

НАУЧНО - ПРАКТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ



# ВЕСТНИК КАЗАХСКОГО НАЦИОНАЛЬНОГО МЕДИЦИНСКОГО УНИВЕРСИТЕТА

№1 2007г.

*Вопросы теоретической  
и профилактической  
медицины*

## СОДЕРЖАНИЕ

Страницы истории профилактической медицины в Казахстане Т.А.Муминов, У.И.Кенесариев, Р.М.Балмахаева	
КЛИНИКО-ЛАБОРАТОРНАЯ ЭФФЕКТИВНОСТЬ МАКРОЛИДНЫХ АНТИБИОТИКОВ ПРИ ЛЕЧЕНИИ РЕСПИРАТОРНОГО ХЛАМИДИОЗА .....	17
М.М. Сыздыков, А.М. Дмитриевский, А.Н. Кузнецов, М.С. Сыздыков ОСНОВНЫЕ ПРИОРИТЕТЫ ПРОФИЛАКТИКИ ЗАБОЛЕВАНИЙ И УКРЕПЛЕНИЯ ЗДОРОВЬЯ НАСЕЛЕНИЯ	
М.А. Камалиев .....	21
ПОИСК ЭФФЕКТИВНЫХ ФОРМ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ НА ПУТИ ИНТЕГРАЦИИ ОБРАЗОВАНИЯ, НАУКИ И ПРАКТИКИ В ОБЛАСТИ ПРОФИЛАКТИЧЕСКОЙ МЕДИЦИНЫ .....	27
А.А. Табаева, К.С. Оспанов, Е.Е. Дурумбетов .....	27
ЖҮКПІ ӘЙЕЛДІҢ КҮТПЕГЕН ЖЕРДЕ ҚЫЗАМЫҚҚА ҰШЫРАУЫ ЖӘНЕ .....	32
АУРУДЫҢ ЖАТЫРДАҒЫ БАЛАҒА ЖҰҒУЫ .....	32
Т.Ә Қарабатырова, С.Ә Әмирсев, Б. Ж. Тастанбеков .....	32
К ВОПРОСУ О ХИМИЧЕСКОМ СТРОЕНИИ НЕКОТОРЫХ ВЕЩЕСТВ, ОБЕСПЕЧИВАЮЩИХ ОБЕЗВРЕЖИВАНИЕ ТОКСИЧЕСКИХ АГЕНТОВ В ОРГАНИЗМЕ .....	33
А. А. Лукашев, В. А. Лукашев .....	33
КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ МОЛЕКУЛ .....	36
ХЛОРАНГИДРИДА МЕТАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ И ЕГО .....	36
СОПОЛИМЕРА С ГЛИЦИДИЛМЕТАКРИЛАТОМ .....	36
Н.А. Бектенов, Д.А.Амирхожаева, З.Н. Бектенова .....	36
2) СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТОВ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ .....	39
Н.А. Бектенов, Д.А.Амирхожаева, З.Н. Бектенова .....	39
3) СОРЕЦЦИЯ ИОНОВ ВАНАДИЯ, МОЛИБДЕНА И СВИНЦА .....	42
Н.А. Бектенов, Д.А.Амирхожаева, З.Н. Бектенова .....	42
АКТУАЛЬНЫЕ ВОПРОСЫ ЭКОЛОГИЧЕСКОЙ ЭПИДЕМИОЛОГИИ .....	43
ВОПРОСЫ ГАРМОНИЗАЦИИ САНИТАРНЫХ СТАНДАРТОВ СОДЕРЖАНИЯ .....	50
ВРЕДНЫХ ВЕЩЕСТВ В ВОЗДУХЕ РАБОЧЕЙ ЗОНЫ, .....	50
ПРИНЯТЫХ В КАЗАХСТАНЕ И США .....	50
К.К. Тогузбаева, А.А. Лукашев, К.С. Абсаттарова, М.К. Желдербаева .....	50
АВТОТРАНСПОРТ И ЗАГРЯЗНЕНИЕ ВОЗДУШНОГО БАССЕЙНА .....	54
г. АЛМАТЫ ТЯЖЕЛЫМИ МЕТАЛЛАМИ .....	54
Б.А. Неменко, А.Т. Досмухаметов, Д.Б. Бекказинова, К.А. Чекотаева .....	54
МЕМБРАНОСТАБИЛИЗИРУЮЩЕЕ ДЕЙСТВИЕ .....	58
ГЛИЦИРРЕТОВОЙ КИСЛОТЫ В ГОЛОВНОМ .....	58
МОЗГЕ И ПЕЧЕНИ ЖИВОТНЫХ, ЗАТРАВЛЕННЫХ .....	58
АЦЕТАТОМ СВИНЦА .....	58
М.К. Балабекова, Е.С. Балабексов .....	58
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИЗУЧЕНИЕ ИЗОЛИРОВАННОГО И КОМБИНИРОВАННОГО ВЛИЯНИЯ МАЛЫХ ДОЗ ВАНАДИЯ И ХРОМА НА ВЫСШЮЮ НЕРВНУЮ ДЕЯТЕЛЬНОСТЬ .....	63
А.Н.Нурмухамбетов, М.Ж.Толепбергенова, С.Е.Мырзагулова, М.К.Балабекова .....	63
МЕТАЛЛОАККУМУЛИРУЮЩАЯ СПОСОБНОСТЬ РАСТЕНИЙ, ПРОИЗРАСТАЮЩИХ НА АНОМАЛЬНЫХ УЧАСТКАХ УРАНОДОБЫВАЮЩИХ ТЕРРИТОРИЙ АКМОЛИНСКОЙ ОБЛАСТИ	66

11. Muir H. The chemistry of the ground substance of joint cartilage. //In: The joints and synovial fluid. Ed.Sokoloff/-New-York, 1980, vol.2, pp.27-94
12. Lash J.W., Vasan N.S. Glycosamioglycans of cartilage. // In: Cartilage. / Ed. B.K. Hall, New-York. 1983, Vol. 1. P.215-252.
13. Шипцова Н.К. К вопросу о роли соединительной ткани при интоксикациях. //Вопросы гигиены окружающей среды. Тр. НИИ гигиены и профзаболеваний МЗ РК. Алматы, 1992, С.142-147.
14. Архипова О.Г., Зорина Л.А., Соркина Н.С. Комплексоны в клинике профессиональных болезней. М., Медицина, 1975, 159С.
15. Мусил Я. Основы биохимии патологических процессов. Пер. с чешского. М., Медицина, 1985, 430С.

#### ТҰЖЫРЫМ

Жұмыста организмдегі ксенобиотиктердің детоксикация процесі жайлы мәліметтер талданады. Гликоаминогликандар мен пектиннің химиялық құрылысының ұқсастығы, сонымен қатар ксенобиотиктердің клетка жанындағы кеңістіктегі гликоаминогликандардың көмегімен глюкуронидті және сульфатты конъюгаттар түзу арқылы зарарсыздандырылуы, ал пектиндердің ксенобиотиктермен асқазан-ішек жолында байланысуы байқалады. Гликоаминогликандардың түзілу және конъюгация процесіндегі глюкоза, гликоген, уридинфосфат және сульфат-ионның рөлі сипатталады.

#### SUMMARY

In this work the data on detoxication process of xenobiotics in the organism are analyzed. The likeness of chemical structure of glycosaminoglycans and pectin noted, as well as that sulphate and glucuronide conjugation taken place in the cell, detoxication by means of glycosaminoglycans – in the connective tissue around the cell, and pectin bind the xenobiotics in the gastrointestinal tract. The role of glucose, glycogen, uridindiphosphate and sulfate-ion in conjugation process and glycosaminoglycans formation noted.

#### ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ НАУКА

УДК 577.355.4:547.582.5+547.466.22

#### КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКИЕ РАСЧЕТЫ МОЛЕКУЛ ХЛОРАНГИДРИДА МЕТАКРИЛОВОЙ КИСЛОТЫ И ЕГО СОПОЛИМЕРА С ГЛИЦИДИЛМЕТАКРИЛАТОМ

Н.А. Бектенов, Д.А.Амирхожаева, З.Н. Бектенова

Казахский национальный медицинский университет имени С.Д. Асфендиярова  
Институт химических наук МОН РК

Для молекул хлорангидрида метакриловой кислоты (ХМАК) и его сополимера с ГМА квантово-химическим методом проведены расчеты электронных параметров.

Анализ основных квантово-химических характеристик мономера ХМАК показал (табл. 1.), что длина кратной связи  $C_1 = C_2$  составляет  $1,3355 \text{ \AA}$ , длина  $C_4 - O_5$  связи карбонильной группы –  $1,2031 \text{ \AA}$ ,  $C_4 - C_{11}$  хлорангидридной группы –  $1,7869 \text{ \AA}$ . Если длины кратных связей винильных групп в исходных молекулах ХМАК и ГМА равняются  $1,3355$  и  $1,3409 \text{ \AA}$  соответственно, то в сополимере ГМА-ХМАК они удлиняются до  $1,5325 \text{ \AA}$  ( $C_{22} - C_{23}$ ) и  $1,5311 \text{ \AA}$  ( $C_1 - C_2$ ). При этом появляется новая связь  $C_2 - C_{22}$  ( $1,5411 \text{ \AA}$ ).

Так как связь  $C_1 = C_2$  в молекуле ХМАК характеризуется высоким порядком, равным  $1,9079$ , тогда как в ГМА его значение составляет  $1,8930$ , следовательно,

последняя должна легче вступать в реакцию полимеризации по сравнению с первым. Чем больше значение порядка связи (характерно для ХМАК), тем она короче, а следовательно, прочнее. Кроме того, если порядок связи двух атомов молекул больше 1, то между ними возможно образование связи, что и происходит при сополимеризации.

При этом длины связей  $C_{25} = O_{26}$  ( $1,2012 \text{ \AA}$ ),  $C_{25} - C_{13}$  ( $1,7822 \text{ \AA}$ ) хлорангидридной и  $C_8 - C_9$  ( $1,4880 \text{ \AA}$ ),  $C_8 - C_{10}$  ( $1,4384 \text{ \AA}$ ) эпоксидной групп, характерные для исходных мономеров, в сополимере остаются без изменений.

Наименьший отрицательный заряд в молекуле ХМАК сосредоточен на атоме  $C_3$  ( $q = -0,0695$ ), который находится в состоянии  $sp^3$ -гибридизации. Максимальный отрицательный заряд находится на атоме  $O_5$  карбонильной групп ( $q = -0,2633$ ), тогда как на атоме  $C_{11}$  его значение

составляет  $-0,0847$ . Наибольший положительный заряд имеет атом  $C_4$  ( $q = 0,3192$ ).

В молекуле сополимера отрицательные заряды сосредоточены на атомах обеих функциональных групп:

$O_{10}$  эпоксидного цикла ( $q = -0,2601$ ) и  $Cl_{32}$  хлорангидридной группы ( $q = -0,0795$ ). Поэтому реакционная способность сополимера в реакциях нуклеофильного замещения довольно высокая.

Таблица 1. Квантово-химические характеристики мономеров ГМА/1/, ХМАК и сополимера ГМА – ХМАК

Соединение	Характеристика связей			Заряд на атоме		Валентные углы	
	связь	Длина $A^0$	порядок	атом	значение	угол	градус
ГМА*	$C_1=C_2$	1,3409	1,8930	$C_1$	0,1436	$C_1C_7C_{10}$	59,00
	$C_6-C_7$	1,4870	0,9850	$C_2$	-0,1251	$C_6C_{10}C_7$	61,50
	$C_6-C_{10}$	1,4388	0,9610	$C_6$	-0,0743		
				$C_7$	-0,0924		
				$O_{10}$	-0,2588		
ХМАК	$C_1=C_2$	1,3355	1,9079	$C_1$	-0,0739	$C_1C_2C_3$	121,75
	$C_2-C_3$	1,4896	0,9926	$C_2$	-0,1835	$C_2C_4O_5$	127,29
	$C_4-O_5$	1,2031	1,9565	$C_3$	-0,0695	$C_2C_4C_{11}$	114,64
	$C_4-C_{11}$	1,7869	0,8872	$C_4$	0,3192		
	$C_2-C_4$	1,4806	0,9434	$O_5$	-0,2633		
				$Cl_{11}$	-0,0847		
Сополимер ГМА-ХМАК	$C_1-C_2$	1,5311	0,9782	$C_1$	-0,1156	$C_1C_2C_3$	108,55
	$C_2-C_{22}$	1,5411	0,9689	$C_2$	-0,0322	$C_2C_4O_5$	127,73
	$C_7-C_8$	1,5173	0,9655	$C_5$	-0,3736	$C_7C_8C_9$	119,86
	$C_8-C_9$	1,4880	0,9935	$C_7$	-0,0795	$C_7C_8O_{10}$	117,08
	$C_8-C_{10}$	1,4384	0,9600	$C_8$	-0,0395	$C_8C_9H_{20}$	121,39
	$C_4-O_5$	1,2145	1,8320	$C_9$	-0,0074	$C_8C_9H_{21}$	121,51
	$C_9-H_{20}$	1,0965	0,9709	$O_{10}$	-0,2601	$C_1C_2C_{22}$	108,63
	$C_9-H_{21}$	1,0972	0,9691	$C_{22}$	-0,1104	$C_2C_{22}C_{23}$	115,11
	$C_{22}-C_{23}$	1,5325	0,9762	$C_{23}$	-0,1106	$C_{22}C_{23}C_{25}$	111,26
	$C_{23}-C_{25}$	1,5166	0,9127	$C_{25}$	0,2718	$C_{23}C_{25}O_{26}$	126,89
	$C_{25}=O_{26}$	1,2012	1,9794	$O_{26}$	-0,2585	$C_{23}C_{25}Cl_{32}$	113,86
	$C_{25}-Cl_{32}$	1,7822	0,8868	$Cl_{32}$	-0,0795		
	$C_{24}-H_{29}$	1,0976	0,9868	$H_{20}$	0,7330		
	$C_{24}-H_{30}$	1,0991	0,9835	$H_{21}$	0,7180		
			$H_{29}$	0,5180			
			$H_{30}$	0,5560			

Значение порядка связи  $C_{25}-Cl_{32}$  (0,8868) хлорангидридной группы в сополимере меньше порядков связей  $C_8-C_9$  (0,9935) и  $C_8-O_{10}$  (0,9600) эпоксидного кольца. Отсюда следует, что связи между атомами последнего группы короче и прочнее. Следовательно, хлорангидридная группа должна легче вступать в реакцию нуклеофильного замещения (табл. 1).

Поскольку заряд атома кислорода хлорангидридного звена сополимера  $O_{26}$  ( $q = -0,2585$ ) больше заряда атома  $Cl_{32}$  ( $q = -0,0795$ ), можно предполагать, что в реакции замещения должны вступать карбонильные группы. Однако, порядок связи  $C_{25}=O_{26}$  (1,9794) больше порядка связи  $-C_{25}-Cl_{32}$  (0,8868), то, вероятно, последняя будет легче «разрываться» в результате нуклеофильного замещения атома хлора.

Значения валентных углов атома  $C$  и  $O$  в

глицидной группе сополимера (табл. 1) отличаются от нормальных валентных углов (тетраэдрические  $109^{\circ}28'$ , тригональные  $120^{\circ}$ , диагональные углы  $180^{\circ}$  и углы в эфирах  $\sim 113^{\circ}$ ) и от валентных углов атомов эпоксидного кольца в молекуле ГМА (и  $C_6H_7O_{10} = 59^{\circ}00'$ , и  $C_6O_{10}C_7 = 61^{\circ}00'$ ). Такое отклонение объясняет повышенную склонность атома  $O$  оксидного цикла переходить в новое валентное («оксониевое») состояние путем присоединения протона  $H^+$ .

Сравнение распределения электронной плотности модельных соединений и значений валентных углов между атомами позволяет изобразить пространственную геометрию молекул.

Важное значение для характеристики их реакционной способности имеет величина  $E_{взмо}$ , то

есть энергия, необходимая для удаления с АО одного электрона, и численно равная потенциалу ионизации, взятому с обратным знаком. Как видно из таблицы 2,  $E_{\text{ВЗМО}}$  исходных мономеров и сополимера возрастают в ряду: ГМА-ХМАК < ХМАК < ГМА, следовательно, в этом же порядке усиливаются р- донорные свойства атомов и увеличивается сродство к электрофильному реагенту. Энергия  $E_{\text{НСМО}}$ , характеризующая

акцепторные свойства молекул в целом, есть энергия которую необходимо затратить на заселение молекулярной орбитали одним электроном, и обуславливает прочность комплексов промежуточных продуктов. Чем ниже значение  $E_{\text{НСМО}}$  тем прочнее соответствующий р- (или у-) комплекс. Следовательно, тем более сильным акцептором является данная молекула, проявляя сродство к нуклеофильному реагенту.

Таблица 2. Коэффициенты ВЗМО и НСМО в молекулах ХМАК и ГМА-ХМАК.

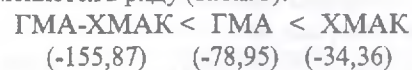
Соединение	Энергия МО, эВ		Коэффициенты АО (вклады атомов в
	ХМАК	ВЗМО	
	НСМО	-6,1	-0,61 $p_zC_1$ -0,5 $p_zC_4$ , -0,42 $p_zC_2$ , 0,42 $p_zO_5$
Сополимер ГМА-ХМАК	ВЗМО	-11,01	-0,79 $p_x$ -0,29 $p_y$ -0,14 $p_zC_{1,2}$
	НСМО	0,19	0,57 $p_x$ , -0,48 $p_yC_{2,5}$ , -0,41 $p_x$ , 0,35 $p_yO_{2,6}$

$E_{\text{НСМО}}$  исследуемых молекул увеличивается в ряду: ХМАК < ГМА < сополимер ГМА-ХМАК.

В отличие от исходного мономера ХМАК, сополимер ГМА-ХМАК характеризуется существенным вкладом в ВЗМО атомных орбиталей реакционноспособного атома  $C_{1,2}$ , а НСМО – вкладом атомов  $C_{2,5}$  и  $O_{2,6}$  карбонильной группы хлорангидридного звена сополимера.

Известно [2,3], что чем отрицательнее значение теплоты образования (ДН<sub>ф</sub>, ккал/моль) молекулы, тем она термодинамически более выгодна.

Теплота образования мономеров и сополимера изменяется в ряду (табл. 3):



Следовательно, молекула сополимера является более прочной и устойчивой по сравнению с исходными мономерами.

Все это дает нам основание утверждать, что сополимер ГМА-ХМАК может вступать в реакцию с нуклеофильными реагентами сначала по связанному атому хлора, а затем за счет раскрытия эпиксидного кольца, о чем свидетельствуют квантово-химические расчеты молекул.

Таблица 3. Энергетические характеристики модельных соединений ГМА, ХМАК и сополимера ГМА-ХМАК.

Характеристики	ГМА	ХМАК	ГМА-ХМАК
$\Delta H_f$ , ккал/моль	-78,95	-34,46	-155,87
$E_{\sigma}$ , эВ	-8868,41	-3916,31	-19132,58
$E_{\pi}$ , эВ	6874,83	2755,21	16075,97
$E_{\text{пол.}}$ , эВ	-1993,58	-1161,09	-3056,61
$I$ , эВ	10,54	10,84	11,01
$m, D$	1,400	2,899	3,463
Молекулярная масса г/моль	-	104,54	248,71

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Кочнов И.М., Сорокин М.Ф., Шувалова А.И. Синтез глицидилметакрилата. Исследования в области химии и органических веществ. Труды МХТИ им. Д. И. Менделеева. М., 1963. Вып.42, с. 94 - 97.
2. Заявка № 55-85575. Япония. Получение глицидилметакрилата. Хориути Масахито, Хатадзакэ Иосифуса, Карасава Минато, Кано Тосюки. Оpubл. 27.06.80.
3. Ибрагимов М.Д. Роль глицидилового эфира метакриловой кислоты в синтезе реакционноспособных сополимеров. Нефтехимия. - 2000. - Т. 40, № 4. - с.315 - 320.

## ТҰЖЫРЫМ

Кванттық-химиялық әдіс бойынша метакрил қышқылының хлорангидридi молекулалары мен оның ГМА-мен сополимерлерiнiң молекулалары үшiн электрондық параметрлерiнiң есептеулерi жүргiзiлдi. ГМА-ХМАК сополимерi алдымен байланысқан хлор атомымен нуклеофильдi реагенттерi арқылы реакцияласады да, содан соң эпоксид сақинасын қамтте жүредi. Бұл мәліметті молекуланың кванттық-химиялық есептеулері дәлелдейді.

## SUMMARY

Quant-chemical methods It is carried out calculation of electronic parameters for chloride anhydride of methacryl acid (CMAA) and its copolymers with GMA copolymer GMA-CMAA can react with nucleophilic reagents of first on concerned chlorine atom then uncovering epoxide rings, about it is evidence of quantum-chemical calculation method.

ФУНДАМЕНТАЛЬНАЯ НАУКА  
УДК 631.823:542.9

## СИНТЕЗ И ИССЛЕДОВАНИЕ ПОЛИЭЛЕКТРОЛИТОВ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ

Н.А. Бектенов, Д.А.Амирхожаева, З.Н. Бектенова

Казахский национальный медицинский университет имени С.Д. Асфендиярова  
Институт химических наук МОН РК

С целью получения анионитов поликонденсацией сополимера на основе ГМА-ХМАК с полиаминами алифатического (ПЭИ, ПЭПА) и ароматического (П2М5ВП) ряда выявлены оптимальные концентрации исходных веществ, температура и продолжительность реакции, обеспечивающее образование полимеров с высокими ионообменными характеристиками /1,2/.

Таблица 1. Влияние концентрации аминирующего агента на обменную емкость ионитов (100°C, 15 ч.)

Полиамин	ГМА-ХМАК Амин, масс. ч.	СОЕ по 0,1 н. р-ру HCl мг-экв/г.	N, %
ПЭИ	1,0:0,7	8,10	11,34
	1,0:5,0	9,80	13,72
	1,0:7,5	10,25	14,35
	1,0:10,0	10,80	15,12
ПЭПА	1,0:0,3	7,34	10,27
	1,0:0,6	9,00	12,60
	1,0:0,9	9,45	13,23
	1,0:1,2	9,93	9,93
П2М5ВП	1,0:1,0	6,05	8,47
	1,0:3,0	6,89	9,63
	1,0:7,5	8,10	11,34
	1,0:10,0	8,55	11,97