых біялагічна актыўных злучэнняў (окса-група здольная забяспечыць дадатковыя ўзаемадзеянні малай малекулы з лекавай мішэнню), маючы на ўвазе неабходнасць выкарастыння біядаступных формаў (гідрафільнасць/ліпафільнасць у значнай ступені ўплываюць на біядаступнасць, якая таксама залежыць ад спосабу ўвядзення лекавага сродку і метабалізму). Традыцыйна, падвышэнне гідрафільнасці за кошт окса-групы тлумачыцца ўтварэннем міжмалекулярных вадародных сувязяў паміж малекуламі рэчыва і вады з удзелам двух электронных пар карбанільнай групы. Але такое тлумачэнне супярэчыць дадзеным аб практычна аднолькавым уплыве окса- і гідраксільнай груп на гідрафільнасць; пры гэтым гідраксільная група ўтрымлівае моцна палярызаваную сувязь О-Н, якая з'яўляецца донарам пратона. Іншым цікавым фактам, які не тлумачыць згаданы падыход, з'яўляецца высокая парцыяльная ліпафільнасць окса-групы. У дадзенай працы для пацверджання новай гіпотэзы прыроды гідрафільнасці/ліпафільнасці окса-групы мы правялі параўнальны аналіз шэрагу фізіка-хімічных характарыстык окса-злучэнняў у лабараторных і *in silico* эксперыментах, а таксама ў аналізе баз дадзеных. Гэта дае магчымасць планаваць мадыфікацыю біялагічна актыўных злучэнняў у біядаступныя формы і, адпаведна, даследаванне з'яўляецца актуальным і практычна значным.

Мэта: вызначыць узаемазалежнасць паміж хімічнай будовай і гідрафільнасцю окса-злучэнняў.

Матэрыялы і метады. Дызайн структур і разлік параметраў окса-злучэнняў і іх гідратаў *in silico* зроблены з дапамогай рэсурсу ChemOffice. Зыходныя рэчывы, для якіх растваральнасць вымяралася ў лабараторных умовах, мелі кваліфікацыю "ч", "ч.д.а.", "х.ч."; перад выпрабаваннем не падвяргаліся дадатковай ачыстцы. У якасці растваральніка выкарыстоўвалася вада, якая была ачышчана метадам дыстыляцыі ад раствараных у ёй мінеральных соляў, арганічных рэчываў і іншых прымешак.

Вынікі і іх абмеркаванне. Цыклагексанон, яго аналагі і іх замешчаныя вытворныя (у прыватнасці, біялагічна актыўныя прыродныя мона- і біцыклічныя злучэнні) паказалі большую растваральнасць у параўнанні з ацыклічнымі злучэннямі. Мы прапанавалі мадэль, згодна якой большая растваральнасць карэлюе з магчымасцю ўтварэння гідратаў. Так, больш высокая растваральнасць цыклогексанона ў параўнанні з ацыклічнымі аналагамі і цыклапентанонам тлумачыцца большай тэрмадынамічнай устойлівасцю цыклагексан-1,1-дыола. Аналагічна тлумачыцца больш высокая растваральнасць прыродных мона- і біцыклічных тэрпеноідаў (ментон, камфара і інш.) у параўнанні з ацыклічнымі і тымі, якія змяшчаюць пяцічленны цыкл, окса-вытворнымі (напрыклад, туёна, тагетона і інш.).

Высновы. Вызначана карэляцыя паміж лёгкасцю ўтварэння гідратаў і растваральнасцю адпаведных окса-злучэнняў. Разлік тэрмадынамічных і іншых фізічных і фізіка-хімічных параметраў, якія характарызуюць выгаднасць утварэння адпаведных гідратаў, можна выкарыстоўваць для прадказання растваральнасці окса-злучэнняў ў вадзе.