

УДК 541.452:541.49:547.872/.874:546.56'74

## ПРОТОЛИТИЧЕСКИЕ И КОМПЛЕКСООБРАЗУЮЩИЕ СВОЙСТВА 2,4-ДИАМИНО-6- (КАРБАМОИЛМЕТИЛСУЛЬФИНИЛМЕТИЛ)-1,3,5-ТРИАЗИНА

*Ю.И. Сальников, Г.А. Боос, С.Г. Фаттахов, М.М. Шулаева,  
Г.А. Чмутова, А.Р. Хусаинова, В.В. Неклюдов*

### Аннотация

Исследованы растворы нового препарата – 2,4-диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазина, обладающего антитуберкулезной активностью, методами рН-метрии, спектрофотометрии, математического моделирования равновесий (программа CPRESSP) и молекулярной механики [программный пакет ChemOffice (Ultra Version 12.0)].

Охарактеризованы протолитические свойства 2,4-диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазина. Выявлена тенденция вещества к самоассоциации при увеличении его концентрации в растворе. Определен состав и вычислены константы устойчивости комплексов соединения с медью(II). На основании анализа УФ-спектров поглощения получены первичные (качественные) данные о комплексообразующей способности 2,4-диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазина в отношении никеля(II) в водно-диметилсульфоксидном растворе и меди(II) в водном солянокислом растворе.

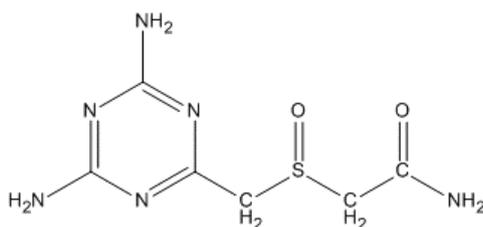
**Ключевые слова:** 2,4-диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазин, диметилсульфоксид, ПАВ, азотсодержащие гетероциклы, амидная и сульфоксидные группы, протонированные формы, методы рН-метрии, спектрофотометрии и математического моделирования равновесий в растворах, метод молекулярной механики, кислотно-основные свойства, комплексообразование.

### Введение

2,4-Диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазин – новый препарат [1], обладающий более высокой по сравнению с тубофеном [2] противотуберкулезной активностью (высокой видоспецифичностью и низкой токсичностью). Помимо диаминотриазина в состав препарата входят сульфоксидная и амидная группы. В литературе имеются сведения о свойствах соединений, содержащих по отдельности перечисленные функциональные группы. Что касается 2,4-диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазина, то его поведение в растворах не исследовали. Не изучены и кислотно-основные свойства соединения, не обсуждена его склонность участвовать в реакциях комплексообразования. Известно, тем не менее, что многие из противомикробных препаратов, в том числе и противотуберкулезные, являются прекрасными лигандами, увеличивающими в ряде случаев лечебный эффект самих препаратов.

В настоящей работе получены сведения о состоянии в растворе и протолитических свойствах 2,4-диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триа-

зина, оценено возможное взаимодействие соединения с типичными комплексообразователями – медью(II) и никелем(II).



### Экспериментальная часть

Исследование выполнено методами рН-метрического титрования и спектрофотометрии. Значения рН растворов измеряли на рН-метре – рН-673 М. В качестве индикаторного электрода использовали стеклянный (ЭЛС – 43-07), электродом сравнения служил насыщенный хлорсеребряный. Стеклянный электрод калибровали для каждой концентрации водно-органического растворителя [3]. Электронные спектры поглощения (ЭСП) растворов зарегистрированы относительно растворителя на спектрофотометре Lambda 35 101N6112101 (Perkin-Elmer UV WinLab) и SPEKOL 11 в кварцевых кюветах (толщина поглощающего слоя 1 см).

2,4-Диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазин синтезировали согласно [1]. Диметилсульфоксид (ДМСО) очищали перегонкой [4]. Неионогенное ПАВ Тритон Х-100 *n*-(*трет*-октил)фениловый эфир полиэтиленгликоля [C<sub>8</sub>H<sub>17</sub>-C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>(OC<sub>2</sub>H<sub>4</sub>)<sub>9-10</sub>ОН] фирмы Ferak имело содержание основного вещества 98%.

Растворы 2,4-диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазина приготовлены по точной навеске. Соединение практически не растворимо в воде. Исследования выполнены в водно-диметилсульфоксидных растворах с содержанием ДМСО 20 и 40 об.%, а также в водных растворах в присутствии Тритона Х-100. Ионную силу растворов создавали за счет их компонентов, поскольку введение фонового электролита понижает растворимость соединений и может влиять на процессы ассоциации в растворе. Рабочие растворы бескарбонатного гидроксида натрия, хлороводородной кислоты, нитратов меди(II) и никеля(II) приготовлены из реактивов марки «х.ч.». Концентрацию растворов устанавливали методами объемного анализа.

В ходе эксперимента растворы 2,4-диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазина титровали рН-метрически растворами кислоты и щелочи в отсутствие и в присутствии меди(II). Титруемые растворы и титранты не отличались по концентрации органического растворителя. В случае ПАВ и титрант, и титруемый раствор содержали Тритон Х-100 в одинаковых концентрациях. Титрование с непрерывным вводом титранта проводили в термостатируемой стеклянной ячейке (298 К). Титруемые растворы перемешивали магнитной мешалкой.

В приготовленных для титрования водно-диметилсульфоксидных растворах воспроизводимые значения потенциалов стеклянного электрода устанавливались

в течение 15–20 мин. В процессе титрования это время сокращалось до 3–7 мин. Однако в области, близкой к точке эквивалентности, время установления потенциала существенно увеличивалось. В этих случаях значения pH измеряли через 10 мин после добавления очередного количества титранта.

Экспериментальные данные обработаны по программе CPESSP [5]. Достоверность выбранных моделей охарактеризована факторами  $F$  и  $R$  [6, 7]. При математическом моделировании протолитических равновесий или реакций комплексообразования по данным метода pH-метрии в рамках программы CPESSP [5] в качестве моделируемого отклика используют значение функции образования Бьеррума  $\tilde{n}$  [8] в зависимости от pH растворов. В спектрофотометрическом методе таким откликом является молярный коэффициент поглощения.

### Результаты и обсуждение

Вид кривых pH-метрического титрования представлен на рис. 1.

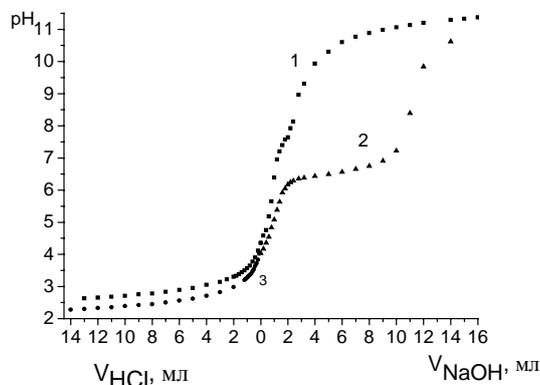


Рис. 1. Кривые pH-метрического титрования 2,4-диамино-6-(карбамоилметилсульфинил-метил)-1,3,5-триазина в водно-ДМСО (20 об.% ДМСО) растворах в отсутствие (кривая 1) и в присутствии меди(II) (кривая 2). Концентрации реагентов, моль/л:  $C_L = 2.05 \cdot 10^{-3}$ ,  $C_{\text{NaOH}} = 4 \cdot 10^{-3}$ ,  $C_{\text{HCl}} = 8 \cdot 10^{-3}$ ,  $C_{\text{Cu}^{2+}} = 9.7 \cdot 10^{-4}$ . (Ветвь 3 кривой 2 –  $C_{\text{HCl}} = 1.6 \cdot 10^{-2}$ )

Табл. 1

Протолитические равновесия в водно-ДМСО (20 об.% ДМСО) растворе вещества L.  $C_L = 2.05 \cdot 10^{-3}$  моль/л

Равновесие	$\lg K$	$\alpha_{\text{max}}$	$\text{pH}_{\text{max}}$
1. $2L \rightleftharpoons H^+ + [(L_2)H_{-1}]^-$	$-5.37 \pm 0.10$	0.32	7.64
2. $L + H^+ \rightleftharpoons (HL)^+$	$2.55 \pm 0.03$	0.52	2.35
3. $L + 3H^+ \rightleftharpoons (H_3L)^{3+}$	$6.72 \pm 0.10$	0.21	2.28

Выявленные в результате моделирования экспериментальных данных протолитические равновесия в растворах вещества L при содержании ДМСО 20 об.% приведены в табл. 1, долевое распределение форм – на рис. 2. Здесь  $\alpha_{\text{max}}$  – максимальная доля накопления образующейся формы кислоты при  $\text{pH}_{\text{max}}$ .

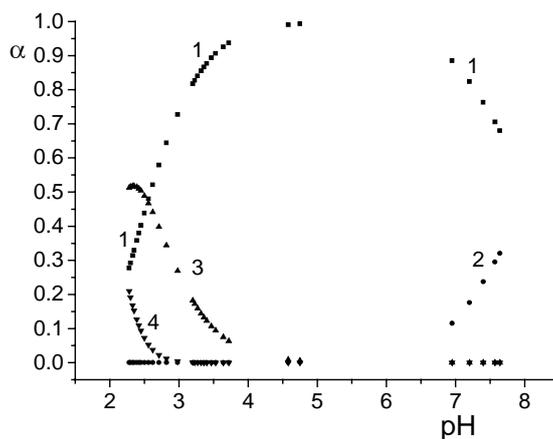


Рис. 2. Долевое распределение в зависимости от pH протонированных (3, 4), депротонированной (2) и нейтральной (1) форм соединения L ( $C_L = 2.05 \cdot 10^{-3}$  моль/л) в 20%-ном ДМСО-водном растворе: 1 – L, 2 –  $[(L_2)H_{-1}]^-$ , 3 –  $(HL)^+$ , 4 –  $(H_2L)^{2+}$

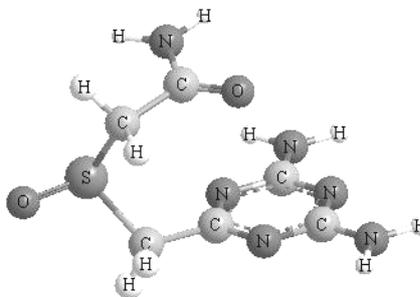


Рис. 3. Геометрия молекулы 2,4-диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триази́на

Как видно, нейтральная форма доминирует в интервале pH 3.5–7.0. Оптимизированная с использованием программного пакета [9] геометрия 2,4-диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триази́на (в амидной форме) приведена на рис. 3. Конфигурация соединения такова, что боковая цепь изогнута и ориентируется над плоскостью гетероцикла. Такая «свернутая» конфигурация стабилизируется за счет внутримолекулярных водородных связей между аминогруппами диаминотриазинового фрагмента и амидной группой соединения.

В области  $pH > 6$  существует депротонированная димерная частица (равновесие 1). В кислой среде образуются две частицы: монопротонированная и трипротонированная (равновесия 2 и 3), дипротонированная форма не обнаружена. В плане сопоставления отметим, что для диаминотриази́на из литературы известна только монопротонированная форма, значение  $pK_a$  3.91 которой в водном растворе [10] выше аналогичной величины для исследуемого соединения (табл. 1).

Как и в случае меламина, протонирование атома азота гетероцикла в рассматриваемом соединении вероятнее, чем протонирование аминогруппы [11]. Действительно, согласно расчету монокатион наиболее устойчив в той форме, в которой протонирован атом азота гетероцикла в положении 5. При этом «свернутая» конфигурация соединения сохраняется (рис. 4).

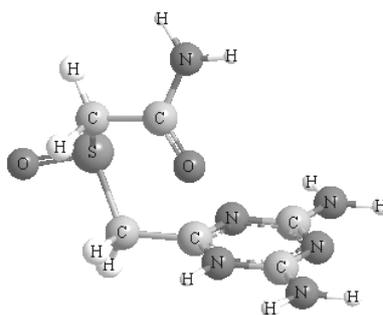


Рис. 4. Монопротонированная форма молекулы 2,4-диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазина

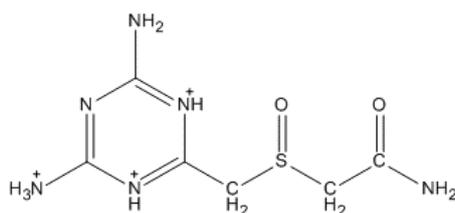


Рис. 5. Трипротонированная форма молекулы 2,4-диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазина

В случае трипротонированной формы наиболее устойчивой является та, в которой протоны находятся в положениях 1 и 5 у атомов азота в гетероцикле и у атома азота аминогруппы в положении 2. В результате трехкратного протонирования структура становится «развернутой» (рис. 5).

В растворах мицеллярных концентраций неионного ПАВ Тритона X-100 ( $C_{ТХ} 5 \cdot 10^{-3}$  и  $10^{-2}$  моль/л) соединения L ( $C_L 2.0 \cdot 10^{-3}$  моль/л) в целом реализуются те же формы (1–3), что и в 20%-ном ДМСО-водном растворе при том же содержании соединения. Вычисленные в присутствии ПАВ константы равновесий являются «кажущимися», поскольку микрогетерогенность среды во внимание не принималась. Значения рК кажущихся констант автоматически включают в себя суммарный эффект взаимодействия реагентов [12].

По сравнению с водно-ДМСО раствором существенно увеличивается (приблизительно на три порядка) константа образования трипротонированной формы. Такое же влияние Тритона X-100 имеет место, например, в случае необразующих мицелл 2,6-бис(диметиламинометил)-4-метилфенола [13], N,N-диметил-N'-2-гидроксibenзил)этилендиамина [14]. Протонированные формы могут стабилизироваться за счет образования ими водородных связей с эфирными атомами кислорода полиэфирной цепи неионного ПАВ. Тритон X-100 содействует также образованию димерной анионной формы  $[(L_2)H_2]^{2-}$  (равновесие 4 в табл. 2).

При более высокой, чем в рассмотренных случаях, концентрации исследуемое вещество проявляет склонность к ассоциации: выявлены тетрамерные и октамерная формы – нейтральные и ионизированные (рис. 6).

Табл. 2

Протолитические равновесия вещества L ( $C_L = 2.0 \cdot 10^{-3}$  моль/л) в растворе Тритона X-100 ( $C_{Tx} = 10^{-2}$  моль/л)

Равновесие	lg K	$\alpha_{\max}$	pH <sub>max</sub>
1. $2L \rightleftharpoons H^+ + [(L_2)H_{-1}]^-$	$-6.32 \pm 0.47$	0.65	9.97
2. $L + H^+ \rightleftharpoons (HL)^+$	$2.76 \pm 0.24$	0.12	3.42
3. $L + 3H^+ \rightleftharpoons (H_3L)^{3+}$	$10.02 \pm 0.07$	0.49	3.31
4. $2L \rightleftharpoons 2H^+ + [(L_2)H_{-2}]^{2-}$	$-16.94 \pm 0.88$	0.14	9.97

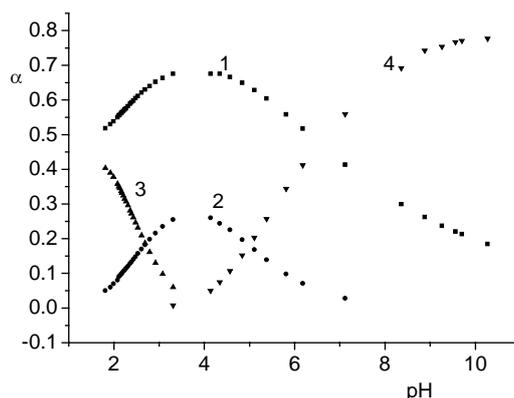


Рис. 6. Долевое распределение в 40%-ном ДМСО-водном растворе в зависимости от pH нейтральных и ионизированных форм соединения L ( $C_L = 1.231 \cdot 10^{-2}$  моль/л): 1 – L, 2 –  $(L)_4$ , 3 –  $[H(L)_4]^+$ , 4 –  $[(L_8)H_{-1}]^-$

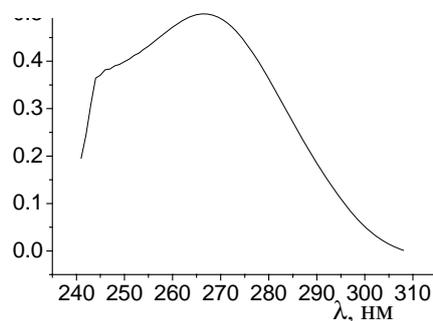


Рис. 7. Спектр поглощения водно-диметилсульфоксидного (40 об.% ДМСО) раствора 2,4-диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазина.  $C_L = 2 \cdot 10^{-4}$  моль/л.  $\lambda_{\max}$  267 нм,  $A_{267}$  0.500,  $\epsilon_{\max}$   $2.50 \cdot 10^3$  л·моль<sup>-1</sup>·см<sup>-1</sup>

2,4-Диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазин в среде водного диметилсульфоксида поглощает в УФ-части спектра (рис. 7). Эта полоса по положению и интенсивности близка полосе поглощения 2,4-диаминотриазина в водном растворе:  $\lambda_{\max}$  257.5 нм,  $\epsilon$   $3.64 \cdot 10^3$  л·моль<sup>-1</sup>·см<sup>-1</sup> [10].

При добавлении меди(II) к водно-диметилсульфоксидному раствору соединения раствор приобретает голубовато-зеленоватую окраску. В спектре имеются две полосы поглощения (спектр 2 на рис. 8 и 9). Первая при 285 нм смещена в область длинных волн по сравнению с полосой поглощения самого соединения. Ее можно рассматривать как полосу переноса заряда.

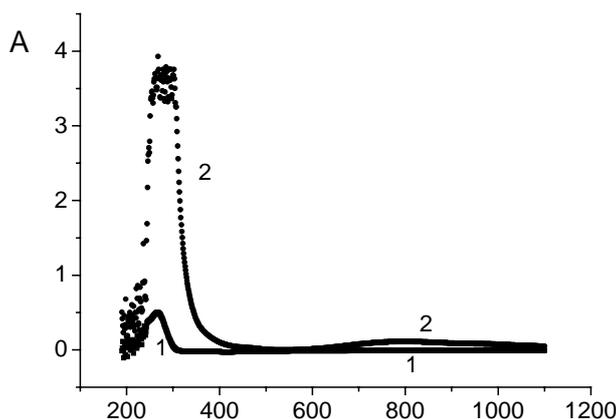


Рис. 8. Спектры поглощения водно-ДМСО (40 об.% ДМСО) растворов соединения L в отсутствие (1) и в присутствии меди(II) (2). Концентрации, моль/л,  $C_L$ : 1 –  $2 \cdot 10^{-4}$ , 2 –  $10^{-2}$ .  $C_{Cu^{2+}} = 5.04 \cdot 10^{-3}$ .  $\lambda_{\text{макс}}$ , нм: 1 – 267, 2 – 285;  $\epsilon_{\text{макс}}$ , л·моль $^{-1}$ ·см $^{-1}$ : 1 –  $2.5 \cdot 10^3$ ; 2 – 750

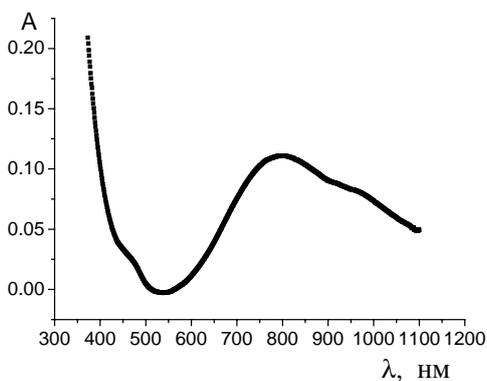


Рис. 9. Вторая полоса спектра поглощения водно-ДМСО (40 об.% ДМСО) раствора 2,4-диамино-6-(карбаомилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазина в присутствии меди(II).  $\lambda_{\text{макс}}$  790–805;  $A_{797}$  0.111;  $\epsilon_{797}$  22.0 л·моль $^{-1}$ ·см $^{-1}$

Вторая полоса малой интенсивности и более растянутая, вероятнее всего, вызвана  $d-d$ -переходами в комплексе. В этой области длин волн поглощают сами диметилсульфоксидные комплексы меди(II). Так, в 40%-ном ДМСО-водном растворе максимальная доля накопления комплекса  $[Cu(DMSO)_2]^{2+}$  равна 0.30 ( $\lg \beta$  1.21,  $\lambda_{\text{макс}}$  830 нм,  $\epsilon$  40 л·моль $^{-1}$ ·см $^{-1}$ ,  $\beta$  – константа устойчивости комплекса) [15].

Для определения состава и устойчивости комплексов, образующихся в системе медь(II) – соединение L, измерены оптические плотности в двух сериях растворов с постоянными концентрациями комплексообразователя ( $5.04 \cdot 10^{-3}$  и  $6.98 \cdot 10^{-3}$  моль/л соответственно) и варьируемыми концентрациями лиганда (соединения L). Растворы достаточно устойчивы: их оптическая плотность и pH практически не изменяются со временем (более 2 ч). Рассмотрены зависимости светопоглощения при длинах волн  $\lambda$  340–360 нм от концентрации вещества, поскольку первая полоса интенсивнее. Само соединение в этом диапазоне длин волн не поглощает. Экспериментальные данные представлены на рис. 10.

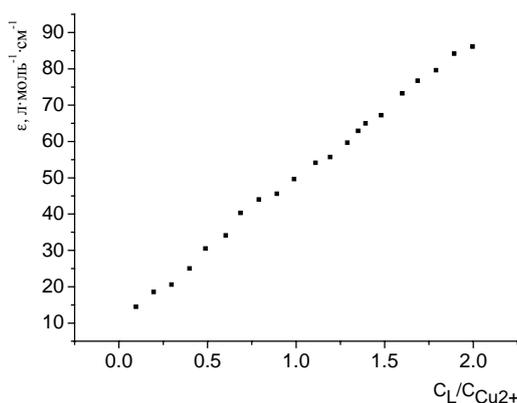


Рис. 10. Зависимость  $\epsilon_{344} - C_L/C_{Cu^{2+}}$ .  $C_{Cu^{2+}} = 5.04 \cdot 10^{-3}$  моль/л,  $\lambda$  344 нм

Табл. 3

Константы реакций комплексообразования меди(II) с 2,4-диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазином в водно-диметилсульфоксидном растворе (40 об.% ДМСО)

Равновесие	$\alpha_{\text{макс}}$	$\lg K$	$\epsilon$
5. $Cu^{2+} + L \rightleftharpoons [CuL]^{2+}$	0.184	$6.52 \pm 0.14$	2.4
6. $Cu^{2+} + 2L \rightleftharpoons [CuL_2]^{2+}$	0.999	$15.12 \pm 0.28$	91.1

На кривой зависимости  $\epsilon_{344} - C_L/C_{Cu^{2+}}$  (рис. 10) нет участка, отвечающего насыщению. Создать более высокую концентрацию вещества в растворе не представилось возможным из-за его ограниченной растворимости.

Исследуемое соединение образует с медью(II) комплексы состава 1 : 1 и 1 : 2 (табл. 3). Комплексы существуют в области  $pH \approx 3.5-4.5$  и разрушаются щелочью (рис. 1, кривая 2).

В условиях эксперимента доля накопления первого комплекса невелика по сравнению с таковой для второго. Константы равновесий реакций 5 и 6 являются одновременно и константами устойчивости образующихся комплексов. При этом соотношение последовательных констант устойчивости  $\lg k_1$  (6.52) <  $\lg k_2$  (8.60), отличающееся от обычного  $\lg k_1 > \lg k_2$ , может говорить о повышенной прочности комплекса состава 1 : 2.

Было предположено, что в координации участвуют сульфоксидная и амидная группы, последняя координируется посредством атома кислорода (первый вариант) (рис. 11).

Оптимизированная геометрия комплексов состава 1 : 1 и 1 : 2 приведена на рис. 11. Явно прослеживается тенденция каждого диамино-триазинового фрагмента располагаться над «своим» псевдоароматическим шестичленным хелатным циклом, включающим медь(II). Такое взаимное «стопкообразное» расположение составных частей соединения может быть причиной дополнительной стабилизации комплекса состава 1 : 2.

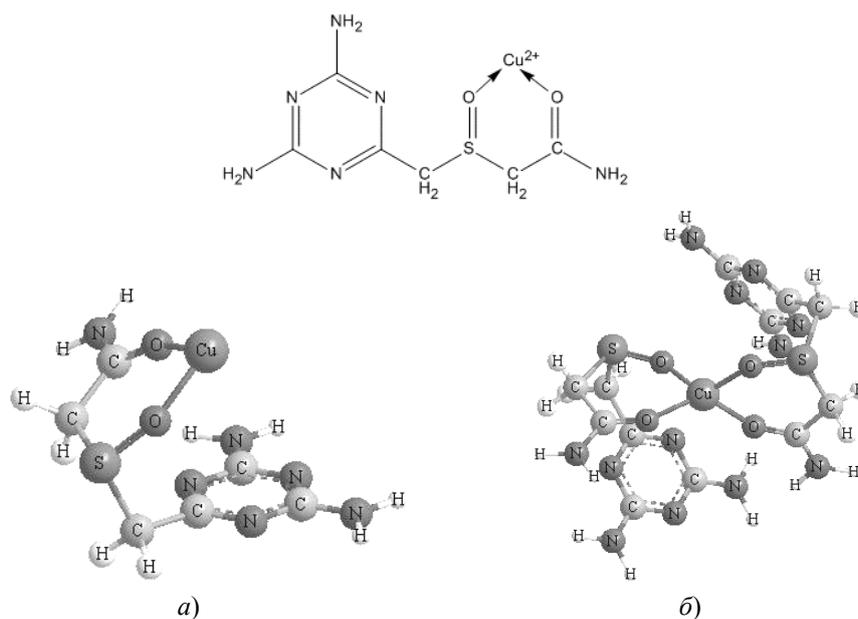


Рис. 11. Пространственная структура комплексов меди(II) с 2,4-диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазином состава 1 : 1 (а) и 1 : 2 (б)

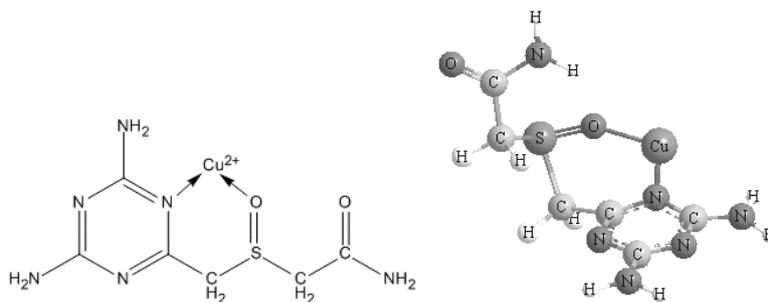


Рис. 12. Второй вариант геометрии комплекса  $[CuL]^{2+}$  (менее благоприятный)

Что касается бидентатной координации соединения L через атомы азота гетероцикла и кислорода сульфоксидной группы (второй вариант), то она менее благоприятна  $\Delta\Delta E = 149.6$  кДж/моль (рис. 12). При этом возрастает напряжение в структуре молекулы за счет уменьшения длины связи ион металла – донорный атом лиганда (атом азота ароматического гетероцикла). Так, рассчитанная длина связи медь(II) – атом азота равна 0.135 нм, а связи медь(II) – атом кислорода сульфоксидной группы – 0.181 нм. В то же время для структуры, представленной на рис. 11, а, длины обеих связей медь(II) – атомы кислорода одинаковы (0.182 нм).

Получены первичные (качественные) данные о комплексообразующей способности 2,4-диамино-6-(карбамоилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазина относительно никеля(II) в водно-диметилсульфоксидном (40 об.% ДМСО) растворе (рис. 13). На это указывает увеличение интенсивности полосы поглощения соединения при 267 нм в присутствии никеля(II), а именно: приращение оптической плотности составило  $\Delta A_1$  0.087 для  $C_{Ni^{2+}} = 1.1 \cdot 10^{-4}$  моль/л и  $\Delta A_2$  0.173 при  $C_{Ni^{2+}} = 2.1 \cdot 10^{-4}$  моль/л ( $C_L = 4.5 \cdot 10^{-4}$  моль/л).

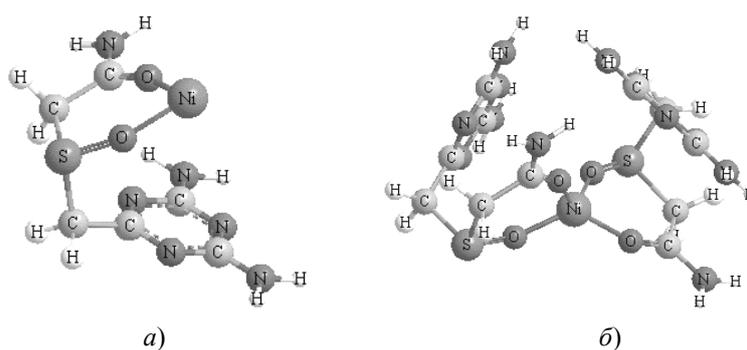


Рис. 13. Геометрия комплексов никеля(II) с 2,4-диамино-6-(карбаомилметилсульфинил-метил)-1,3,5-триазином состава 1 : 1 (а) и 1 : 2 (б)

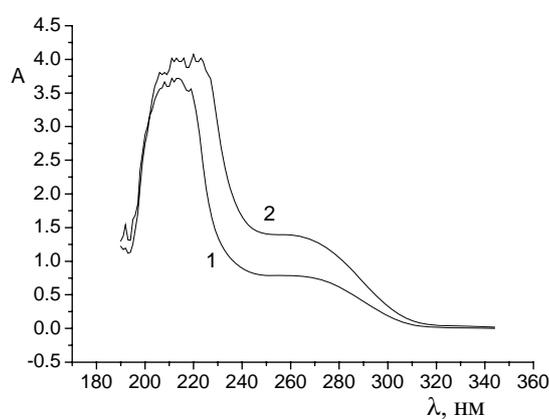


Рис. 14. Спектры поглощения солянокислого раствора соединения L в отсутствие (спектр 1) и в присутствии меди(II) (спектр 2). Концентрации, моль/л:  $C_L = 4.48 \cdot 10^{-4}$ ,  $C_{HCl} = 4 \cdot 10^{-2}$ ,  $C_{Cu^{2+}} = 4.264 \cdot 10^{-4}$ . 1 –  $\lambda_{\text{макс}}$  211–214 нм,  $A_{213}$  3.716,  $\epsilon_{213}$   $8.295 \cdot 10^3$ ;  $\lambda_{\text{пл}}$  250–260 нм,  $A_{258}$  0.786,  $\epsilon_{258}$   $1.75 \cdot 10^3$ ; 2 –  $\lambda_{\text{макс}}$  220 нм,  $A_{220}$  4.076,  $\lambda_{\text{пл}}$  250–256 нм,  $A_{252}$  1.399. pH: 1 – 1.45, 2 – 1.44

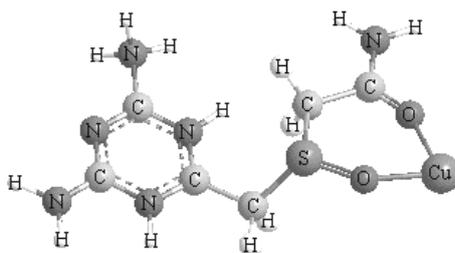


Рис. 15. Пространственная структура комплекса состава 1 : 1 меди(II) с трипротонированной формой лиганда  $(H_3L)^{3+}$ , предположительно, образующегося в солянокислом растворе (pH 1.45)

Оптимизация геометрии показала, что у комплексов меди(II) и никеля(II) одинакового состава имеются локальные минимумы общей «пространственной энергии» при близком геометрическом строении.

Растворимость 2,4-диамино-6-(карбаомилметилсульфинилметил)-1,3,5-триазина в хлороводородной кислоте ( $C_L = 4.5 \cdot 10^{-4}$ ,  $C_{HCl} = 4 \cdot 10^{-2}$  моль/л), предположительно, обусловлена переходом «свернутой» конфигурации соединения в «развернутую» в результате образования трипротонированной формы. Можно отметить, что значение рН такого раствора исследуемого вещества в соляной кислоте соответствует величине рН желудочного сока.

На рис. 14 приведены спектры поглощения солянокислых растворов соединения в отсутствие и в присутствии меди(II).

При введении меди(II) положение полосы поглощения и «плеча» мало изменяется, но существенно возрастает их интенсивность.

Однако вопрос о комплексообразовании исследуемого вещества с медью(II) в солянокислых растворах (рН 1.45) требует специального рассмотрения, поскольку спектральные характеристики в УФ-области самого соединения и хлоридных комплексов меди(II) близки [16]. Тем не менее можно полагать, что в комплексообразовании будет участвовать «развернутая» трипротонированная форма лиганда, координируемая медью(II) через атомы кислорода амидной и сульфоксидной групп (рис. 15).

### Summary

*Yu.I. Salnikov, G.A. Boos, S.G. Fattakhov, M.M. Shulaeva, G.A. Chmutova, A.R. Khusainova, V.V. Neklyudov.* Acid-Base Properties and Complex Formation of 2,4-Diamino-6-(Carbamoylmethylsulphinyl)-1,3,5-Triazines.

A new compound with anti-tuberculosis activity was studied in a solution using potentiometric titration, spectrophotometry, mathematical simulation (CPESSP program), and the method of molecular mechanics [software package ChemOffice Ultra Version 12.0].

Acid-base properties of 2,4-diamino-6-(carbamoylmethylsulphinyl)-1,3,5-triazine were characterized. At the increase of concentration, the compound showed a tendency toward self-association. Composition and stability constants for the complexes with copper(II) were determined. Based on the analysis of ultraviolet absorption spectra, the primary (qualitative) data about the complexing ability with nickel(II) in a water-DMSO solution and with copper(II) in an aqueous hydrochloric acid solution were obtained.

**Key words:** 2,4-diamino-6-(carbamoylmethylsulphinyl)-1,3,5-triazine, dimethylsulphoxide, surfactant, nitrogen-containing heterocycles, amide and sulphoxide groups, protonated forms, potentiometry, spectrophotometry, mathematical simulation, method of molecular mechanics, acid-base properties, complex formation.

### Литература

1. Заявка № 2010125483/04(036192) Российская Федерация. Триазины, обладающие противотуберкулезной активностью / С.Г. Фаттахов, Р.Ш. Валиев, М.М. Шулаева, Л.Ф. Сайфина, Р.В. Честнова, Д.Н. Мингалеев, М.Я. Трemasов, Р.Х. Равилов, В.С. Резник. – заявл. 21.06.10.
2. Пат. № 2281939 Российская Федерация. Соль бис(оксиметил)фосфиновой кислоты с гидразидом изоникотиновой кислоты (тубофен), обладающая противотуберкулезным действием, и способ ее получения / С.Г. Фаттахов, Д.Н. Мингалеев, М.А. Сафин, В.С. Резник, И.Н. Залялов, М.Я. Трemasов, А.И. Коновалов, А.А. Визель. – № 2005108467/04, заявл. 25.03.05, опублик. 20.08.06, Бюл. № 23.

3. Александров В.В. Кислотность неводных растворов. – Харьков: Вища шк., 1981. – 152 с.
4. Гордон А., Форд Р. Спутник химика. – М.: Мир, 1976. – 541 с.
5. Сальников Ю.И., Глебов А.Н., Девятков Ф.В. Полиядерные комплексы в растворах. – Казань: Изд-во Казан. ун-та, 1989. – 287 с.
6. Хартли Ф., Бергес К., Оллок Р. Равновесия в растворах. – М.: Мир, 1983. – 360 с.
7. Доерфель К. Статистика в аналитической химии. – М.: Мир, 1969. – 247 с.
8. Бьеррум Я. Образование аминов металлов в водном растворе. Теория обратимых ступенчатых реакций. – М.: Изд-во иностр. лит., 1967. – 308 с.
9. Cambridgesoft – ChemBioOffice Ultra, Version 12.0. – 2010. – URL: <http://cambridgesoft.com/software/chembiooffice>, свободный.
10. Roth B., Strelitz J.Z. The Protonation of 2,4-Diaminopyrimidines. I. Dissociation Constants and Substituent Effects // J. Org. Chem. – 1969. – V. 34, No 4. – P. 821–836.
11. Сальников Ю.И., Боос Г.А., Рыжкина И.С., Фаттахов С.Г., Чмутова Г.А., Заринова Г.Р. Мелафен, меламина и бис(гидроксиэтил)фосфиновая кислота. Кислотно-основные свойства и поведение в присутствии ионов некоторых металлов // Журн. общ. химии. – 2009. – Т. 79, Вып. 6. – С. 902–907.
12. Мчедлов-Петросян Н.О., Рубцов М.И., Лукацкая Л.Л., Черная Т.А., Переверзев А.Ю. Ионные равновесия индикаторов в мицеллярных средах // Докл. АН СССР. – 1988. – Т. 299. – С. 921–925.
13. Сальников Ю.И., Боос Г.А., Рыжкина И.С., Лукашенко С.С., Манжукова Д.Н. Протолитические свойства некоторых бис(диметиламиноэтил)фенолов в присутствии поверхностно-активных веществ // Коллоид. журн. – 2006. – Т. 65, № 5. – С. 664–669.
14. Сальников Ю.И., Боос Г.А., Рыжкина И.С., Ганиева Э.Р. Взаимодействие N,N-диметил-N'-(2-гидроксибензил) этилендиамина с медью(II) в присутствии поверхностно-активных веществ // Журн. общей химии. – 2005. – Т. 75, Вып. 3. – С. 379–382.
15. Сальников Ю.И., Боос Г.А., Гибадуллина Х.В. Сольватация меди(II) и ЭДТА в некоторых водно-органических средах // Изв. вузов. Химия и хим. технология. – 1991. – Т. 17, № 5. – С. 20–24.
16. Bjerrum J., Skibsted L.H. A Contribution to Our Knowledge of Weak Chloro Complex Formation by Copper(II) in Aqueous Chloride Solutions // Acta Chem. Scand. A. – 1977. – V. 31, No 8. – P. 673–677.

Поступила в редакцию  
27.06.11

---

**Сальников Юрий Иванович** – доктор химических наук, профессор кафедры неорганической химии Казанского (Приволжского) федерального университета.

E-mail: [Jura.Salnikov@ksu.ru](mailto:Jura.Salnikov@ksu.ru)

**Боос Галина Арведовна** – кандидат химических наук, доцент кафедры неорганической химии Казанского (Приволжского) федерального университета.

E-mail: [Galina.Boos@ksu.ru](mailto:Galina.Boos@ksu.ru)

**Фаттахов Саитарей Галаевич** – кандидат химических наук, старший научный сотрудник лаборатории химико-биологических исследований ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН.

E-mail: [shulaeva@iopc.ru](mailto:shulaeva@iopc.ru)

**Шулаева Марина Михайловна** – кандидат химических наук, научный сотрудник лаборатории химико-биологических исследований ИОФХ им. А.Е. Арбузова КазНЦ РАН.

E-mail: *shulaeva@iopc.ru*

**Чмутова Галина Алексеевна** – доктор химических наук, профессор кафедры органической химии Казанского (Приволжского) федерального университета.

E-mail: *Galina.Tschmutowa@ksu.ru*

**Хусаинова Альбина Рустемовна** – студент кафедры неорганической химии Казанского (Приволжского) федерального университета.

**Неклюдов Вадим Вячеславович** – студент кафедры неорганической химии Казанского (Приволжского) федерального университета.