

ISSN (Print)2616-6771  
ISSN (Online) 2617-9962

Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің

# ХАБАРШЫСЫ

---

## BULLETIN

of L.N. Gumilyov Eurasian  
National University

## ВЕСТНИК

Евразийского национального  
университета имени Л.Н. Гумилева

**ХИМИЯ. ГЕОГРАФИЯ. ЭКОЛОГИЯ** сериясы

**CHEMISTRY. GEOGRAPHY. ECOLOGY** Series

Серия **ХИМИЯ. ГЕОГРАФИЯ. ЭКОЛОГИЯ**

№2(131)/2020

1995 жылдан бастап шығады

Founded in 1995

Издается с 1995 года

Жылына 4 рет шығады

Published 4 times a year

Выходит 4 раза в год

Нұр-Сұлтан, 2020  
Nur-Sultan, 2020  
Нур-Султан, 2020

## Бас редакторы:

г.ғ.д., проф., **Джаналеева К.М.** Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

*Бас редактордың орынбасары* **Тәшенов Ә.К.**, х.ғ.д., проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

*Бас редактордың орынбасары* **Берденов Ж.Г.**, PhD Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

## Редакция алқасы

<b>Айдарханова Г.С.</b>	б.ғ.д., проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Амерханова Ш.К.</b>	х.ғ.д., проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Байсалова Г.Ж.</b>	к.х.н., доцент, Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Бейсенова Р.Р.</b>	б.ғ.д., проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Бакибаев А.А.</b>	х.ғ.д., проф., Томск Политехникалық Университеті, Томск, Ресей
<b>Барышников Г.Я.</b>	ғ.ғ.д., проф., Алтай Мемлекеттік Университеті, Барнаул, Ресей
<b>Ян А. Вент</b>	Хабилит. докторы, проф. Гдань Университеті, Гдань, Польша
<b>Жакупова Ж.Е.</b>	х.ғ.к., доцент, Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Досмағамбетова С.С.</b>	х.ғ.д., проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Еркасов Р.Ш.</b>	х.ғ.д., проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Жамангара А.К.</b>	б.ғ.к., доцент, Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Иргебаева И.С.</b>	х.ғ.д., проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Хуторянский В.В.</b>	PhD, проф., Рендинг Университеті, Беркшир, Ұлыбритания
<b>Копишев Э.Е.</b>	х.ғ.к., доцент м.а., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Уәли А.С.</b>	х.ғ.к., доцент, Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Масенов Қ.Б.</b>	т.ғ.к., доцент, Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Мустафин Р.И.</b>	PhD, доцент, Қазан Мемлекеттік Медициналық Университеті, Қазан, Ресей
<b>Озгелдинова Ж.</b>	PhD, Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Рахмадиева С.Б.</b>	х.ғ.д., проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Сапаров Қ.Т.,</b>	ғ.ғ.д., проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Саипов А.А.</b>	п.ғ.д., проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Саспугаева Г.Е.</b>	PhD, Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Шапекова Н.Л.</b>	м.ғ.д., проф., Л.Н.Гумилев атындағы ЕҰУ, Нұр-Сұлтан, Қазақстан
<b>Шатрук М.</b>	PhD, проф., Флорида Мемлекеттік Университеті, Талахасси, АҚШ
<b>Атасой Е.</b>	PhD, проф., Улудаг Университеті, Бурса, Түркия

*Редакцияның мекенжайы:* 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан, қ., Сәтбаев к-сі, 2,  
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, 402 б.  
Тел: +7 (7172) 709-500 (ішкі 31-428). E-mail: vest\_chem@enu.kz

*Жауапты хатшы, компьютерде беттеген* А. Нұрболат

**Л.Н.Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университетінің Хабаршысы. Химия. География. Экология сериясы**

Меншіктенуші: ҚР БҒМ "Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті" ШЖҚ РМК  
Мерзімділігі: жылына 4 рет.

Қазақстан Республикасының Ақпарат және коммуникациялар министрлігінде 27.03.2018ж.

№16997-ж тіркеу куәлігімен тіркелген. Тиражы: 20 дана. Басуға қол 16.06.20. қойылды.

Типографияның мекенжайы: 010008, Қазақстан, Нұр-Сұлтан, қ., Қажымұқан к-сі, 12/1,  
Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті

Тел: +7 (7172)709-500 (ішкі 31-428). Сайт: <http://bulchmed.enu.kz>

© Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті

*Editor-in-Chief*

**Dzhanaleyeva K.M.** Doctor of Geographic Sciences, Prof., L.N.Gumilyov ENU, Kazakhstan

*Deputy Editor-in-Chief*

**Tashenov A.K.**, Doctor of Chemical Sciences, Prof., L.N. Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

*Deputy Editor-in-Chief*

**Berdenov Zh.G.**, PhD, L.N. Gumilyov ENU, Kazakhstan

**Editorial board**

**Aydarkhanova G.S.**

Doctor of Biological Sciences, Assoc. Prof., L.N. Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

**Amerkhanova Sh. K.**

Doctor Chemical Sciences, Prof., L.N. Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

**Baysalova G.Zh.**

Can. of Chemical Sciences, Assoc.Prof., L.N.Gumilyov ENU., Nur-Sultan, Kazakhstan

**Beysenova R.R.**

Doctor of Biological Sciences, Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

**Bakibayev A.A.**

Doctor of Chemical Sciences, Prof., Tomsk Polytechnic University, Tomsk, Russia

**Baryshnikov G.Ya.**

Doctor of Geographic Sciences, Prof., Altai State University, Barnaul, Russia

**Jan A. Wendt**

Dr.habil., Prof., Gdansk University, Poland

**Dzhakupova Zh.E.**

Can. of Chemical Sciences, Assoc. Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

**Dosmagambetova S.S.**

Doctor of Chemical Sciences, Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

**Erkassov R.Sh.**

Doctor of Chemical Sciences, Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

**Zhamangara A.K.**

Can. of Biological Sciences, Assoc. Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

**Irgibayeva I.S.**

Doctor Chemical Sciences, Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

**Khutoryanskiy V.V.**

PhD, Prof., Universit, of Reading, Berkshire, Great Britain

**Kopishev E.E.**

Can. of Chemical Sciences, acting ass.prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

**Uali A.S.**

Can. of Chemical Sciences, Assoc. Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

**Massenov K.B.**

Can. of Technical Sciences, Assoc. Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

**Mustafin R.I.**

PhD, Assoc.Prof., Kazan State Medical University, Kazan, Russia

**Ozgeldinova Zh.**

PhD, L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

**Rakhmadiyeva S.B.**

Doctor. of Chemical Sciences, Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

**Saparov K.T.,**

Doctor of Geographic Sciences, Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

**Saipov A.A.**

Doctor of Pedagogical Sciences, Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

**Saspugayeva G. E.**

PhD, Assoc. Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

**Shapekova N.L.**

Doctor of Medical Sciences, Prof., L.N.Gumilyov ENU, Nur-Sultan, Kazakhstan

**Shatruk M.**

PhD, Prof., Florida State University, Tallahassee, USA

**Atasoy E.**

PhD, Prof., Uludag University, Bursa, Turkey

*Editorial address:* 2, Satpayev str., of. 402, L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan, 010008

Tel.: +7 (7172) 709-500 (ext. 31-428), E-mail: vest\_chem@enu.kz

*Responsible secretary, computer layout:* A. Nurbolat

**Bulletin of the L.N. Gumilyov Eurasian National University. Chemistry. Geography. Ecology Series**

Owner: Republican State Enterprise in the capacity of economic conduct "L.N. Gumilyov Eurasian National University" Ministry of Education and Science of the Republic of Kazakhstan

Periodicity: 4 times a year

Registered by the Ministry of Information and Communication of the Republic of Kazakhstan. Registration certificate №16997-ж from 27.03.2018. Circulation: 20 copies. Signed for printing 16.06.20.

Address of Printing Office: 13/1 Kazhimukan str., L.N. Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan 010008

Tel: +7 (7172) 709-500 (ext.31-428). Website: <http://bulchmed.enu.kz>

© L.N.Gumilyov Eurasian National University

*Главный редактор*

**Джаналеева К.М.** д.г.н., проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

*Зам. главного редактора*

**Ташенов А.К.**, д.х.н, проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева,  
Нур-Султан, Казахстан

*Зам. главного редактора*

**Берденов Ж.Г.**, PhD, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева,  
Нур-Султан, Казахстан

**Редакционная коллегия**

**Айдарханова Г.С.**

д.б.н., доцент, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Амерханова Ш.К.**

д.х.н., проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Байсалова Г.Ж.**

к.х.н., доцент, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Бейсенова Р.Р.**

д.б.н., проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Бакибаев А.А.**

д.х.н., проф., Томский Политехнический Университет, Томск, Россия

**Барышников Г.Я.**

д.г.н., проф., Алтайский Государственный Университет, Барнаул, Россия

**Ян А.Вент**

Хабилит. доктор Гданьский Университет, Гданьск, Польша

**Джакупова Ж.Е.**

к.х.н., доцент, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Досмагамбетова С.С.**

д.х.н., проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Еркасов Р.Ш.**

д.х.н., проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Жамангара А.К.**

к.б.н., доцент, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Иргибаева И.С.**

д.х.н., проф., доцент, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Хуторянский В.В.**

PhD, проф. Университет, Реддинг Беркшир, Великобритания

**Копишев Э.Е.**

к.х.н., и.о. доцент, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Уали А.С.**

к.х.н., доцент, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Масенов К.Б.**

к.т.н., доцент, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Мустафин Р.И.**

PhD, доцент, Казанский Государственный Медицинский Университет, Казань, Ресей

**Озгелдинова Ж.**

PhD, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Рахмадиева С.Б.**

д.х.н., проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Сапаров Қ.Т.**

д.г.н., проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Саипов А.А.**

д.п.н., проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Саспугаева Г.Е.**

PhD, доцент, ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Шапекова Н.Л.**

д.м.н., проф., ЕНУ имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан

**Шатрук М.**

PhD, проф., Государственный Университет Флорида, Талахасси, США

**Атасой Е.**

PhD, проф., Университет Улутдаг, Бурса, Туркия

*Адрес редакции:* 010008, Казахстан, г. Нур-Султан, ул. Сатпаева, 2, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, каб. 402

Тел: +7(7172) 709-500 (вн. 31-428). E-mail: vest\_chem@enu.kz

*Ответственный секретарь, компьютерная верстка:* А. Нурболат

**Вестник Евразийского национального университета имени Л.Н. Гумилева. Серия: Химия. География. Экология.**

Собственник: РГП на ПХВ "Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева" МОН РК

Периодичность: 4 раза в год. Зарегистрирован Министерством информации и коммуникаций Республики Казахстан.

Регистрационное свидетельство №16997-ж от 27.03.2018г. Тираж: 20 экземпляров.

Подписано для печати 16.06.20.

Адрес типографии: 010008, Казахстан, г. Нур-Султан, ул. Кажимукана, 13/1.

Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева. Тел.: +7(7172)709-500 (вн.31-428).

Сайт: <http://bulchmed.enu.kz>

ВЕСТНИК ЕВРАЗИЙСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО УНИВЕРСИТЕТА  
ИМЕНИ Л.Н.ГУМИЛЕВА. СЕРИЯ ХИМИЯ. ГЕОГРАФИЯ. ЭКОЛОГИЯ

№2(131)/2020

**ХИМИЯ**

<i>Амерханова Ш.К., Шляпов Р.М., Уали А.С., Бельгибаева Д.С., Асадов М.М.</i> Влияние сильных электролитов на физико-химические и термодинамические свойства процессов комплексообразования ионов подгруппы железа	8
<i>Бакибаев А.А., Садвакасова М.Ж., Еркасов Р.Ш., Сорванов А.А., Атагулова А.Е.</i> Изучение влияния заместителей на смещение химических сдвигов N,N'-диарилмочевин в спектрах ядерного магнитного резонанса	18
<i>Белгибаева А.А., Еркасов Р.Ш., Курзина И.А., Каракчиева Н.И., Сачков В.И., Абзаев Ю.А.</i> Влияние микролегирования скандием на структуру сплавов на основе алюминидов титана	23
<i>Матаев М.М., Патрин Г.С., Сейтбекова К.Ж., Турсинова Ж.И.</i> Синтез и физико-химические характеристики фазы $Y_{0,5}Sr_{0,5}Cr_{0,5}Mn_{0,5}O_3$	31
<i>Нышанбек Т.Қ., Утжанова Ш.К., Жумагулова К.Ш., Кусенова Л.А., Жумабаева Г.К., Байсалова Г.Ж.</i> Исследование элементного состава растения <i>Sarrasis spinosa</i> рентгеноспектральным анализом	38
<i>Сабитова А.Н., Мусабаева Б.Х., Баяхметова Б.Б., Нургалиев Н.Н.</i> Определение тяжелых металлов из состава грибов	43
<i>Джакупова Ж.Е., Жатканбаева Ж.К., Мейрамкулова К.С., Бегалиева Р.С., Бейсембаева Л.К., Салихова М.Е.</i> Исследование свойств загустевания и способности полимера контролировать соотношение подвижностей воды и маслянистой фазы	51
<i>Судейменова Б.Ж., Шапи А.С., Бейсембаева К.А., Шах Д., Сарбасов Е.К.</i> Исследование твердых остатков при процессе пиролиза биомассы	58

**ГЕОГРАФИЯ. ЭКОЛОГИЯ**

<i>Абдулах С.</i> Экологическое образование на базе Национального парка Каздаги (гора Ида) в Турции	63
<i>Бекетова А.Т., Маханова Н.Б., Абыльдинов К.К., Есенова Ж.К., Берденов Ж.Г., Александрю И.</i> Анализ данных дистанционного зондирования Земли при изучении и картографировании природной среды	68
<i>Бақтыбектев К.С., Кабжанова Г.Р., Айымбетов А.А., Алибаева М.Т.</i> Использование данных ДЗЗ для мониторинга уровня плодородия почв	78
<i>Исмагулова С.М., Дунец А.Н., Дмитриев П.С., Еремин А.А., Джаналеева К.М.</i> Оценка миграционной ситуации Северо-Казахстанской области	85
<i>Шамшиеденова С.С., Бейсенова Р.Р.</i> Комплексная оценка качества подземных вод в осенний сезон года в сельской местности Карагандинской области в окрестностях реки Нура	96

А.А. Бакибаев<sup>1</sup>, М.Ж. Садвакасова<sup>2</sup>, Р.Ш. Еркасов<sup>2</sup>, А.А. Сорванов<sup>1</sup>,  
А.Е. Атагулова<sup>1</sup>

<sup>1</sup> *Национальный исследовательский Томский государственный университет, Томск, Россия*

<sup>2</sup> *Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, Нур-Султан, Казахстан*  
(E-mail: bakibaev@mail.ru, madinas-t@mail.ru)

### **Изучение влияния заместителей на смещение химических сдвигов N,N'-диарилмочевин в спектрах ядерного магнитного резонанса**

**Аннотация:** В своей работе мы изучили влияние заместителей на химические сдвиги в спектрах ядерного магнитного резонанса. Рассмотрены диапазоны изменения химических сдвигов C(1)-C(10) атомов углеродов, ароматических протонов, карбонильного атома и карбамидных протонов в диарилмочевинах. Проведенный анализ N,N'-диарилмочевин методом ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C позволяет надежно идентифицировать изученные соединения и служить дополнительным методом для контроля качества фармацевтических субстанций, содержащих подобные препараты.

**Ключевые слова:** замещенные мочевины, диарилмочевины, карбамидный фрагмент, ЯМР-спектроскопия, химический сдвиг.

DOI: <https://doi.org/10.32523/2616-6771-2020-131-2-18-22>

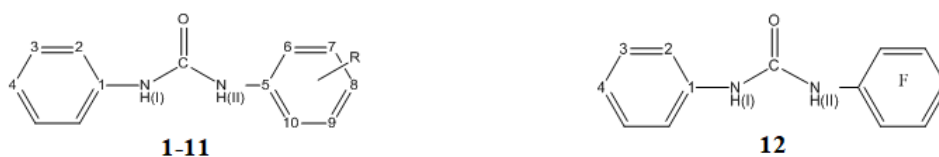
В последнее время замещенные мочевины привлекают к себе внимание благодаря разнообразному применению в промышленности, технике, сельском хозяйстве, медицине [1,2,3]. Они широко используются в качестве пестицидов и регуляторов роста растений, являются эффективными присадками к углеводородным топливам различного назначения, маслам, полимерным материалам; находят применение как лекарственные препараты и красители.

Производные мочевины отличаются различной избирательностью действия в зависимости от их строения. Среди огромного перечня замещенных мочевины особый интерес представляют диарилпроизводные мочевины. Так, их используют, в качестве уникальных химических каркасов в составе антибактериальных средств нового класса, в борьбе с золотистым стафилококком [4,5]. Также, дифенилмочевина выступает как важная связующая структура в конструкции активного вещества для лечения рака. С успешным развитием сорафениба были сконструированы различные новые соединения с дифенилмочевинной в качестве противоопухолевых агентов [6,7]. Одним словом, представители данного класса характеризуются разнообразной биологической активностью [8,9].

В ряду спектральных методов идентификации и установления механизма действия биологически активных соединений все большее распространение находит спектроскопия ЯМР [10]. На сегодняшний день, ЯМР спектроскопия это - один из самых информативных методов исследования молекулярной структуры и межмолекулярных взаимодействий.

Ранее было изучено влияние различных заместителей на характеристики спектров ЯМР в серии пара-замещенных фенилмочевин [11], а также на основании анализа спектров ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C проведена оценка электронного влияния карбамидных фрагментов N-фенил-N'-алкил(ацил)мочевин на бензольное кольцо. В данной работе мы изучили влияние заместителей в арильном ядре на химические сдвиги (ХС) в спектрах ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C атомов углерода и водорода карбамидного фрагмента и незамещенного кольца в соединениях дифенилмочевин **1-12** (рисунок 1):

**Экспериментальная часть.** Спектры ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C регистрировали на спектрометре «Bruker AVANCE III HD» (Bruker Corporation, Германия) с рабочей частотой 400 и 100 МГц соответственно в растворах ДМСО (диметилсульфоксид) и ДМСО-d<sub>6</sub> (дейтерированная форма диметилсульфоксида). Химические сдвиги приведены в δ-шкале относительно ТМС как внутреннего стандарта. Спектры получены в режиме полной развязки от протонов. Концентрация соединений составляла 0.5% для спектров ЯМР <sup>1</sup>H и 10% для ЯМР <sup>13</sup>C, а вещества синтезировали и очищали известными методами [12].



R = H (1); R = 4-CH<sub>3</sub> (2); R = 4-OH (3); R = 4-CH<sub>3</sub>O (4); R = 4-NH<sub>2</sub> (5); R = 4-NO<sub>2</sub> (6); R = 4-COOH (7); R = 4-CH<sub>3</sub>CO (8); R = 4-I (9); R = 2-CH<sub>3</sub> (10); R = 2-NO<sub>2</sub> (11).

Рисунок 1 – Диарилпроизводные мочевины

**Обсуждение полученных результатов.** Значения ХС дифенилмочевин **1-12** в спектрах ЯМР <sup>1</sup>H и <sup>13</sup>C приведены в таблицах 1 и 2.

Судя по значениям ХС в спектрах <sup>13</sup>C дифенилмочевин **1-12** (таблица 1) заместители в пара- и орто-положениях арильного фрагмента практически не оказывают влияния на углероды атома незамещенного кольца (C(1)-C(4)). Так, разница между наиболее и наименее экранированными углеродами C(1)-C(4) составляет: ΔC(1) = 1.22, ΔC(2) = 1.21, ΔC(3) = 0.78, ΔC(4) = 1.72 м.д. Приведенные выше незначительные колебания ХС C(1)-C(4) углеродов в соединениях **1-12** преимущественно обусловлены некоторым изменением геометрии карбамидного фрагмента при введении заместителей в бензольное кольцо. Другими словами, введение заместителей вызывает увеличение угла поворота замещенного кольца вокруг связи Ar-NH, что должно приводить к изменениям в геометрии карбамидного фрагмента, например, к изменениям валентных углов N-C-N или N-C-O таким образом, что эффективность делокализации р-электронной пары атома азота N(I) к фенильному ядру становится зависимой от стерических характеристик заместителей R, но не электронных.

Таблица 1 - Химические сдвиги в спектрах ЯМР <sup>13</sup>C дифенилмочевин **1-12**

№ соед.	C(1)	C(2)	C(3)	C(4)	C(5)	C(6)	C(7)	C(8)	C(9)	C(10)	C=O	R
1	139,85	118,41	128,87	121,92							152,69	
2	139,85	118,37	129,14	121,65	137,14	118,15	128,72	130,64			152,62	20,31 (CH <sub>3</sub> )
3	139,99	118,01	128,65	121,44	131,07	120,51	115,23	152,84			152,55	
4	139,84	118,37	128,64	121,51	132,64	120,01	113,94	154,15			152,69	55,14 (CH <sub>3</sub> O)
5	139,77	118,08	128,65	120,72	134,00	118,94	114,09	146,12			152,55	
6	138,99	117,44	128,79	122,44	146,34	118,65	125,01	141,06			151,91	
7	139,35	118,34	128,79	122,15	143,99	117,27	130,50	134,30			152,20	166,97 (CO OH)
8	139,21	118,37	128,72	122,08	144,27	117,08	129,50	130,43			152,05	26,24 (CH <sub>3</sub> CO)
9	140,21	118,37	128,36	121,44	140,00	120,58	136,85	84,71			151,98	
10	139,92	118,01	128,72	121,65	137,42	122,05	130,14	126,08	130,14	121,15	153,15	17,89 (CH <sub>3</sub> )
11	139,41	118,65	128,79	122,15	C3	122,51	134,92	118,23	125,29	144,41	151,93	
12	139,28	118,51	128,79	122,36							151,98	

В замещенном ядре дифенилмочевин **2-11** ХС ароматических углеродов C(5)-C(10) меняются закономерно в зависимости от электронных свойств заместителя R, т.е. электронодонорные заместители (соединения **2-5,10**) вызывают сильнопольный сдвиг, а электроноакцепторные заместители (соединения **6-9, 11**) – слабопольный сдвиг этих атомов углерода (сравнительно с ХС в незамещенном кольце). Среди C(5)-C(10) ароматических углеродов в соединениях **2-11** к электронному влиянию заместителя R наиболее чувствителен

C(5) углерод:  $\Delta C(5) = 15.27$  м.д., который под влиянием электронодонорных заместителей (соединения **2-5**, **10**) экранируется, а под влиянием электроноакцепторных заместителей (соединения **6-9**) – дезэкранируется.

Переходя к оценке изменений ХС карбонильного атома углерода ( $\delta$  CO), прежде всего отметим, что в дифенилмочевинах **1-12** ХС этого атома углерода заметно экранирован (на 3-4 м.д.) по сравнению с фенилмочевинами, у которых ХС варьируется в среднем от 148,66 м.д. до 156,94 м.д. [11,13]. Возможно, этот факт обусловлен тем, что N'-арилрование фенилмочевин (соединения **1-12**) приводит к усилению амидного сопряжения во фрагментах N(I)-CO или N(II)-CO за счет влияния пространственных факторов, например, за счет эффекта стерической компрессии карбамидного фрагмента молекул N'-арильными радикалами. Диапазон изменений ХС  $\delta$  CO в дифенилмочевинах **1-12** невелик:  $\Delta CO = 1.24$  м.д. Поскольку изменения ХС  $\delta$  CO не носят характер четкой связанности с электронными характеристиками заместителей R, то колебания ХС  $\delta$  CO по-видимому также вызваны деформированием геометрии карбамидного фрагмента арильными радикалами.

Анализ данных спектров ЯМР  $^1H$  соединений **1-12** (таблица 2) позволил установить, что ХС ароматических протонов незамещенного ядра (H(1), H(2) и H(3)) практически не чувствительны к природе и типу варьируемых заместителей в арильном кольце:  $\Delta H(1) = 0.13$ ,  $\Delta H(2) = 0.24$ ,  $\Delta H(3) = 0.08$  м.д.

Таблица 2- Химические сдвиги в спектрах ЯМР  $^1H$  дифенилмочевин **1-12**

№ соед.	Спектры ЯМР $^1H$ , ДМСО-d <sub>6</sub> , $\delta$ , м.д.									
	H(1), д	H(2), т	H(3), д	H(4), д	H(5), д	H(6), т	H(7), д	NH(I)	NH(II)	R
1	7,72	7,52	7,19					8,89	8,89	
2	7,72	7,63	7,19	7,48	7,30			8,84	8,78	2,54(CH <sub>3</sub> )
3	7,71	7,53	7,17	7,43	6,95			8,77	8,56	9,33(OH)
4	7,72	7,58	7,18	7,51	7,06			8,83	8,71	3,66(CH <sub>3</sub> O)
5	7,72	7,66	7,20	7,48	6,75			8,85	8,77	5,07(NH <sub>2</sub> )
6	7,70	7,51	7,20	7,91	8,32			9,10	9,62	
7	7,74	7,53	7,21	7,85	8,14			9,04	9,30	12,80(COOH)
8	7,72	7,52	7,21	7,84	8,15			9,03	9,33	2,78(CH <sub>3</sub> CO)
9	7,83	7,75	7,18	7,43	7,51			9,80	9,91	
10	7,73	7,55	7,21	7,44	7,24	7,32	7,29	8,15	9,25	2,52(CH <sub>3</sub> )
11	7,76	7,57	7,25	8,33	7,96	7,43	8,55	9,84	10,08	
12								8,71	9,30	

Но необходимо отметить, что ХС H(1), H(2) и H(3) протонов дифенилмочевин **1-11** более дезэкранированы, чем аналогичные протоны фенилмочевин [11], а это обстоятельство свидетельствует о падении положительного мезомерного эффекта атома N(I) по отношению к бензольному ядру в дифенилмочевинах **1-12** по сравнению с фенилмочевинной. Изменения ХС карбамидных протонов ( $\Delta NH(I) = 1.69$  м.д.,  $\Delta NH(II) = 1.52$  м.д.) говорят об их повышенной чувствительности к электронному влиянию варьируемых заместителей R. Так, электронодонорные заместители (соединения **2-5**) вызывают сильнополюсное смещение NH(I)- и NH(II)-протонов, а электроноакцепторные заместители (соединения **6-9**, **11**, **12**) – сдвиг в слабые поля, причем NH(II)-протоны в большей степени подвержены влиянию заместителей R. Нужно отметить, что ХС NH(I) и NH(II) протонов в дифенилмочевин **1-9** меняются симбатно изменениями C(5) атома углерода в спектрах  $^{13}C$ .

С помощью приведенных в данной работе величин химических сдвигов протонов и углеродов дифенилмочевин можно надежно их идентифицировать и установить закономерности изменения ХС от структурных параметров изученных соединений.



## Список литературы

- 1 Кучерявый В.И., Лебедев В.В. Синтез и применение карбамида. - Л.: Химия, 1970. 448 с.
- 2 Вишнякова Т.П., Голубева И.А., Глебова Е.В. Замещенные мочевины. Методы синтеза и области применения // Успехи химии. - 1985. - Т. 54. - № 3. - С. 429-449.
- 3 Машковский М.Д. Лекарственные средства. Т. 1. - М.: Новая волна, 2012. - 1216 с.
- 4 Mohammad H., Younis W., Ezzat H.G., Peters C.E., AbdelKhalek A., Cooper B., et al. Bacteriological profiling of diphenylureas as a novel class of antibiotics against methicillin-resistant *Staphylococcus aureus* // PLoS ONE. - 2017. - Vol. 12. - № 8. DOI: 10.1371/journal.pone.0182821.
- 5 Eissa I.H., Mohammad H., Qassem O.A., Younis W., Abdelghany T.M., Elshafeey A., et al. Diphenylurea derivatives for combating methicillin-and vancomycin-resistant *Staphylococcus aureus* // European Journal of Medicinal Chemistry. - 2017. - Vol. 130. - P. 73-85. DOI: 10.1016/j.ejmech.2017.02.044.
- 6 Wu Y.C., Ren X.Y., Rao G.W. Research Progress of Diphenyl Urea Derivatives as Anticancer Agents and Synthetic Methodologies // Mini-Reviews in Organic Chemistry. - 2019. - Vol. 16. - № 7. - P. 617-630. DOI: 10.2174/1570193X15666181029130418.
- 7 Al-Masoudi N.A., Essa A.H., Alwaaly A.A.S., Saeed B.A., Langer P. Synthesis and conformational analysis of new arylated-diphenylurea derivatives related to sorafenib drug via Suzuki-Miyaura cross-coupling reaction // Journal of Molecular Structure. - 2017. - Vol. 1146. - P. 522-529. DOI: 10.1016/j.molstruc.2017.06.028.
- 8 Nam, I.Y.G., Zayakin V.V., Kondrashova Y.F. TDZ And 4-PU Are Effective Cytokinins for Clonal Micropropagation In Vitro of Different Genotypes of Everbearing Raspberry // Research Journal of Pharmaceutical Biological and Chemical Sciences. - 2016. - Vol. 7. - № 2. - P. 878-882.
- 9 Elmedyb P., Olesen S.P., Grunnet M. Activation of ERG2 potassium channels by the diphenylurea NS1643 // Neuropharmacology. - 2007. - Vol. 53. - № 2. - P. 283-294. DOI: 10.1016/j.neuropharm.2007.05.009.
- 10 Holzgrabe U., Deubner R., Schollmayer C., Waibel B. Quantitative NMR spectroscopy – applications in drug analysis // J. Pharm. Biomed. Anal. - 2005. - Vol. 38. - P. 806-812.
- 11 Филлимонов В.Д., Бакибаев А.А., Герасимов С.В. Спектры ЯМР фенолмочевин // Журнал органической химии. - 1991. - Т. 27. - № 5. - С. 1048-1052.
- 12 Печёнкин А.Г., Тигнибидина Л.Г., Гилев А.П. и др. О связи химической структуры производных мочевины с противосудорожной активностью // Химико-фармацевтический журнал. -1972. -Т. 6. -№ 7. -С. 29-31.
- 13 Капкан Л.М., Вдовиченко А.Н., Червинский А.Ю. и др. Изучение структуры и конформации производных фенолмочевины методом ПМР // Украинский хим. журн. -1985. -Т. 51. -№ 11. -С. 1190-1194.

А.А. Бакибаев<sup>1</sup>, М.Ж. Садвакасова<sup>2</sup>, Р.Ш. Еркасов<sup>2</sup>, А.А. Сорванов<sup>1</sup>, А.Е. Атагулова<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Ұлттық зерттеу Томск мемлекеттік университеті, Томск, Ресей

<sup>2</sup> Л.Н. Гумилев атындағы Еуразия ұлттық университеті, Нұр-Сұлтан, Қазақстан

### Ядролық магниттік резонанс спектріндегі N,N'-диарилмочевиналардың химиялық ығысуына орынбасушылардың әсерін зерттеу

**Аннотация.** Өз жұмысымызда біз орынбасушыларының ядролық магниттік резонанс спектріндегі химиялық ығысуларына әсерін зерделедік. Диарилмочевиналардағы C(1)-C(10) көміртегі атомдарының, ароматты протондардың, карбонил атомының және карбамидті протондардың химиялық ығысулардың өзгеру диапазоңдары қарастырылды. <sup>1</sup>H және <sup>13</sup>C ЯМР әдісімен N,N'-диарилмочевиналарға жүргізілген талдау зерттелген қосылыстарды сенімді сәйкестендіруге және осындай ұқсас препараттар бар фармацевтикалық субстанциялардың сапасын бақылау үшін қосымша әдіс ретінде қызмет етуге мүмкіндік береді.

**Түйін сөздер:** орынбасқан мочевинолар, диарилмочевиналар, карбамидті фрагмент, ЯМР-спектроскопия, химиялық ығысу.

A.A. Bakibaev<sup>1</sup>, M.Zh. Sadvakassova<sup>2</sup>, R.Sh. Erkasov<sup>2</sup>, A.E. Atagulova<sup>1</sup>, A.A. Sorvanov<sup>1</sup>

<sup>1</sup> National Research Tomsk State University, Tomsk, Russia

<sup>2</sup> L.N.Gumilyov Eurasian National University, Nur-Sultan, Kazakhstan

### Study of the effect of substituents on the displacement of chemical shifts of N, N'-diarylureas in the nuclear magnetic resonance spectra

**Abstract.** In our work, we studied the effect of substituents on chemical shifts in the nuclear magnetic resonance spectra. The ranges of changes in chemical shifts from(1) to(10) carbon atoms, aromatic protons, carbonyl atoms, and urea protons in diarylureas are considered. The analysis of N,N'-diarylureas by NMR <sup>1</sup>H and <sup>13</sup>C allows us to reliably identify the studied compounds and serve as an additional method for quality control of pharmaceutical substances containing such drugs.

**Keywords.** substituted urea, diaryl urea, urea fragment, NMR spectroscopy, chemical shift.

## References

- 1 Kucherjavyj V.I., Lebedev V.V. Sintez i primeneniye karbamida [Synthesis and application of urea] (Himija, Leningrad, 1970, 448 p.) [in Russian].
- 2 Vishnjakova T.P., Golubeva I.A., Glebova E.V. Zameshennyye mocheviny. Metody sinteza i oblasti primeneniya [Substituted urea. Synthesis methods and applications], Uspehi Himii, 54(3), 429-449(1985).
- 3 Mashkovskij M.D. Lekarstvennyye sredstva [Medicinal products], 1, (Novaya volna, Moscow, 2002). [in Russian].
- 4 Mohammad H., Younis W., Ezzat H.G., Peters C.E., AbdelKhalek A., Cooper B., et al. Bacteriological profiling of diphenylureas as a novel class of antibiotics against methicillin-resistant *Staphylococcus aureus*, PLoS ONE, 12(8), (2017). DOI: 10.1371/journal.pone.0182821.
- 5 Eissa I.H., Mohammad H., Qassem O.A., Younis W., Abdelghany T.M., Elshafeey A., et al. Diphenylurea derivatives for combating methicillin-and vancomycin-resistant *Staphylococcus aureus*, European Journal of Medicinal Chemistry, 130, 73-78(2017). DOI: 10.1016/j.ejmech.2017.02.044.
- 6 Wu Y.C., Ren X.Y., Rao G.W. Research Progress of Diphenyl Urea Derivatives as Anticancer Agents and Synthetic Methodologies, Mini-Reviews in Organic Chemistry, 16(7), 617-630(2019). DOI: 10.2174/1570193X15666181029130418.
- 7 Al-Masoudi N.A., Essa A.H., Alwaaly A.A.S., Saeed B.A., Langer P. Synthesis and conformational analysis of new arylated-diphenylurea derivatives related to sorafenib drug via Suzuki-Miyaura cross-coupling reaction, Journal of Molecular Structure, 1146, 522-529(2017). DOI: 10.1016/j.molstruc.2017.06.028.
- 8 Nam I.Y.G., Zayakin V.V., Kondrashova Y.F. TDZ And 4-PU Are Effective Cytokinins for Clonal Micropropagation In Vitro of Different Genotypes of Everbearing Raspberry, Research Journal of Pharmaceutical Biological and Chemical Sciences, 7(2), 878-882(2016).
- 9 Elmedyeb P., Olesen S.P., Grunnet M. Activation of ERG2 potassium channels by the diphenylurea NS1643, Neuropharmacology, 53(2), 283-294(2007). DOI: 10.1016/j.neuropharm.2007.05.009.
- 10 Holzgrabe U., Deubner R., Schollmayer C., Waibel B. Quantitative NMR spectroscopy — applications in drug analysis, J. Pharm. Biomed. Anal., 38, 806-812 (2005).
- 11 Filimonov V.D., Bakibaev A.A., Gerasimov S.V. Spektry YAMR fenilmochevin [NMR spectra of phenylurea], Zhurnal organicheskoy himii, 27(5), 1048-1052(1991) [in Russian].
- 12 Pechunkin A.G., Tignibidina L.G., Gilev A.P. i dr. O svyazi himicheskoy struktury proizvodnykh mocheviny s protivosudorozhnoy aktivnost'yu [On the relationship of the chemical structure of urea derivatives with anticonvulsant activity], Khimiko-farmatsevticheskij zhurnal, 6(7), 29-31(1972). [in Russian].
- 13 Kapkan L.M., Vdovichenko A.N., Chervinskij A.YU. i dr. Izuchenie struktury i konformacii proizvodnykh fenilmocheviny metodom PMR [Study of structure and conformation of phenylurea derivatives by PMR method], Ukrainskij him. zhurn., 51(11), 1190-1194(1985) [in Russian].

## Сведения об авторах

*Бакыбаев А.А.* – доктор химических наук, профессор, ведущий научный сотрудник лабораторий органического синтеза, Национальный исследовательский Томский государственный университет, пр. Ленина 36, Томск, Россия.

*Садвакасова М.Ж.* – PhD докторант 2 курса специальности «Химия», Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Нур-Султан, Казахстан.

*Еркасов Р.Ш.* – доктор химических наук, профессор кафедры химии, Евразийский национальный университет имени Л.Н. Гумилева, ул. Сатпаева, 2, Нур-Султан, Казахстан.

*Сорванов А.А.* – аспирант 1 курса специальности «Органическая химия», Национальный исследовательский Томский государственный университет, пр. Ленина 36, Томск, Россия.

*Атагулова А.Е.* – студент 4 курса специальности «Химия», Национальный исследовательский Томский государственный университет, пр. Ленина 36, Томск, Россия.

*Bakibaev A.A.* - Doctor of Chemical Sciences, Professor, Leading Researcher of the Laboratory of Organic Synthesis, National Research Tomsk State University, Lenin ave. 36, Tomsk, Russia.

*Sadvakassova M.Zh.* - 2nd year PhD student of specialty chemistry, L.N. Gumilyov Eurasian National University, K.2Munaitpasov St., 13, Nur-Sultan, Kazakhstan.

*Erkasov R.Sh.* - Doctor of Chemical Sciences, Professor of the Department of Chemistry, L.N. Gumilyov Eurasian National University, K. Munaitpasov St., 13, Nur-Sultan, Kazakhstan.

*Sorvanov A.A.* - 1st year postgraduate of specialty organic chemistry, National Research Tomsk State University, Lenin ave. 36, Tomsk, Russia.

*Atagulova A.E.* - 4th year student of specialty chemistry, National Research Tomsk State University, Lenin ave. 36, Tomsk, Russia.

Поступила в редакцию 08.04.2020