

ISSN 1561-8331 (Print)
ISSN 2524-2342 (Online)

АРГАНІЧНАЯ ХІМІЯ
ORGANIC CHEMISTRY

УДК 547.826.1; 615.281
<https://doi.org/10.29235/1561-8331-2026-62-2-124-131>

Поступила в редакцию 07.10.2024
Received 07.10.2024

**Е. А. Дикусар, Е. А. Акишина, Е. Н. Маргун, Н. А. Жуковская, И. А. Колесник,
С. С. Ковальская, В. И. Поткин**

*Институт физико-органической химии Национальной академии наук Беларуси,
Минск, Беларусь*

**СЛОЖНЫЕ ЭФИРЫ ПИКОЛИНОВОЙ КИСЛОТЫ
С ГИДРОКСИБЕНЗАЛЬДЕГИДАМИ И ИХ ИМИНОПРОИЗВОДНЫЕ**

Аннотация. Реакцией гидроксибензальдегидов с пикотиновой (2-пиридинкарбоновой) кислотой в присутствии ДЦК в среде дихлорметана были получены соответствующие сложные эфиры с выходом 77–88 %. Последующей конденсацией альдегидоэфиров с 4-аминоантипирином в кипящем метаноле синтезированы (*E*)-4-(1,5-диметил-3-оксо-2-фенил-2,3-дигидро-1 π -пирозол-4-ил)иминопроизводные с выходом 65–75 %, при этом азометины на основе 2- и 3-формилфенилпиколинатов получить не удалось из-за алкоголиза сложноэфирных групп. Проведено квантово-химическое моделирование электронной структуры синтезированных соединений методом *ab initio* с уровнем теории HF/6-31G с целью предварительной оценки их потенциальных антибактериальных и противовирусных свойств.

Ключевые слова: пикотиновая кислота, гидроксибензальдегиды, ацилирование, дициклогексилкарбодимид, сложные эфиры, 4-аминоантипирин, азометины, квантово-химическое моделирование

Для цитирования. Сложные эфиры пикотиновой кислоты с гидроксибензальдегидами и их иминопроизводные / Е. А. Дикусар, Е. А. Акишина, Е. Н. Маргун [и др.] // Весті Нацыянальнай акадэміі навук Беларусі. Сэрыя хімічных навук. – 2026. – Т. 62, № 2. – С. 124–131. <https://doi.org/10.29235/1561-8331-2026-62-2-124-131>

**E. A. Dikusar, E. A. Akishina, E. N. Margun, N. A. Zhukovskaya, I. A. Kolesnik,
S. S. Koval'skaya, V. I. Potkin**

Institute of Physical Organic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus, Minsk, Belarus

**PICOLINIC ESTERS WITH HYDROXYBENZALDEHYDES
AND THEIR IMINE DERIVATIVES**

Abstract. The reaction of hydroxybenzaldehydes with picolinic (2-pyridinecarboxylic) acid in the presence of DCC in dichloromethane afforded the corresponding esters in 77–88 % yield. By subsequent condensation of aldehydoesters with 4-aminoantipyrine in boiling methanol were synthesized their (*E*)-4-(1,5-dimethyl-3-oxo-2-phenyl-2,3-dihydro-1 π -pyrazole-4-yl)imine in 65–75 % yield, but azomethines based on 2- and 3-formylphenyl picolinates couldn't be obtained due to alcoholysis of the ester groups. Quantum-chemical modeling of the electronic structure of the synthesized compounds using *ab initio* method with the HF/6-31G level of theory was performed for preliminary assessment of their potential antibacterial and antiviral properties.

Keywords: picolinic acid, hydroxybenzaldehydes, acylation, dicyclohexylcarbodiimide, esters, 4-aminoantipyrine, azomethines, quantum chemical modeling

For citation. Dikusar E. A., Akishina E. A., Margun E. N., Zhukovskaya N. A., Kolesnik I. A., Koval'skaya S. S., Potkin V. I. Picolinic esters with hydroxybenzaldehydes and their imine derivatives. *Vesti Natsyonal'nai akademii nauk Belarusi. Seryya khimichnyh nauk = Proceedings of the National Academy of Science of Belarus. Chemical series*, 2026, vol. 62, no. 2, pp. 124–131 (in Russian). <https://doi.org/10.29235/1561-8331-2026-62-2-124-131>

Введение. Известно, что пикотиновая кислота и ряд ее производных проявляют антибактериальную, бактерицидную, инсектицидную, противовоспалительную, анальгетическую и другие виды активности [1–5], что делает актуальным синтез и исследование свойств новых представителей этой группы соединений. В то же время производные пиразолона, в том числе 4-амино-

антипирин, привлекают пристальное внимание фармакологов и фармакинетиков в качестве доступных строительных блоков для создания биологически активных субстанций [6].

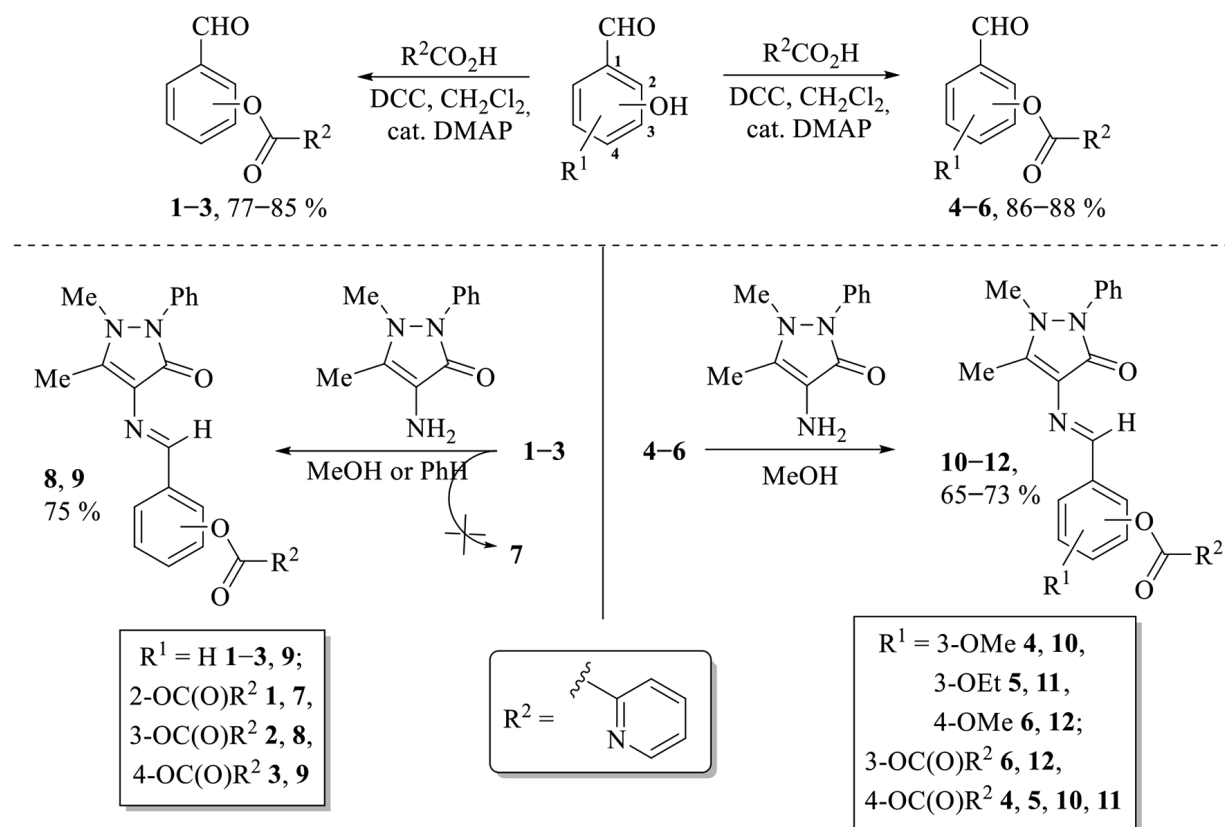
Цель настоящей работы состояла в получении новых производных пиколиновой кислоты с пиразолоновым фрагментом и квантово-химическом моделировании их электронной структуры с целью предварительной оценки их потенциальных антибактериальных и противовирусных свойств.

Результаты и их обсуждение. Для синтеза целевых (*E*)-азометинов в качестве линкера были выбраны природные гидроксibenзальдегиды и их синтетические аналоги. Для этого посредством этерификации Стеглиха в хлористом метиле были получены сложные эфиры **1–6** с выходом 77–88 %. Альдегидоэфиры **1–6** являются реакционноспособными соединениями. При их конденсации с 4-аминоантипирином (4-амино-2,3-диметил-1-фенилпиразол-5-оном) в среде кипящего метанола образовывались (*E*)-азометины **9–12** с выходом 65–75 % (схема). Следует отметить, что азометины **7, 8** на основе 2- и 3-формилфенил пиколинатов **1, 2** в метаноле получить не удалось из-за алкоголиза сложноэфирных групп. Заменяв в этих случаях метанол на бензол, удалось получить соединение **8** с выходом 75 %.

Чистота, строение и конфигурация синтезированных соединений **1–6, 8–12** были установлены на основании данных ИК-, ЯМР-спектроскопии и хромато-масс-спектрометрии, элементного анализа и результатов квантово-химических расчетов *ab initio*, выполненных с уровнем теории HF/6-31G [7]. Была проведена полная оптимизация геометрических параметров и определена электронная структура соединений **1–12** (таблица). Путем анализа разности энергий ВЗМО и НВМО по методу Фукуи [8] и учета коэффициента *I* (формулы 1, 2), вычислены наиболее перспективные соединения (**1, 4, 6, 9, 12**) для проведения их биологического тестирования:

$$\Delta F = |E_{\text{ВЗМО}} - E_{\text{НВМО}}|. \quad (1)$$

Квантово-химическое моделирование показало, что наиболее термодинамически устойчивыми (максимальная величина полной энергии системы со знаком «-», E_f , выраженная в атомных единицах) в серии альдегидоэфиров **1–6** являются *пара*-изомеры (**3, 4**), в серии азометинов **7–12** – *орто*-изомеры (из набора **7–9**) и *пара*-изомер (среди соединений **10, 12**).



Критерий ΔF прямо зависит от разности энергий ВЗМО и НВМО. Чем меньше значение ΔF , тем меньше энергии необходимо для перехода одного электрона с ВЗМО на НВМО, а следовательно, и перехода молекулы в возбужденное состояние [9, 10]. Величина ΔF в ряде случаев хорошо согласуется с экспериментальными данными, полученными для серии близких по химическому строению соединений [10, 11]. В то же время, чем выше величина дипольного момента μ , тем более полярным является данное соединение и тем выше вероятность его прохождения через биологические мембраны и распределения в полярной внутриклеточной среде [12].

Полные энергии системы (E_f), энергии высших занятых молекулярных орбиталей ($E_{\text{ВЗМО}}$) и низших вакантных молекулярных орбиталей ($E_{\text{НВМО}}$), разности энергий ВЗМО и НВМО (ΔF), дипольные моменты (μ) и индекс активности (I) соединений 1–12

Total energies of the system (E_f), energies of the highest occupied molecular orbitals (E_{HOMO}), and energies of the lowest unoccupied molecular orbitals (E_{LUMO}), differences between E_{HOMO} and E_{LUMO} (ΔF), dipole moments (μ), and activity index (I) of compounds 1–12

Соединение	E_f , а. е.	$E_{\text{ВЗМО}}$, eV	$E_{\text{НВМО}}$, eV	ΔF , eV	μ , D	I	Положение
1	–776,59310	–6,4328	–1,9347	4,4981	6,45	0,70	<i>орто-</i>
2	–776,62847	–6,8492	–1,7470	5,1022	6,62	0,77	<i>мета-</i>
3	–776,62958	–6,8274	–1,5266	5,3008	4,80	1,10	<i>пара-</i>
4	–890,47044	–6,7512	–2,1579	4,5933	4,55	1,01	<i>пара-</i>
5	–929,55987	–6,7240	–1,5375	5,1865	4,65	1,12	<i>пара-</i>
6	–890,46955	–6,3158	–2,1062	4,2096	7,65	0,55	<i>мета-</i>
7	–1 363,19848	–5,4206	–1,3769	4,0437	6,00	0,67	<i>орто-</i>
8	–1 363,18831	–5,5240	–1,7824	3,7416	5,38	0,70	<i>мета-</i>
9	–1 363,18835	–5,4641	–0,9497	4,5144	6,76	0,67	<i>пара-</i>
10	–1 477,04956	–5,3362	–0,6340	4,7022	3,53	1,33	<i>пара-</i>
11	–1 516,13679	–5,3226	0,2803	5,6029	3,62	1,55	<i>пара-</i>
12	–1 477,03594	–5,3498	–1,6028	3,7470	3,49	1,07	<i>мета-</i>

Для иллюстрации корреляционной зависимости между экспериментально полученными данными по антивирусной активности азотистых гетероциклических соединений **1–12** (см. табл.) и некоторыми расчетными параметрами молекул был использован индекс активности I , вычисленный по формуле 2:

$$I = \Delta F : \mu. \quad (2)$$

Чем меньше значение индекса активности I , тем более биологически активным является исследуемое соединение [10].

На основании проведенных расчетов в ряду альдегидоэфиров **1–6** наиболее перспективными оказались соединения **1, 4, 6** по параметру ΔF и **1, 2, 6** по параметру I . Среди азометин **7–12** лучшими показателями обладают соединения **7, 8, 12** и **7–9, 12** по параметрам ΔF и I соответственно. При этом следует отметить, что структура азометина **7** является гипотетическим объектом (синтезировать вещество не удалось).

Выводы. Метод предварительного квантово-химического моделирования позволяет выявить наиболее перспективные соединения для их последующего синтеза и биотестирования, что должно позволить существенно сократить расходование химических материалов, культуральных сред и лабораторных животных, а также трудозатраты химиков-синтетиков и медико-биологического персонала.

Экспериментальная часть. ИК-спектры полученных соединений записаны на Фурье-спектрофотометре Protege-460 фирмы Nicolet с приготовлением образцов в виде таблеток с KBr. Спектры ЯМР ^1H и ^{13}C сняты на спектрометре Bruker Avance-500 в CDCl_3 относительно остаточных сигналов растворителя [CDCl_3 , δ_{H} 7,26 м. д., δ_{C} 77,0 м. д.]. ВЭЖХ-МС исследования были выполнены с использованием жидкостного хроматографа Agilent 1200 с масс-селективным детектором Agilent 6410 Triple Quad в режиме Positive ESI MS2 Scan. Колонка ZORBAX Eclipse

XDB-C18 ($4,6 \times 50$ мм; 1,8 мкм). Мобильная фаза: вода, содержащая 0,05 % (v/v) муравьиной кислоты – ацетонитрил (от 40 до 90 % за 10 мин). Скорость элюирования – 0,5 мл/мин. Элементный анализ C, H, N, S-содержащих соединений выполнялся на CHNS-анализаторе Vario MICRO cube V1.9.7. Контроль за ходом реакций и чистотой полученных соединений осуществлен методом ТСХ на пластинах Merck Silica gel 60 F254. Использовалась пикотиновая кислота фармацевтического назначения (с чистотой 99,99 %), т. пл. 136–137 °С.

Сложные эфиры пикотиновой кислоты 1–6. Смесь 0,25 г (2 ммоль) пикотиновой кислоты, 2 ммоль формилфенола, 0,02 г (0,17 ммоль) 4-диметиламинопиридина растворяли в 20 мл дихлорметана и при охлаждении до 0 °С перемешивали 15 мин. К полученному раствору в один прием прибавляли 0,41 г (2 ммоль) дициклогексилкарбодиимида и перемешивали 1 ч при 0 °С, затем еще 24 ч при 23 °С. Осадок дициклогексилмочевины отделяли фильтрованием на стеклянном пористом фильтре. Целевые сложные эфиры очищали методом жидкостной колоночной хроматографии на силикагеле 100–160 мкм, элюент – дихлорметан.

2-Формилфенил пикотинат 1. Выход 77 %, т. пл. 91–92 °С. ИК-спектр, ν , см⁻¹: 3 078, 2 897, 1 740 (C=O), 1 688 (C=O), 1 603, 1 583, 1 213, 1 106, 753, 744, 700, 693. Спектр ЯМР ¹H (500 МГц, CDCl₃), δ , м. д.: 7,35 д (1H, ³J 8,5 Гц, H³, C₆H₄), 7,44 т (1H, 2 ³J 8 Гц, H⁵, C₆H₄), 7,57 ддд (1H, ³J 8 и 5 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁵_{py}), 7,68 дт (1H, ³J 8 и 8,5 Гц, ⁴J 2 Гц, H⁴, C₆H₄), 7,92 дт (1H, 2 ³J 8 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁴_{py}), 7,94 дд (1H, ³J 8 Гц, ⁴J 2 Гц, H⁶, C₆H₄), 8,29 дд (1H, ³J 8 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H³_{py}), 8,85 дд (1H, ³J 5 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁶_{py}), 10,19 с (1H, CHO). Спектр ЯМР ¹³C (125 МГц, CDCl₃), δ , м. д.: 123,45 (C³, C₆H₄), 126,06 и 126,71 (C⁴_{py} и C⁵_{py}), 127,68 (C⁴, C₆H₄), 128,05 (C², C₆H₄), 130,91 (C⁵, C₆H₄), 135,34 (C⁶, C₆H₄), 137,28 (C³_{py}), 146,77 (C²_{py}), 150,17 (C⁶_{py}), 151,87 (C¹, C₆H₄), 163,60 (C=O_{сл. эфир}), 188,45 (C=O_{альд.}). Масс-спектр, m/z ($I_{\text{отн}}$, %): 228 [M+H]⁺ (100). Найдено, %: C 69,03; H 4,10; N 5,89. C₁₃H₉NO₃. Вычислено, %: C 68,72; H 3,99; N 6,16. *M* 227,22.

3-Формилфенил пикотинат 2. Выход 79 %, маслообразный продукт. ИК-спектр, ν , см⁻¹: 3 077, 3 064, 2 929, 2 844, 2 809, 2 739, 1 748 (C=O), 1 698 (C=O), 1 583, 1 485, 1 278, 1 230, 1 144, 1 112, 1 079, 884, 795, 785, 745, 696, 648. Спектр ЯМР ¹H (500 МГц, CDCl₃), δ , м. д.: 7,35 т (1H, 2 ³J 8,5 Гц, H⁵, C₆H₄), 7,52 м (2H, C⁵_{py} + C⁶, C₆H₄), 7,71 с (1H, H², C₆H₄), 7,72 д (1H, ³J 8,5 Гц, H⁴, C₆H₄), 7,86 дт (1H, 2 ³J 7,5 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁴_{py}), 8,19 д (1H, ³J 7,5 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H³_{py}), 8,76 дд (1H, ³J 4,5 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁶_{py}), 9,91 с (1H, CHO). Спектр ЯМР ¹³C (125 МГц, CDCl₃), δ , м. д.: 122,19 (C⁵, C₆H₄), 124,88 (C⁴, C₆H₄), 127,35, 127,59 и 127,60 (C³_{py}, C⁴_{py} и C⁵_{py}), 130,06 (C⁶, C₆H₄), 137,18 (C², C₆H₄), 137,54 (C³, C₆H₄), 146,58 (C¹, C₆H₄), 149,91 (C⁶_{py}), 151,18 (C²_{py}), 163,30 (C=O_{сл. эфир}), 190,87 (C=O_{альд.}). Масс-спектр, m/z ($I_{\text{отн}}$, %): 228 [M+H]⁺ (100). Найдено, %: C 69,15; H 4,12; N 5,80. C₁₃H₉NO₃. Вычислено, %: C 68,72; H 3,99; N 6,16. *M* 227,22.

4-Формилфенил пикотинат 3. Выход 85 %, т. пл. 107–108 °С. ИК-спектр, ν , см⁻¹: 3 110, 3 085, 3 048, 3 003, 2 828, 1 731 (C=O), 1 697 (C=O), 1 600, 1 589, 1 504, 1 440, 1 389, 1 310, 1 285, 1 244, 1 209, 1 162, 1 095, 879, 810, 743, 701, 690. Спектр ЯМР ¹H (500 МГц, CDCl₃), δ , м. д.: 7,45 д (2H, ³J 8,5 Гц, H² + H⁶, C₆H₄), 7,56 ддд (1H, ³J 8 и 4 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁵_{py}), 7,91 дт (1H, 2 ³J 8 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁴_{py}), 7,94 д (2H, ³J 8,5 Гц, H³ + H⁵, C₆H₄), 8,29 дд (1H, ³J 8 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H³_{py}), 8,82 дд (1H, ³J 5 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁶_{py}), 9,99 с (1H, CHO). Спектр ЯМР ¹³C (125 МГц, CDCl₃), δ , м. д.: 122,47 (2C, C³ + C⁵, C₆H₄), 125,96 и 127,69 (C⁴_{py} и C⁵_{py}), 131,18 (2C, C² + C⁶, C₆H₄), 134,15 (C⁴, C₆H₄), 137,27 (C³_{py}), 146,69 (C²_{py}), 150,10 (C⁶_{py}), 155,41 (C¹, C₆H₄), 163,13 (C=O_{сл. эфир}), 190,82 (C=O_{альд.}). Масс-спектр, m/z ($I_{\text{отн}}$, %): 228 [M+H]⁺ (100). Найдено, %: C 69,10; H 4,06; N 5,83. C₁₃H₉NO₃. Вычислено, %: C 68,72; H 3,99; N 6,16. *M* 227,22.

2-Метокси-4-формилфенил пикотинат 4. Выход 88 %, т. пл. 87–88 °С. ИК-спектр, ν , см⁻¹: 3 080, 3 060, 3 010, 2 943, 2 756 (C=O), 1697, 1 681 (C=O), 1 602, 1 581, 1 503, 1 468, 1 306, 1 279, 1 235, 1 146, 1 124, 1 072, 1 031, 991, 876, 854, 734, 691. Спектр ЯМР ¹H (500 МГц, CDCl₃), δ , м. д.: 3,87 с (3H, OCH₃), 7,38 д (1H, ³J 8 Гц, H⁵, C₆H₄), 7,52 д (1H, ³J 8 Гц, H⁶, C₆H₄), 7,53 с (1H, H³, C₆H₄), 7,56 ддд (1H, ³J 8 и 4,5 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁵_{py}), 7,91 дт (1H, 2 ³J 8 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁴_{py}), 8,27 дд (1H, ³J 8 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H³_{py}), 8,84 дд (1H, ³J 5 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁶_{py}), 9,96 с (1H, CHO). Спектр ЯМР ¹³C (125 МГц, CDCl₃), δ , м. д.: 56,19 (OCH₃), 110,91 (C⁵, C₆H₄), 123,52 (C⁶, C₆H₄), 124,82 (C³, C₆H₄), 126,13 и 127,70 (C⁴_{py} и C⁵_{py}), 135,51 (C⁴, C₆H₄), 137,33 (C³_{py}), 145,11 (C², C₆H₄), 146,83 (C²_{py}), 150,27 (C⁶_{py}), 152,02 (C¹, C₆H₄), 162,76 (C=O_{сл. эфир}), 191,15 (C=O_{альд.}). Масс-спектр, m/z ($I_{\text{отн}}$, %): 258 [M+H]⁺ (100). Найдено, %: C 65,77; H 4,52; N 5,26. C₁₄H₁₁NO₄. Вычислено, %: C 65,37; H 4,31; N 5,45. *M* 257,25.

4-Формил-2-этоксифенил пиколинат 5. Выход 87 %, т. пл. 113–114 °С. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 3 115 3 090, 3 058, 2 983, 2 933, 2 846, 1 743 ($\text{C}=\text{O}$), 1 690 ($\text{C}=\text{O}$), 1 600, 1 587, 1 508, 1 437, 1 397, 1 384, 1 289, 1 244, 1 160, 1 115, 1 095, 1 038, 994, 886, 860, 817, 783, 744, 702, 690. Спектр ЯМР ^1H (500 МГц, CDCl_3), δ , м. д.: 1,29 т (3H, 3J 7 Гц, OCH_2CH_3), 4,11 к (2H, OCH_2CH_3), 7,36 д (1H, 3J 8 Гц, H^5 , C_6H_4), 7,48 д (1H, 3J 8 Гц, H^6 , C_6H_4), 7,50 с (1H, H^3 , C_6H_4), 7,55 ддд (1H, 3J 8 и 5 Гц, 4J 1,5 Гц, H^5_{py}), 7,90 дт (1H, 2 3J 8 Гц, 4J 1,5 Гц, H^4_{py}), 8,25 дд (1H, 3J 8 Гц, 4J 1,5 Гц, H^3_{py}), 8,82 дд (1H, 3J 5 Гц, 4J 1,5 Гц, H^6_{py}), 9,93 с (1H, CHO). Спектр ЯМР ^{13}C (125 МГц, CDCl_3), δ , м. д.: 14,37 (OCH_2CH_3), 64,56 (OCH_2CH_3), 111,72 (C^5 , C_6H_4), 123,86 (C^6 , C_6H_4), 124,45 (C^3 , C_6H_4), 125,82 и 127,47 (C^4_{py} и C^5_{py}), 135,27 (C^4 , C_6H_4), 137,15 (C^3_{py}), 145,23 (C^2 , C_6H_4), 146,78 (C^2_{py}), 150,09 (C^6_{py}), 151,13 (C^1 , C_6H_4), 162,59 ($\text{C}=\text{O}_{\text{сл. эфир}}$), 191,04 ($\text{C}=\text{O}_{\text{альд}}$). Масс-спектр, m/z ($I_{\text{отн}}$, %): 272 $[\text{M}+\text{H}]^+$ (100). Найдено, %: С 66,76; Н 4,95; N 4,85. $\text{C}_{15}\text{H}_{13}\text{NO}_4$. Вычислено, %: С 66,41; Н 4,83; N 5,16. M 271,27.

2-Метокси-5-формилфенил пиколинат 6. Выход 86 %, т. пл. 97–98 °С. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 3 100, 3 080, 3 059, 3 020, 2 926, 2 851, 2 744, 1 757 ($\text{C}=\text{O}$), 1 737, 1 686 ($\text{C}=\text{O}$), 1 608, 1 578, 1 510, 1 444, 1 281, 1 210, 1 121, 1 072, 1 002, 914, 814, 774, 742, 695, 640, 619. Спектр ЯМР ^1H (500 МГц, CDCl_3), δ , м. д.: 3,89 с (3H, OCH_3), 7,12 д (1H, 3J 8,5 Гц, H^5 , C_6H_4), 7,56 ддд (1H, 3J 8 и 5 Гц, 4J 1,5 Гц, H^5_{py}), 7,74 с (1H, H^3 , C_6H_4), 7,81 д (1H, 3J 8,5 Гц, H^6 , C_6H_4), 7,92 дт (1H, 2 3J 8 Гц, 4J 1,5 Гц, H^4_{py}), 8,27 дд (1H, 3J 8 Гц, 4J 1,5 Гц, H^3_{py}), 8,84 дд (1H, 3J 5 Гц, 4J 1,5 Гц, H^6_{py}), 9,88 с (1H, CHO). Спектр ЯМР ^{13}C (125 МГц, CDCl_3), δ , м. д.: 56,23 (OCH_3), 112,07 (C^5 , C_6H_4), 123,54 (C^6 , C_6H_4), 125,96 и 127,53 (C^4_{py} и C^5_{py}), 129,93 (C^4 , C_6H_4), 130,26 (C^3 , C_6H_4), 137,18 (C^3_{py}), 140,26 (C^2 , C_6H_4), 146,80 (C^2_{py}), 150,14 (C^6_{py}), 156,25 (C^1 , C_6H_4), 162,92 ($\text{C}=\text{O}_{\text{сл. эфир}}$), 189,93 ($\text{C}=\text{O}_{\text{альд}}$). Масс-спектр, m/z ($I_{\text{отн}}$, %): 258 $[\text{M}+\text{H}]^+$ (100). Найдено, %: С 65,70; Н 4,58; N 5,21. $\text{C}_{14}\text{H}_{11}\text{NO}_4$. Вычислено, %: С 65,37; Н 4,31; N 5,45. M 257,25.

(Е)-Азометины (общая методика) 7–12. Смесь 2 ммоль альдегида 1–6 и 0,41 г (2 ммоль) 4-аминоантипирина в 20 мл метанола (для соединения 8 – бензола) кипятили 2 ч. Выпавший после охлаждения реакционной смеси осадок отфильтровывали на стеклянном пористом фильтре, промывали 5 мл охлажденного метанола и сушили на воздухе.

(Е)-2-(1,5-Диметил-3-оксо-2-фенил-2,3-дигидро-1H-пиразол-4-илиминометилфенил) пиколинат 7. Не образуется. Происходит омыление сложноэфирной группы.

(Е)-3-(1,5-Диметил-3-оксо-2-фенил-2,3-дигидро-1H-пиразол-4-илиминометилфенил) пиколинат 8. Выход 75 %, т. пл. 183–184 °С. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 3 050, 3 009, 2 955, 2 924, 2 855, 2 810, 1 758, 1 733 ($\text{C}=\text{O}$), 1 649 ($\text{C}=\text{O}$), 1 573, 1 489, 1 438, 1 305, 1 290, 1 245, 1 232, 1 139, 1 093, 960, 864, 769, 748, 701. Спектр ЯМР ^1H (500 МГц, CDCl_3), δ , м. д.: 2,47 с (3H, $=\text{C}-\text{CH}_3$), 3,16 с (3H, NCH_3), 7,28 дд (1H, 2 3J 8 Гц, 4J 1,5 Гц, H^5 , C_6H_4), 7,30 тт (1H, 2 3J 7,5 Гц, 2 4J 1,5 Гц, H^4_{ph}), 7,39 дд (2H, 3J 8 Гц, 4J 1,5 Гц, $\text{C}^2_{\text{ph}} + \text{C}^6_{\text{ph}}$), 7,47 м (3H, 2 3J 8 Гц, 4J 2 Гц, $\text{H}^3_{\text{ph}} + \text{H}^5_{\text{ph}} + \text{H}^4$, C_6H_4), 7,69 д (1H, 3J 7,5 Гц, H^6 , C_6H_4), 7,57 ддд (1H, 3J 8 и 4,5 Гц, 4J 1,5 Гц, H^5_{py}), 7,84 т (1H, 2 3J 2 Гц, H^2 , C_6H_4), 7,93 тд (1H, 2 3J 8 Гц, 4J 1,5 Гц, H^4_{py}), 8,30 д (1H, 3J 8 Гц, H^3_{py}), 8,86 д (1H, 3J 5 Гц, H^6_{py}), 9,75 с (1H, $\text{N}=\text{CH}_{\text{имин}}$). Спектр ЯМР ^{13}C (125 МГц, CDCl_3), δ , м. д.: 10,06 ($=\text{C}-\text{CH}_3$), 35,68 ($\text{N}-\text{CH}_3$), 119,67 (C^4_{ph}), 123,44 (C^5 , C_6H_4), 124,48 (2C, $\text{C}^2_{\text{ph}} + \text{C}^6_{\text{ph}}$), 125,90 (C^4_{py}), 126,34 (C^1 , C_6H_4), 126,98 и 127,42 (C^3_{py} и C^5_{py}), 129,18 (2C, $\text{C}^3_{\text{ph}} + \text{C}^5_{\text{ph}}$), 129,54 (C^6 , C_6H_4), 134,60 (C^3 , C_6H_4), 137,22 (C^2 , C_6H_4), 137,38 (C^1_{ph}), 139,83 ($\text{C}^5_{\text{пиразолон}}$), 147,40 (C^1 , C_6H_4), 150,10 (C^6_{py}), 151,17 и 152,20 (C^2_{py} и $\text{C}^4_{\text{пиразолон}}$), 155,49 ($\text{N}=\text{CH}_{\text{имин}}$), 160,64 ($\text{C}=\text{O}_{\text{амид}}$), 163,75 ($\text{C}=\text{O}_{\text{сл. эфир}}$). Найдено, %: С 70,13; Н 4,99; N 13,20. $\text{C}_{24}\text{H}_{20}\text{N}_4\text{O}_3$. Вычислено, %: С 69,89; Н 4,89; N 13,58. M 412,45.

(Е)-4-(1,5-Диметил-3-оксо-2-фенил-2,3-дигидро-1H-пиразол-4-илиминометилфенил) пиколинат 9. Выход 75 %, т. пл. 244–245 °С. ИК-спектр, ν , см^{-1} : 3 080, 3 055, 3 047, 3 035, 2 970, 2 926, 1 758, 1 732 ($\text{C}=\text{O}$), 1 635 ($\text{C}=\text{O}$), 1 604, 1 594, 1 573, 1 498, 1 487, 1 305, 1 195, 1 165, 1 100, 1 077, 1 040, 870, 830, 765, 744, 697. Спектр ЯМР ^1H (500 МГц, CDCl_3), δ , м. д.: 2,47 с (3H, $=\text{C}-\text{CH}_3$), 3,13 с (3H, NCH_3), 7,30 м (3H, $\text{H}^2 + \text{H}^6$, $\text{C}_6\text{H}_4 + \text{H}^4_{\text{ph}}$), 7,39 д (2H, 3J 7 Гц, $\text{C}^2_{\text{ph}} + \text{C}^6_{\text{ph}}$), 7,46 т (2H, $\text{C}^3_{\text{ph}} + \text{C}^5_{\text{ph}}$), 7,54 ддд (1H, 3J 8 и 4,5 Гц, 4J 1,5 Гц, H^5_{py}), 7,90 дт (1H, 2 3J 8 Гц, 4J 1,5 Гц, H^4_{py}), 7,92 д (2H, 3J 8,5 Гц, $\text{H}^3 + \text{H}^5$, C_6H_4), 8,27 дд (1H, 3J 8 Гц, 4J 1,5 Гц, H^3_{py}), 8,83 дд (1H, 3J 4,5 Гц, 4J 1,5 Гц, H^6_{py}), 9,76 с (1H, $\text{N}=\text{CH}_{\text{имин}}$). Спектр ЯМР ^{13}C (125 МГц, CDCl_3), δ , м. д.: 10,00 ($=\text{C}-\text{CH}_3$), 35,71 (NCH_3), 118,38 (C^4_{ph}), 121,74 (2C, $\text{C}^3 + \text{C}^5$, C_6H_4), 124,34 (2C, $\text{C}^2_{\text{ph}} + \text{C}^6_{\text{ph}}$), 125,85 (C^4_{py}), 126,85 и 127,39 (C^3_{py} и C^5_{py}), 129,08 и 129,10 (2C, $\text{C}^2 + \text{C}^6$, C_6H_4 и 2C, $\text{C}^3_{\text{ph}} + \text{C}^5_{\text{ph}}$), 134,66 (C^4 , C_6H_4), 135,96

(C⁵_{піразолон}), 137,15 (C¹_{Ph}), 147,28 (C²_{Py}), 150,05 (C⁶_{Py}), 152,02 и 152,19 (C⁴_{піразолон} + C¹, C₆H₄), 155,64 (N=CH_{имин}), 160,68 (C=O_{амид}), 163,56 (C=O_{сл. эфир}). Найдено, %: С 70,17; Н 4,98; N 13,22. C₂₄H₂₀N₄O₃. Вычислено, %: С 69,89; Н 4,89; N 13,58. М 412,45.

(Е)-4-(1,5-Диметил-3-оксо-2-фенил-2,3-дигидро-1H-пиразол-4-илиминометил-2-метоксифенил) пиколинат 10. Выход 70 %, т. пл. 220–222 °С. ИК-спектр, ν, см⁻¹: 3 099, 3 070, 3 060, 3 005, 2 964, 2 939, 1 752, 1 741 (C=O), 1 644 (C=O), 1 580, 1 497, 1 466, 1 411, 1 303, 1 264, 1 240, 1 188, 1 110, 1 077, 1 030, 855, 755, 742, 702, 620. Спектр ЯМР ¹H (500 МГц, CDCl₃), δ, м. д.: 2,48 с (3H, =C–CH₃), 3,15 с (3H, NCH₃), 3,88 с (3H, OCH₃), 7,23 д (1H, ³J 8 Гц, H⁶, C₆H₄), 7,32 тт (1H, 2 ³J 7,5 Гц, 2 ⁴J 1,5 Гц, H⁴_{Ph}), 7,38 дд (2H, ³J 7,5 Гц, ⁴J 1,5 Гц, C²_{Ph} + C⁶_{Ph}), 7,42 дд (1H, ³J 8,5 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁵, C₆H₄), 7,46 т (2H, 2 ³J 7,5 Гц, C³_{Ph} + C⁵_{Ph}), 7,52 ддд (1H, ³J 8 и 5 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁵_{Py}), 7,56 д (1H, ⁴J 1,5 Гц, H³, C₆H₄), 7,89 дт (1H, 2 ³J 8 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁴_{Py}), 8,27 дд (1H, ³J 8 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H³_{Py}), 8,83 дд (1H, ³J 5 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁶_{Py}), 9,74 с (1H, N=CH_{имин}). Спектр ЯМР ¹³C (125 МГц, CDCl₃), δ, м. д.: 10,11 (=C–CH₃), 35,76 (NCH₃), 55,72 (OCH₃), 110,24 (C³, C₆H₄), 118,41 (C⁴_{Ph}), 121,25 (C⁵, C₆H₄), 122,76 (C⁴_{Py}), 124,33 (2C, C²_{Ph} + C⁶_{Ph}), 125,89 (C⁶, C₆H₄), 126,87 и 127,31 (C³_{Py} + C⁵_{Py}), 129,12 (2C, C³_{Ph} + C⁵_{Ph}), 134,64 (C⁵_{піразолон}), 137,09 (C¹_{Ph}), 141,45 (C², C₆H₄), 147,19 (C²_{Py}), 150,06 (C⁶_{Py}), 151,23 и 152,93 (C⁴_{піразолон} + C¹, C₆H₄), 156,12 (N=CH_{имин}), 160,69 (C=O_{амид}), 163,05 (C=O_{сл. эфир}). Найдено, %: С 68,09; Н 5,12; N 12,28. C₂₅H₂₂N₄O₄. Вычислено, %: С 67,86; Н 5,01; N 12,66. М 442,47.

(Е)-4-(1,5-Диметил-3-оксо-2-фенил-2,3-дигидро-1H-пиразол-4-илиминометил-2-этоксифенил) пиколинат 11. Выход 65 %, т. пл. 203–205 °С. ИК-спектр, ν, см⁻¹: 3 095, 3 070, 3 055, 3 040, 2 976, 2 920, 1 738 (C=O), 1 630 (C=O), 1 583, 1 491, 1 425, 1 383, 1 303, 1 288, 1 268, 1 242, 1 190, 1 030, 994, 961, 769, 745, 705, 697, 620. Спектр ЯМР ¹H (500 МГц, CDCl₃), δ, м. д.: 1,30 т (3H, ³J 7 Гц, CH₂CH₃), 2,47 с (3H, =C–CH₃), 3,14 с (3H, NCH₃), 4,13 к (2H, ³J 7 Гц, CH₂CH₃), 7,23 д (1H, ³J 8 Гц, H⁶, C₆H₄), 7,31 тт (1H, 2 ³J 7,5 Гц, 2 ⁴J 1,5 Гц, H⁴_{Ph}), 7,40 дд (2H, ³J 7,5 Гц, ⁴J 1,5 Гц, C²_{Ph} + C⁶_{Ph}), 7,43 дд (1H, ³J 8,5 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁵, C₆H₄), 7,47 т (2H, 2 ³J 7,5 Гц, C³_{Ph} + C⁵_{Ph}), 7,54 ддд (1H, ³J 8 и 5 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁵_{Py}), 7,59 д (1H, ⁴J 1,5 Гц, H³, C₆H₄), 7,90 дт (1H, 2 ³J 8 Гц, ⁴J 2 Гц, H⁴_{Py}), 8,29 дд (1H, ³J 8 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H³_{Py}), 8,84 дд (1H, ³J 5 Гц, ⁴J 2 Гц, H⁶_{Py}), 9,74 с (1H, N=CH_{имин}). Спектр ЯМР ¹³C (125 МГц, CDCl₃), δ, м. д.: 10,11 (=C–CH₃), 14,56 (CH₂CH₃), 35,67 (NCH₃), 64,30 (CH₂CH₃), 111,45 (C³, C₆H₄), 118,31 (C⁴_{Ph}), 121,04 (C⁵, C₆H₄), 122,66 (C⁴_{Py}), 124,41 (2C, C²_{Ph} + C⁶_{Ph}), 125,73 (C⁶, C₆H₄), 126,93 и 127,24 (C³_{Py} + C⁵_{Py}), 129,11 (2C, C³_{Ph} + C⁵_{Ph}), 134,52 (C⁵_{піразолон}), 137,09 (C¹_{Ph}), 141,75 (C², C₆H₄), 147,21 (C²_{Py}), 149,99 (C⁶_{Py}), 150,51 и 151,78 (C⁴_{піразолон} + C¹, C₆H₄), 156,15 (N=CH_{имин}), 160,62 (C=O_{амид}), 162,99 (C=O_{сл. эфир}). Найдено, %: С 68,79; Н 5,45; N 11,92. C₂₆H₂₄N₄O₄. Вычислено, %: С 68,41; Н 5,30; N 12,27. М 456,50.

(Е)-5-(1,5-Диметил-3-оксо-2-фенил-2,3-дигидро-1H-пиразол-4-илиминометил-2-метоксифенил) пиколинат 12. Выход 73 %, т. пл. 206–208 °С. ИК-спектр, ν, см⁻¹: 3 056, 3 045, 2 999, 2 936, 2 839, 1 747 (C=O), 1 650 (C=O), 1 607, 1 588, 1 574, 1 510, 1 439, 1 278, 1 259, 1 217, 1 125, 1 086, 1 021, 962, 822, 759, 747, 703, 696, 585. Спектр ЯМР ¹H (500 МГц, CDCl₃), δ, м. д.: 2,44 с (3H, =C–CH₃), 3,12 с (3H, NCH₃), 3,84 с (3H, OCH₃), 7,02 д (1H, ³J 8 Гц, H⁵, C₆H₄), 7,30 т (1H, 2 ³J 7 Гц, H⁴_{Ph}), 7,39 д (2H, ³J 7 Гц, C²_{Ph} + C⁶_{Ph}), 7,46 т (2H, C³_{Ph} + C⁵_{Ph}), 7,55 ддд (1H, ³J 8 и 4,5 Гц, ⁴J 1,5 Гц, H⁵_{Py}), 7,63 д (1H, ³J 8,5 Гц, H⁶, C₆H₄), 7,87 с (1H, H³, C₆H₄), 7,91 т (1H, 2 ³J 8 Гц, H⁴_{Py}), 8,29 д (1H, ³J 8 Гц, H³_{Py}), 8,84 д (1H, ³J 4,5 Гц, H⁶_{Py}), 9,68 с (1H, CHO). Спектр ЯМР ¹³C (125 МГц, CDCl₃), δ, м. д.: 9,90 (=C–CH₃), 35,92 (NCH₃), 56,09 (OCH₃), 118,68 (C⁴_{Ph}), 120,82 (C⁵, C₆H₄), 124,43 (2C, C²_{Ph} + C⁶_{Ph}), 126,02 (C⁴_{Py}), 126,92 и 127,42 (C³_{Py} + C⁵_{Py}), 128,21 (C⁶, C₆H₄), 135,51 (C³, C₆H₄), 129,22 (2C, C³_{Ph} + C⁵_{Ph}), 131,58 (C⁴, C₆H₄), 134,83 (C⁵_{піразолон}), 137,24 (C¹_{Ph}), 140,27 (C², C₆H₄), 147,38 (C²_{Py}), 150,18 (C⁶_{Py}), 151,92 и 152,83 (C⁴_{піразолон} + C¹, C₆H₄), 155,62 (N=CH_{имин}), 160,95 (C=O_{амид}), 163,20 (C=O_{сл. эфир}). Найдено, %: С 68,13; Н 5,16; N 12,34. C₂₅H₂₂N₄O₄. Вычислено, %: С 67,86; Н 5,01; N 12,66. М 442,47.

Список использованных источников

1. Anti-infectious activity of tryptophan metabolites in the L-tryptophan – L-kynurenine pathway / K. Nauri, N. Noguchi, A. Saito [et al.] // Biological and Pharmaceutical Bulletin. – 2009. – № 1. – P. 41–44. <https://doi.org/10.1248/bpb.32.41>
2. Nuclear magnetic resonance (NMR) studies on the biosynthesis of fusaric acid from *Fusarium oxysporum* f. sp. *vasinfectum* / R. D. Stipanovic, M. H. Wheeler, L. S. Puckhaber [et al.] // Journal of Agricultural and Food Chemistry. – 2011. – Vol. 59, № 10. – P. 5351–5356. <https://doi.org/10.1021/jf200628r>

3. Синтез, свойства и биологическая активность амидов пиридин-2-карбоновой кислоты / В. Д. Бояршинов, А. И. Михалев, С. В. Ухов [и др.] // *Фундаментальные исследования*. – 2014. – № 9, ч. 3. – С. 606–610. – URL: <https://fundamental-research.ru/ru/article/view?id=34896> (дата обращения: 29.07.2024).
4. Синтез и противомикробная активность эфиров и амидов пиридин-2-карбоновой кислоты / В. Д. Бояршинов, А. И. Михалев, С. В. Ухов [и др.] // *Фундаментальные исследования*. – 2014. – № 11, ч. 1. – С. 105–109. – URL: <https://fundamental-research.ru/ru/article/view?id=35486> (дата обращения: 29.07.2024).
5. Picolinic acid is a broad-spectrum inhibitor of enveloped virus entry that restricts SARS-CoV-2 and influenza A virus *in vivo* / R. Narayan, M. Sharma, R. Yadav [et al.] // *Cell Reports Medicine*. – 2023. – Vol. 4, № 8. – Art. 101127. <https://doi.org/10.1016/j.xcrm.2023.101127>
6. Pyrazolone structural motif in medicinal chemistry: retrospect and prospect / Z. Zhao, X. Dai, C. Li [et al.] // *European Journal of Medicinal Chemistry*. – 2020. – Vol. 186. – Art. 111893. <https://doi.org/10.1016%2Fj.ejmech.2019.111893>
7. General Atomic and Molecular Electronic-Structure System / M. W. Shmidt, K. K. Baldridge, J. A. Boatz [et al.] // *Journal of Computational Chemistry*. – 1993. – Vol. 14, № 7. – P. 1347–1363. <https://doi.org/10.1002/jcc.540141112>
8. Putz, M. V. DFT chemical reactivity driven by biological activity: applications for the toxicological fate of chlorinated PAHs / M. V. Putz, A. M. Putz // *Applications of Density Functional Theory to Biological and Bioinorganic Chemistry* / ed. M. V. Putz, M. P. Mingos. – Berlin : Springer Link, 2013. – P. 181–231. https://doi.org/10.1007/978-3-642-32750-6_6
9. Дьюар, М. Теория возмущений молекулярных орбиталей / М. Дьюар. – М. : Мир, 1977. – 696 с.
10. Alkaloid-Based Isoxazolylureas: Synthesis and Effect in Combination with Anticancer Drugs on C6 Rat Glioma Model Cell / G. K. Mukusheva, R. I. Jalmakhanbetova, A. Z. Shaibek [et al.] // *Molecules*. – 2024. – Vol. 29, iss. 14. – Art. 3246. <https://doi.org/10.3390/molecules29143246>
11. Квантово-химическое моделирование трехкомпонентной системы цисплатин–фуллеренол–хинин / Е. А. Дикусар, А. Л. Пушкарчук, Т. В. Безъязычная [и др.] // *Журнал прикладной спектроскопии*. – 2024. – Т. 91, № 4. – С. 563–570.
12. Физико-химические и электрохимические аспекты функционирования биологических мембран / Ю. А. Ермаков, В. С. Соколов, С. А. Акимов, О. В. Батищев // *Журнал физической химии*. – 2020. – Т. 94, № 3. – С. 342–348. <https://doi.org/10.31857/S0044453720030085>

References

1. Nauri K., Noguchi N., Saito A., Kakimi K., Motomura N., Kubo K., Takamoto S., Sasatsu M. Anti-infectious activity of tryptophan metabolites in the L-tryptophan – L-kynurenine pathway. *Biological and Pharmaceutical Bulletin*, 2009, no. 1, pp. 41–44. <https://doi.org/10.1248/bpb.32.41>
2. Stipanovic R. D., Wheeler M. H., Puckhaber L. S., Liu J., Bell A. A., Williams H. J. Nuclear magnetic resonance (NMR) studies on the biosynthesis of fusaric acid from *Fusarium oxysporum* f. sp. *vasinfectum*. *Journal of Agricultural and Food Chemistry*, 2011, vol. 59, no. 10, pp. 5351–5356. <https://doi.org/10.1021/jf200628r>
3. Boyarshinov V. D., Mihalev A. I., Ukhov S. V. S. V., Yushkova T. A., Mahmudov R. R. Sintez, svojstva i biologicheskaya aktivnost amidov piridin-2-karbonovoj kisloty. *Fundamentalnye issledovaniya = Fundamental research*, 2014, no. 9, part 3, pp. 606–610. Available at: <https://fundamental-research.ru/ru/article/view?id=34896> (accessed 29 July 2024) (in Russian).
4. Boyarshinov V. D., Mihalev A. I., Uhov S. V., Novikova V. V., Danilov Yu. L. Sintez i protivomikrobnaya aktivnost efirov i amidov piridin-2-karbonovoj kisloty. *Fundamentalnye issledovaniya = Fundamental research*, 2014, no. 11, part 1, pp. 105–109. Available at: <https://fundamental-research.ru/ru/article/view?id=35486> (accessed 29 July 2024) (in Russian).
5. Narayan R., Sharma M., Yadav R., Biji A., Khatun O., Kaur S., Kanojia A., Joy C. M., Rajmani R., Sharma P. R., Jeyasankar S., Rani P., Shandil R. K., Narayanan S., Rao D. C., Satchidanandam V., Das S., Agarwal R., Tripathi S. Picolinic acid is a broad-spectrum inhibitor of enveloped virus entry that restricts SARS-CoV-2 and influenza A virus *in vivo*. *Cell Reports Medicine*, 2023, vol. 4, no. 8, art. 101127. <https://doi.org/10.1016/j.xcrm.2023.101127>
6. Zhao Z., Dai X., Li C., Wang X., Tian J., Feng Y., Xie J., Ma C., Nie Z., Fan P., Qian M., He X., Wu S., Zhang Y., Zheng X. Pyrazolone structural motif in medicinal chemistry: Retrospect and prospect. *European Journal of Medicinal Chemistry*, 2020, vol. 186, art. 111893. <https://doi.org/10.1016%2Fj.ejmech.2019.111893>
7. Shmidt M. W., Baldridge K. K., Boatz J. A., Elbert S. T., Gordon M. S., Jensen J. H., Koseki S., Matsunaga N., Nguyen K. A., Su S. J., Midus T. L., Dupnis M., Montgomery J. A. General Atomic and Molecular Electronic-Structure System. *Journal of Computational Chemistry*, 1993, vol. 14, no. 7, pp. 1347–1363. <https://doi.org/10.1002/jcc.540141112>
8. Putz M. V., Putz A. M. DFT chemical reactivity driven by biological activity: applications for the toxicological fate of chlorinated PAHs. Putz M. V., Mingos M. P. (eds.). *Applications of Density Functional Theory to Biological and Bioinorganic Chemistry*. Berlin, Springer Link, 2013, pp. 181–231. https://doi.org/10.1007/978-3-642-32750-6_6
9. Dewar M. Y. S. *The PMO theory of organic chemistry*. New York, NY, Springer, 1975. <https://doi.org/10.1007/978-1-4613-4404-9>
10. Mukusheva G. K., Jalmakhanbetova R. I., Shaibek A. Z., Nurmaganbetova M. S., Zhasymbekova A. R., Nurkenov O. A., Akishina E. A., Kolesnik I. A., Dikuser E. A., Terpinskaya T. I., Kulchitsky V. A., Potkin V. I., Pushkachuk A. L., Lyakhov D. A., Michels D. L. Alkaloid-Based Isoxazolylureas: Synthesis and Effect in Combination with Anticancer Drugs on C6 Rat Glioma Model Cell. *Molecules*, 2024, vol. 29, no. 14, art. 3246. <https://doi.org/10.3390/molecules29143246>
11. Dikuser E. A., Pushkarchuk A. L., Bezъязыchnaya T. V., Akishina E. A., Soldatov A. G., Kuten S. A., Ermak D. V., Pivovarchik T. S., Migas D. B., Styopin S. G., Nizovtsev A. P., Kilin S. Ya., Kulchitskiy V. A., Mukusheva G. K., Aliyeva M. R.,

Potkin V. I. Quantum Chemical Modeling of Three-Component System Cisplatin–Fullerenol–Quinine System. *Journal of Applied Spectroscopy*, vol. 91, no. 4, pp. 796–802. <https://doi.org/10.1007/s10812-024-01787-9>

12. Ermakov Yu. A., Sokolov V. S., Akimov S. A., Batishchev O. V. Physicochemical and Electrochemical Aspects of the Functioning of Biological Membranes. *Russian Journal of Physical Chemistry A*, 2020, vol. 94, no. 3, 471–476 (in Russian). <https://doi.org/10.1134/s0036024420030085>

Информация об авторах

Дикусар Евгений Анатольевич – кандидат химических наук, старший научный сотрудник. Институт физико-органической химии НАН Беларуси (ул. Сурганова, 13, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: evgen_58@mail.ru

Акишина Екатерина Александровна – научный сотрудник. Институт физико-органической химии НАН Беларуси (ул. Сурганова, 13, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: che.semenovaea@mail.ru

Маргун Екатерина Николаевна – младший научный сотрудник. Институт физико-органической химии НАН Беларуси (ул. Сурганова, 13, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: margunen0555@gmail.com

Жуковская Нелия Александровна – научный сотрудник. Институт физико-органической химии НАН Беларуси (ул. Сурганова, 13, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: neliya_zhukovskaya@mail.ru

Колесник Ирина Андреевна – кандидат химических наук, старший научный сотрудник. Институт физико-органической химии НАН Беларуси (ул. Сурганова, 13, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: irynakolesnik93@gmail.com

Ковальская Светлана Степановна – кандидат химических наук, старший научный сотрудник. Институт физико-органической химии НАН Беларуси (ул. Сурганова, 13, 220072, Минск, Республика Беларусь). E-mail: kovalskaya_61@mail.ru

Поткин Владимир Иванович – академик, доктор химических наук, профессор, заведующий лабораторией. Институт физико-органической химии НАН Беларуси (ул. Сурганова, 13, 220072, Минск, Беларусь). E-mail: potkin@ifoch.bas-net.by

Information about the authors

Dikusar Evgenij A. – Ph. D. (Chemistry), Senior Researcher. Institute of Physical Organic Chemistry of National Academy of Sciences of Belarus (13, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: evgen_58@mail.ru

Akishina Ekaterina A. – Researcher. Institute of Physical Organic Chemistry of National Academy of Sciences of Belarus (13, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: che.semenovaea@mail.ru

Margun Ekaterina N. – Junior Researcher. Institute of Physical Organic Chemistry of National Academy of Sciences of Belarus (13, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: margunen0555@gmail.com

Zukovskaya Neliy A. – Researcher. Institute of Physical Organic Chemistry of National Academy of Sciences of Belarus (13, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: neliya_zhukovskaya@mail.ru

Kolesnik Irina An. – Ph. D. (Chemistry), Senior Researcher. Institute of Physical Organic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus (13, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: irynakolesnik93@gmail.com

Koval'skaya Svetlana S. – Ph. D. (Chemistry), Senior Researcher. Institute of Physical Organic Chemistry of the National Academy of Sciences of Belarus (13, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: kovalskaya_61@mail.ru

Potkin Vladimir I. – Academician, Dr. Sci. (Chemistry), Professor, Head of the Laboratory. Institute of Physical Organic Chemistry of National Academy of Sciences of Belarus (13, Surganov Str., 220072, Minsk, Republic of Belarus). E-mail: potkin@ifoch.bas-net.by