

0. Максимальні значення активності усіх сполук спостерігаються щодо грам-позитивних мікроорганізмів (*B. subtilis* та *S. aureus*), дещо менші – для грам-негативних (*E. coli*, *P. vulgaris*, *P. aeruginosa*) та грибів (*C. albicans*), що може бути пов'язане зі структурними особливостями клітинної стінки.

Аналіз одержаних результатів статистичної обробки вказує на те, що розраховані значення коефіцієнта ліпофільності A_{logP} s корелюють (y %, негативні значення коефіцієнтів кореляції) з експериментальними даними антимікробної активності сполук щодо *S. aureus* ($r = -0,8234$), *E. coli* ($r = -0,8580$), *P. vulgaris* ($r = -0,7893$), *P. aeruginosa* ($r = -0,7682$), *B. subtilis* ($r = -0,7931$) та *C. albicans* ($r = -0,7680$) і є статистично достовірними.

Вказані поєднання коефіцієнтів кореляції Пірсона та показників значимості свідчать про достовірність графіків та рівнянь.

Таким чином, висловлені раніше міркування щодо наявності зв'язку «структура-дія» і ступінь його прояву кількісно підтверджені розрахунковими методами. Одержані результати дають змогу прогнозувати наявність та рівень виявлення біологічної дії у ряду N-R-амінопохідних і проводити цілеспрямований пошук біологічно активних речовин у зазначеному ряду.

На основі з вищесказаного можна зробити наступні висновки:

1. З метою виявлення кількісних залежностей «структура-дія» проведено кореляційно-регресійний аналіз розрахованих значень A_{logP} s та результатів експериментального вивчення антимікробної активності згаданих сполук.

2. Встановлено статистично достовірні значення кореляції показника A_{logP} s зі значеннями протимікробної дії N-R-амінопохідних щодо *S. aureus*, *E. coli*, *P. vulgaris*, *P. aeruginosa*, *B. subtilis* та *C. albicans*, що кількісно підтверджує висловлені раніше припущення щодо наявності зв'язку «структура-дія» у даному ряду сполук та ступінь його прояву.

СПЕКТРОФОТОМЕТРИЧНЕ ВИЗНАЧЕННЯ БІОЛОГІЧНО АКТИВНИХ СУБСТАНЦІЙ СЕРЕД ПОХІДНИХ ОРТО-ГАЛОГЕН НІТРОБЕНЗОЙНИХ КИСЛОТ

Бризицький О.А.

Кафедра аналітичної хімії

Національний фармацевтичний університет, м. Харків

alexchemis@rambler.ru

Серед ароматичних кислот важливе місце займають заміщені нітробензойної кислоти та їх похідні, інтерес до яких обумовлений високою хімічною активністю, що дозволяє

використовувати їх для синтезу ряду структур. Накопичено великий обсяг інформації про біологічні властивості, про молекулярний механізм дії, метаболізм та фармакокінетику похідних орто-галогенбензойних кислот.

На основі нітро-, бром-, хлор-, 3-оксамоїл(сукциноїл)- та 3- або 5-сульфамоїлзаміщених орто-галогенбензойних кислот синтезовано і вивчено біологічну активність наступних сполук: D-(+)-глюкозиламонієві солі; D-(+)-глюкозаміди; метилові естери; алкіл-, арил- та гетериламіди; гідразиди та їх похідні – R-іденгідразиди, аренсульфогідразиди, β -N-ацилгідразиди, β -N-(o-толілсукцинамід)гідразиди; гідразиди, R-іденгідразиди 3-карбоксі-2-хлороксанілових та 3-карбоксі-2-хлорсукцинанілових кислот та їх похідних; пероксиди бензоїлу та пербензойні кислоти з хлор-, бром-, сульфамоїл- та нітрозамісниками в бензольному кільці.

За результатами наших досліджень була виявлена можливість використання азобарвників похідних імідазолію для одночасного екстракційного розділення та спектрофотометричного визначення похідні орто-галоген нітробензойних кислот. В основі методу покладено утворення похідними орто-галоген нітробензойних кислот з азобарвниками сполук типу іонних асоціатів, які здатні вилучатися хлороформом. Важливими факторами, які впливають на умови утворення асоціатів, це різниця в хімічних властивостях орто-галоген нітробензойних кислот та азобарвників. Домінуючим фактором для утворення іонних асоціатів у водній фазі є створення умов для домінування аніону похідних нітробензойних кислот (A^-) та катіону азобарвника (K^+). Так як азобарвники можуть проявляти властивості амфолітів, а похідні орто-галоген нітробензойних кислот є слабкими органічними кислотами, то важливим фактором, який впливає на механізм екстракційного розділення та спектрофотометричного визначення, є створення відповідного значення рН середовища. Не менш важливими факторами є підбір реагенту, концентрації реагентів та кінетичні фактори протікання реакції. Була вивчення залежність екстракційної здатності від розташування замісників у бензольному кільці, що дозволяє проводити екстракційне розділення та спектрофотометричне визначення похідні орто-галоген нітробензойних кислот в сумішах.