

## ВЗАИМОДЕЙСТВИЕ ПЕНТАФЕНИЛСУРЬМЫ С N-(4-МЕТОКСИФЕНИЛ)ФТАЛАМОВОЙ КИСЛОТОЙ

**В.В. Шарутин<sup>1</sup>✉, О.К. Шарутина<sup>1</sup>, В.В. Зубарева<sup>1</sup>, А.В. Чернышова<sup>2</sup>,  
В.В. Доценко<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> Южно-Уральский государственный университет, г. Челябинск, Россия

<sup>2</sup> Кубанский государственный университет, г. Краснодар, Россия

✉ sharutin50@mail.ru

**Аннотация.** Пентафенилсурьма взаимодействует с N-(4-метоксифенил)фталамовой кислотой в бензоле при комнатной температуре с образованием бесцветных кристаллов сольвата  $\text{Ph}_4\text{SbOC}(\text{O})\text{C}_6\text{H}_4[2\text{-C}(\text{O})\text{NHC}_6\text{H}_4(\text{OMe-4})]\cdot\frac{1}{2}\text{PhH}$  (**1a**, **б**), строение которого установлено методом рентгеноструктурного анализа (РСА). По данным РСА, атомы сурьмы в двух кристаллографически независимых молекулах **1a**, **б** имеют координацию искаженной тригональной бипирамиды с тремя фенильными заместителями в экваториальной плоскости, аксиальные углы CSbO составляют  $173,7(2)^\circ$  и  $179,0(2)^\circ$ , суммы углов между экваториальными связями равны  $357,6(3)^\circ$  и  $357,1(2)^\circ$ . Экваториальные связи Sb–C ( $2,103(7)$ – $2,123(7)$  Å **1a**,  $2,106(6)$ – $2,114(6)$  Å **1б**) короче аксиальной ( $2,184(7)$  Å **1a** и  $2,155(6)$  Å **1б**). Длины связей Sb–O ( $2,235(4)$  Å **1a** и  $2,257(4)$  Å **1б**) превосходят сумму ковалентных радиусов атомов сурьмы и кислорода. Молекулы сольватного бензола разупорядочены. Данные РСА: (**1**) (дифрактометр D8 Quest фирмы Bruker (MoK $\alpha$ -излучение,  $\lambda = 0,71073$  Å, графитовый монохроматор) при 293(2)K [ $\text{C}_{78}\text{H}_{64}\text{N}_2\text{O}_8\text{Sb}_2$ ,  $M = 1400,81$ ; моноклинная сингония, пр. гр.  $C2/c$ ; размер кристалла  $0,34 \times 0,13 \times 0,13$  мм; параметры ячейки:  $a = 40,68(2)$  Å,  $b = 10,492(5)$  Å,  $c = 36,395(17)$  Å;  $\beta = 100,30(2)^\circ$ ,  $V = 15283(13)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 8$ ;  $\rho(\text{выч.}) = 1,218$  г/см<sup>3</sup>;  $\mu = 0,758$  мм<sup>-1</sup>;  $F(000) = 5696,0$ ; обл. сбора по  $2\theta$ :  $5,68$ – $54,3^\circ$ ;  $-48 \leq h \leq 52$ ,  $-13 \leq k \leq 13$ ,  $-46 \leq l \leq 46$ ; всего отражений 203363; независимых отражений 16863 ( $R_{\text{int}} = 0,1223$ );  $GOOF = 1,0$ ;  $R$ -фактор 0,0524]. Для соединения **1** и исходной N-(4-метоксифенил)фталамовой кислоты проведен предикторный анализ на соответствие критериям биодоступности. Найдено, что исходная фталамовая кислота может рассматриваться как молекула-кандидат для дальнейшего скрининга, тогда как комплексное соединение **1** не обладает приемлемыми физико-химическими параметрами для рассмотрения в качестве потенциально биоактивной молекулы.

**Ключевые слова:** пентафенилсурьма, N-(4-метоксифенил)фталамовая кислота, карбоксилат тетрафенилсурьмы, молекулярная структура, рентгеноструктурный анализ, предикторный анализ

**Для цитирования:** Взаимодействие пентафенилсурьмы с N-(4-метоксифенил)фталамовой кислотой / В.В. Шарутин, О.К. Шарутина, В.В. Зубарева и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2024. Т. 16, № 3. С. 97–104. DOI: 10.14529/chem240303

Original article  
DOI: 10.14529/chem240303

## INTERACTION OF PENTAPHENYLANTIMONY WITH N-(4-METHOXYPHENYL)PHTHALAMIC ACID

**V.V. Sharutin<sup>1</sup>✉, O.K. Sharutina<sup>1</sup>, V.V. Zubareva<sup>1</sup>, A.V. Chernyshova<sup>2</sup>,  
V.V. Dotsenko<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> South Ural State University, Chelyabinsk, Russia

<sup>2</sup> Kuban State University, Krasnodar, Russia

✉ sharutin50@mail.ru

**Abstract.** Pentaphenylantimony reacts with N-(4-methoxyphenyl)phthalamic acid in benzene at room temperature to form colorless crystals of tetraphenylantimony carboxylate solvated by benzene  $\text{Ph}_4\text{SbOC}(\text{O})\text{C}_6\text{H}_4[2\text{-C}(\text{O})\text{NHC}_6\text{H}_4(\text{OMe-4})]\cdot\frac{1}{2}\text{PhH}$  (**1a**, **b**), the structure of which is proven by X-ray

diffraction analysis (XRD). According to the X-ray diffraction data, the antimony atoms in two crystallographically independent molecules **1a**, **1b** have the coordination of a distorted trigonal bipyramid with three phenyl substituents in the equatorial plane, while the CSbO axial angles are 173.7(2)° and 179.0(2)°, and the Sb–C<sub>eq</sub> bond lengths are 2.103(7)–2.123(7) Å (**1a**), 2.106(6)–2.114(6) Å (**1b**), which is significantly less than the Sb–C<sub>ax</sub> distances (2.184(7) Å (**1a**) and 2.155(6) Å (**1b**)). The molecules of the benzene solvate are disordered. The Sb–O bond lengths (2.235(4) Å (**1a**) and 2.257(4) Å (**1b**)) are slightly larger than the sum of the covalent radii of antimony and oxygen atoms (2.07 Å). The X-ray diffraction data: (**1**) (D8 Quest diffractometer from Bruker (MoK $\alpha$  radiation,  $\lambda = 0.71073$  Å, graphite monochromator) at 293(2) K [C<sub>78</sub>H<sub>64</sub>N<sub>2</sub>O<sub>8</sub>Sb<sub>2</sub>,  $M = 1400.81$ ; monoclinic system, space group  $C2/c$ ; crystal size 0.34 × 0.13 × 0.13 mm; cell parameters:  $a = 40.68(2)$  Å,  $b = 10.492(5)$  Å,  $c = 36.395(17)$  Å;  $\beta = 100.30(2)^\circ$ ,  $V = 15283(13)$  Å<sup>3</sup>,  $Z = 8$ ;  $\rho_{\text{calc}} = 1.218$  g/cm<sup>3</sup>;  $\mu = 0.758$  mm<sup>-1</sup>;  $F(000) = 5696.0$ ; collection area according to  $2\theta$ : 5.68–54.3°;  $-48 \leq h \leq 52$ ,  $-13 \leq k \leq 13$ ,  $-46 \leq l \leq 46$ ; total reflections 203363; independent reflections 16863 ( $R_{\text{int}} = 0.1223$ );  $GOOF = 1.0$ ;  $R$ -factor 0.0524]. The predictive analysis for bioavailability criteria has been performed for compound **1** and N-(4-methoxyphenyl)phthalamic acid as well. We have found that the reacting phthalamic acid can be considered as a candidate molecule for further bioscreening whereas compound **1** does not show acceptable physicochemical parameters to be considered as a potentially bioactive molecule.

**Keywords:** pentaphenylantimony, N-(4-methoxyphenyl)phthalamic acid, tetraphenylantimony carboxylate, molecular structure, X-ray diffraction analysis, predictor analysis

**For citation:** Sharutin V.V., Sharutina O.K., Zubareva V.V., Chernyshova A.V., Dotsenko V.V. Interaction of pentaphenylantimony with N-(4-methoxyphenyl)phthalamic acid. *Bulletin of the South Ural State University. Ser. Chem.* 2024;16(3):97–104. (In Russ.) DOI: 10.14529/chem240303

## Введение

Известно, что эффективным способом получения соединений сурьмы Ar<sub>4</sub>SbX является метод, основанный на реакции деарилрования пентаарилсурьмы кислотами HX [1–18]. Например, при взаимодействии пентаарилсурьмы с карбоновой кислотой единственным продуктом является карбоксилат тетраарилсурьмы, выделяемый из реакционной смеси с выходом до 98 % [1]. Карбоксилаты тетраарилсурьмы привлекают внимание из-за своей биологической активности [19–21]. С теоретической точки зрения, интерес вызывает строение, поскольку известны три типа координации карбоксилатного лиганда на атом сурьмы: монодентатный, когда лиганд образует только одну связь Sb–O, анизобидентатный – в случае внутримолекулярной координации карбонильного атома кислорода при условии, что расстояние Sb···O существенно меньше суммы ван-дер-ваальсовых радиусов атомов, и бидентатный – с практически двумя равными расстояниями Sb–O [22]. Установлено, что способ координации зависит от заместителей, как в органическом радикале кислоты, так и в арильном лиганде при атоме сурьмы. Сообщалось о реакциях полифункциональных карбоновых кислот, таких как 2-[(6-аминопиримидин-4(3*H*)-он-2-ил)сульфанил]уксусная, 2-[(6-гидрокси-5-нитропириимидин-4(3*H*)-он-2-ил)сульфанил]уксусная кислоты, в результате которых имело место образование карбоксилатов тетраарилсурьмы с высококоординированным атомом металла [23, 24].

В продолжение исследований взаимодействия пентафенилсурьмы с карбоновыми кислотами, содержащими несколько координационных центров, нами в качестве исходного реагента в реакции деарилрования пентафенилсурьмы была выбрана N-(4-метоксифенил)фталамовая кислота. В литературе описаны некоторые комплексные соединения на основе фталамовых кислот [25], однако среди производных сурьмы продукты комплексообразования известны только с солями Sb(III) [26].

## Экспериментальная часть

Исходная N-(4-метоксифенил)фталамовая кислота (4-MeOPhtCO<sub>2</sub>H) получена реакцией фталового ангидрида с 4-метоксианилином в инертном растворителе по известной методике [27].

### Синтез сольвата N-(4-метоксифенил)фталамата тетрафенилсурьмы с бензолом (**1**).

Смесь 0,17 г (0,34 ммоль) пентафенилсурьмы и 0,090 г (0,34 ммоль) N-(4-метоксифенил)фталамовой кислоты в 5 мл бензола нагревали в запаянной ампуле 1 ч, охлаждали до комнатной температуры. Ампулу вскрывали, раствор концентрировали. Образовались бесцветные

кристаллы **1**, выход 86 %, т. пл. 102 °С. Для Ph<sub>4</sub>SbOC(O)C<sub>6</sub>H<sub>4</sub>[2-C(O)NHC<sub>6</sub>H<sub>4</sub>(OMe-4)]·1/2PhH (**1**) найдено (%): С 68,65; Н 4,90. Для C<sub>87</sub>H<sub>73</sub>N<sub>2</sub>O<sub>8</sub>Sb<sub>2</sub> рассчитано (%): С 68,77; Н 4,81.

ИК-спектр ( $\nu$ , см<sup>-1</sup>): 3250, 3061, 2833, 1662, 1618, 1592, 1511, 1434, 1359, 1346, 1239, 1175, 1149, 1065, 1037, 997, 824, 730, 690, 519, 469, 447.

ИК-спектры соединения **1** записывали на ИК-спектрометре Shimadzu IRAffinity-1S в таблетках KBr в области 4000–400 см<sup>-1</sup>.

РСА кристалла **1** проведен на дифрактометре D8 Quest фирмы Bruker (MoK $\alpha$ -излучение,  $\lambda = 0,71073$  Å, графитовый монохроматор) при 296(2) К. Сбор, редактирование данных и уточнение параметров элементарной ячейки, а также учет поглощения проведены по программам SMART и SAINT-Plus [28]. Все расчеты по определению и уточнению структуры выполнены по программам SHELXL/PC [29] и OLEX2 [30]. Структура определена прямым методом и уточнена методом наименьших квадратов в анизотропном приближении для неводородных атомов. Положение атомов водорода уточняли по модели наездника ( $U_{\text{изо}}(\text{H}) = 1,2U_{\text{экр}}(\text{C})$ ). Полные таблицы координат атомов, длин связей и валентных углов депонированы в Кембриджском банке структурных данных (№ 2331049; deposit@ccdc.cam.ac.uk; http://www.ccdc.cam.ac.uk). Основные кристаллографические данные и результаты уточнения структуры **1** приведены в табл. 1, длины связей и валентные углы – в табл. 2.

Таблица 1  
Кристаллографические данные, параметры эксперимента и уточнения структуры **1**

Параметр	<b>1</b>
Стехиометрическая формула	C <sub>87</sub> H <sub>73</sub> N <sub>2</sub> O <sub>8</sub> Sb <sub>2</sub>
<i>M</i>	1517,99
Сингония	Моноклинная
Пространственная группа	<i>C2/c</i>
<i>a</i> , Å	40,68(2),
<i>b</i> , Å	10,492(5),
<i>c</i> , Å	36,395(17)
$\beta$ , град.	100,30(2)
<i>V</i> , Å <sup>3</sup>	15283(13)
<i>Z</i>	8
$\rho_{\text{выч}}$ , г/см <sup>3</sup>	1,218
$\mu$ , мм <sup>-1</sup>	0,758
<i>F</i> (000)	5696,0
Размер кристалла, мм	0,34 × 0,13 × 0,13
Диапазон сбора данных по 2 $\theta$ , град.	5,68–54,3
Диапазон индексов	-48 ≤ <i>h</i> ≤ 52, -13 ≤ <i>k</i> ≤ 13, -46 ≤ <i>l</i> ≤ 46
Число измеренных рефлексов	203363
Число независимых рефлексов	16863
<i>R</i> <sub>int</sub>	0,1223
GOOF	1,075
Число параметров	813
<i>R</i> -факторы по <i>I</i> > 2 $\sigma$ ( <i>I</i> )	<i>R</i> <sub>1</sub> = 0,0688, <i>wR</i> <sub>2</sub> = 0,1793
<i>R</i> -факторы по всем рефлексам	<i>R</i> <sub>1</sub> = 0,1397, <i>wR</i> <sub>2</sub> = 0,2136
Остаточная электронная плотность (max/min), e/Å <sup>3</sup>	1,31/-0,57

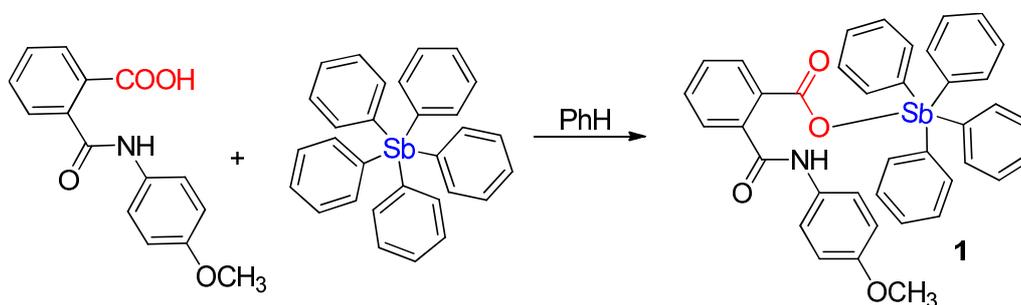
Таблица 2  
Длины связей и валентные углы в структуре **1**

Связь	<i>d</i> , Å	Угол	$\omega$ , град.
Sb1–O1	2,235(4)	C11–Sb1–C31	114,3(3)
Sb1–C11	2,103(7)	C11–Sb1–C21	126,0(3)
Sb1–C31	2,123(7)	C1–Sb1–O1	173,7(2)
Sb1–C1	2,184(7)	C21–Sb1–C31	117,3(3)
Sb1–C21	2,113(7)	C31–Sb1–O1	81,4(2)
Sb2–O5	2,257(4)	C21–Sb1–C1	96,3(3)

Связь	$d, \text{Å}$	Угол	$\omega, \text{град.}$
Sb2–C71	2,106(6)	C71–Sb2–C51	112,7(2)
Sb2–C51	2,114(6)	C71–Sb2–C61	125,8(2)
Sb2–C61	2,111(6)	C61–Sb2–C51	118,6(3)
Sb2–C41	2,155(6)	C41–Sb2–O5	179,0(2)
O1–C117	1,286(7)	C117–O1–Sb1	123,9(4)
N1–C118	1,341(7)	C118–N1–C121	126,4(5)
N1–C121	1,427(8)	C97–O5–Sb2	120,1(4)
O3–C118	1,224(7)	C98–N2–C101	127,9(5)
O2–C117	1,229(7)	O2–C117–C111	121,5(5)
O5–C97	1,288(7)	N1–C118–C112	115,7(5)
O6–C98	2,227(7)	O3–C118–N1	124,4(6)
O7–C98	1,215(8)	O3–C118–C112	119,4(6)
N2–C98	1,345(8)	C122–C121–N1	117,4(6)
N2–C98	1,345(8)	O4–C124–C125	115,1(7)

### Обсуждение результатов

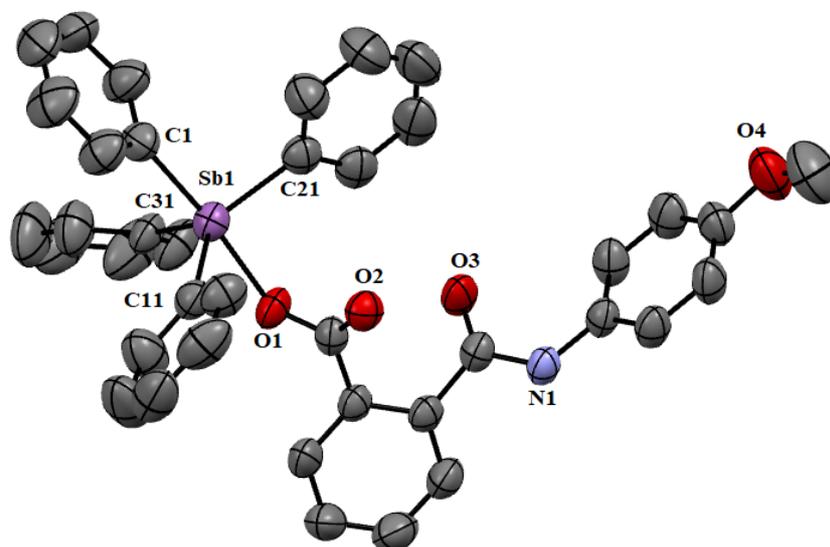
Известно, что *N*-(4-метоксифенил)фталамовая кислота имеет в своем составе несколько потенциальных координирующих центров, которыми являются атомы с неподеленными электронными парами (атомы кислорода и азота), способными вступать в дополнительные взаимодействия с атомом металла. Нами установлено, что реакция указанной кислоты с пентафенилсурьмой приводит к образованию с выходом 86 % *N*-(4-метоксифенил)фталамата тетрафенилсурьмы, кристаллизующегося из смеси бензол – октан (1:2 объемн.) в виде сольвата  $\text{Ph}_4\text{SbOC}(\text{O})\text{C}_6\text{H}_4[2\text{-C}(\text{O})\text{NHC}_6\text{H}_4(\text{OMe-4})] \cdot 1/2\text{PhH}$  (**1**). Кристаллы **1** хорошо растворимы в аренах, хлороформе, четыреххлористом углеороде и нерастворимы в алканах.



В ИК-спектре комплекса **1** присутствует характерная полоса поглощения средней интенсивности при  $3061 \text{ см}^{-1}$ , отвечающая валентным колебаниям связей  $\text{C}_{\text{Ar}}\text{-H}$ , и полоса валентных колебаний углеродного скелета ароматических фрагментов в области  $1590 \text{ см}^{-1}$  [31]. Интенсивная полоса поглощения при  $1662 \text{ см}^{-1}$ , соответствующая валентным колебаниям связи  $\text{C}=\text{O}$ , смещена в низкочастотную область, по сравнению с аналогичной полосой в ИК-спектре *N*-(4-метоксифенил)фталамовой кислоты ( $1706 \text{ см}^{-1}$ ). Колебания связей  $\text{Sb}-\text{C}$  характеризуются полосой при  $447 \text{ см}^{-1}$ .

Из данных РСА следует, что в ячейке присутствуют две кристаллографически независимых молекулы *a* и *b*, геометрические параметры которых различаются. Атомы Sb(1) и Sb(2) имеют координацию искаженной тригональной бипирамиды с фенильными заместителями в экваториальной плоскости и атомом кислорода карбоксильного лиганда в аксиальном положении (см. рисунок). Об искажении координации свидетельствуют значения валентных углов при атоме сурьмы, которые отклоняются от теоретических. Так, аксиальные углы  $\text{C}(1)\text{Sb}(1)\text{O}(1)$  и  $\text{C}(41)\text{Sb}(2)\text{O}(5)$  равны  $173,7(2)$  и  $179,0(2)^\circ$ . Суммы углов  $\text{CSb}(1)\text{C}$  и  $\text{CSb}(2)\text{C}$  в экваториальных плоскостях составляют  $357,6(3)$  и  $357,1(2)^\circ$ . Атомы Sb(1) и Sb(2) выходят из соответствующих экваториальных плоскостей в сторону аксиального атома углерода на  $0,189$  и  $0,205 \text{ Å}$ , что сопровождается увеличением углов  $\text{C}_{\text{акс.}}\text{SbC}_{\text{эkv.}}$  по сравнению с  $90^\circ$  ( $93,0(3)^\circ$ ,  $96,1(2)^\circ$ ,  $96,3(3)^\circ$  при ато-

ме Sb(1); 93,7(3)°, 95,8(2)°, 97,5(3)° при атоме Sb(2)) и уменьшением углов OSbC<sub>экв</sub> по сравнению с этим значением (81,4(2)°, 83,9(2)°, 88,7(2)°; 81,5(2)°, 84,5(2)°, 86,9(2)° в молекулах **a**, **b** соответственно).



Общий вид одной из двух молекул комплекса **1**  
(атомы водорода и молекулы сольватного бензола не показаны)

В молекулах **1a**, **b** имеет место удлинение аксиальных связей Sb–C (2,184(7); 2,155(6) Å) по сравнению с экваториальными (2,103(7)–2,123(7) Å; 2,106(6)–2,114(6) Å), что характерно для соединений типа Ar<sub>4</sub>SbX с пентакоординированным атомом металла. Связи Sb(1)–O(1) и Sb(2)–O(5) равны 2,235(4) и 2,257(4) Å. Карбоксилатный лиганд проявляет анизобидентатный характер связывания, поскольку расстояния между центральным атомом и карбонильным атомом кислорода (Sb(1)···O(2) 3,337(3) Å, Sb(2)···O(6) 3,259(3) Å) значительно короче суммы ван-дер-ваальсовых радиусов указанных атомов (3,58 Å [32]).

Расстояния C–O в карбоксильных группах (1,287(7) и 1,229(7) Å в **1a** и 1,288(7) и 1,227(7) Å в **1b**) свидетельствуют об отсутствии перераспределения электронной плотности, при этом значение длины связи C=O практически совпадает с таковой в карбонильной группе (1,224(7) Å в **1a** и 1,215(8) Å в **1b**). Валентные углы в карбоксильных группах OCO равны 124,0(6)° и 125,0(5)° в **1a** и **1b** соответственно.

В остатке кислоты (молекула **a**) угол между плоскостями бензольных колец [C(111)–C(116)] и [C(121)–C(166)] составляет 78,09°, плоскость карбоксильной группы [O(1)C(117)O(2)] образует с плоскостью [C(111)–C(116)] угол 49,73°, торсионный угол H(1)N(1)C(118)O(3) равен –178,4° (аналогичные параметры для молекулы **b**: 72,97°, 47,87°, 173,3°).

Молекулы **a** и **b** образуют димеры посредством водородных связей N(1)–H(1)···O(6) (расстояния H(1)···O(6) 2,15 Å, N(1)···O(6) 2,928(4) Å) и N(2)–H(2)···O(2) (расстояния H(2)···O(2) 2,05 Å, N(2)···O(2) 2,905(4) Å), которые за счет слабых взаимодействий C–H···π-типа формируют трехмерную структуру.

Отметим, что атомы кислорода метокси- и амидо-групп не участвуют в образовании внутри- и межмолекулярных связей.

Координационные соединения и, в частности, координационные соединения сурьмы(V) представляют определенный интерес с позиции исследования биологического действия [33]. В связи с этим нами был проведен расчет *in silico* ряда параметров ADMET и соответствия критериям пероральной биодоступности для соединения **1** и исходной *N*-(4-метоксифенил)фталамовой кислоты 4-MeOPhtCO<sub>2</sub>H. Анализ комплекса **1** и исходной *N*-(4-метоксифенил)фталамовой кислоты 4-MeOPhtCO<sub>2</sub>H на соответствие «правилу пяти» Липински (молекулярная масса (MW) ≤ 500, clogP ≤ 5,0 ; TPSA ≤ 140 Å<sup>2</sup>, число H-акцепторов ≤ 10,

H-доноров  $\leq 5$ ) [34–36] произведен с использованием программного пакета OSIRIS Property Explorer [37]. Были рассчитаны следующие параметры:  $clogP$  (логарифм коэффициента распределения между *n*-октанолом и водой  $\log(C_{\text{octanol}}/C_{\text{water}})$ ), растворимость ( $\log S$ ), площадь топологической полярной поверхности (Topological Polar Surface Area, TPSA), ряд токсикологических характеристик – рисков побочных эффектов (мутагенные, онкогенные, репродуктивные эффекты), параметр сходства с известными лекарственными препаратами (drug-likeness), а также общая оценка фармакологического потенциала (drug score). Полученные расчетные данные представлены в табл. 3. Как следует из приведенных в табл. 3 данных, комплексное соединение **1** не обладает привлекательными с позиций биоскрининга физико-химическими параметрами, и соответствует критериям Липински только по параметру TPSA. Для соединения прогнозируется чрезмерная липофильность ( $clogP \gg 5,0$ ), высокие риски токсических эффектов в сочетании с низкой растворимостью в воде (менее  $1 \cdot 10^{-6}$  моль/л), что по итогу реализуется в низких оценках drug-likeness и drug score. Напротив, исходный лиганд, *N*-(4-метоксифенил)фталамовая кислота, прогнозируемо обнаруживает более привлекательный профиль потенциальной биологической активности, и в целом соответствует критериям Липински, что указывает на перспективность дальнейшего скрининга в ряду фталамовых кислот. За счет формального соответствия критериям биодоступности и прогнозируемой низкой токсичности оценка drug score достаточна высока и составляет 0,45.

Таблица 3

Риски токсичности и физико-химические параметры соединения **1** и 4-MeOPhtCO<sub>2</sub>H, спрогнозированные с помощью программного сервиса OSIRIS Property Explorer

Соединение	Риск токсичности*				Физико-химические параметры					
	A	B	C	D	<i>clogP</i>	$\log S$	MW	TPSA	Drug likeness	Drug Score
<b>1</b>	+	±	±	±	7,83	-6,44	699	64,6	-7,57	0,03
4-MeOPhtCO <sub>2</sub> H	-	-	-	-	2,22	-3,16	271	75,6	-3,42	0,45

\*Знаком (-) обозначено прогнозируемое отсутствие токсичности, (±) – умеренный риск эффекта, (+) высокий риск токсического эффекта. А – мутагенность, В – канцерогенность, С – раздражающее действие, D – репродуктивные эффекты.

### Выводы

Установлено, что *N*-(4-метоксифенил)фталамовая кислота дефенилирует пентафенилсурьму в бензоле с образованием *N*-(4-метоксифенил)фталамата тетрафенилсурьмы (86 %), кристаллизующегося из смеси бензол – октан в виде сольвата  $\text{Ph}_4\text{SbOC}(\text{O})\text{C}_6\text{H}_4[2\text{-C}(\text{O})\text{NHC}_6\text{H}_4(\text{OMe}-4)] \cdot 1\frac{1}{2}\text{PhH}$  (**1**). В молекулах **1** атом сурьмы имеет координацию искаженной тригональной бипирамиды, карбоксильная группа проявляет анизобидентатные свойства, координируясь на центральный атом крайне асимметрично (отношения длин связей Sb–O и Sb…O равны 1,5 и 1,44 в двух типах кристаллографически независимых молекул). В кристалле имеют место межмолекулярные водородные связи N–H…O, формируемые имино-группой и карбонильным кислородом карбоксильной группы. Атомы кислорода метокси- и амидо-групп не участвуют в образовании внутри- и межмолекулярных связей. Расчет *in silico* соответствия критериям пероральной биодоступности для соединения **1** указывает на отсутствие перспектив для исследования данного комплексного соединения как потенциально биоактивной молекулы с приемлемыми параметрами биодоступности, тогда как исходная *N*-(4-метоксифенил)фталамовая кислота представляет интерес как потенциальный кандидат для скрининга.

### Список источников

1. Кочешков К.А., Сколдинов А.П., Землянский Н.Н. Методы элементоорганической химии. Сурьма, висмут. М.: Наука, 1976. 483 с.
2. Шарутин В.В., Поддельский А.И., Шарутина О.К. // Коорд. химия. 2020. Т. 46, № 10. С. 579. DOI: 10.31857/S0132344X20100011
3. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Пакушина А.П., Бельский В.К. // Журн. общ. химии. 1997. Т. 67, № 9. С. 1536. EDN: PFLFSA

4. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Тарасова Т.А. и др. // Журн. общ. химии. 1999. Т. 69, № 12. С. 1979.
5. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Платонова Т.П. и др. // Журн. общ. химии. 2000. Т. 70, № 11. С. 1932. EDN: BAWNYU
6. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Молокова О.В. и др. // Коорд. химия. 2002. Т. 28, № 8. С. 581. EDN: QEXAWC
7. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Молокова О.В. и др. // Журн. общ. химии. 2001. Т. 71, № 8. С. 1317.
8. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Осипов П.Е. и др. // Журн. общ. химии. 2000. Т. 70, № 6. С. 931.
9. Сопина Д.М. // Вестник ЮУрГУ. Сер. «Химия». 2022. Т. 14, № 1. С. 50. DOI: 10.14529/chem220106.
10. Ефремов А.Н., Шарутин В.В. // Вестник ЮУрГУ. Сер. «Химия». 2021. Т. 13, № 1. С. 47. DOI: 10.14529/chem210105
11. Шарутина О.К. // Вестник ЮУрГУ. Сер. «Химия». 2021. Т. 13, № 4. С. 63. DOI: 10.14529/chem210404
12. Сенчуринов В.С., Орленко Е.Д. // Вестник ЮУрГУ. Сер. «Химия». 2019. Т. 11, № 2. С. 66. DOI: 10.14529/chem190207
13. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Бондарь Е.А. и др. // Коорд. химия. 2002. Т. 28, № 5. С. 356. EDN: EOICYB
14. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Ефремов А.Н., Андреев П.В. // Журн. неорг. химии. 2017. Т. 62, № 10. С. 1330. DOI: 10.7868/S0044457X17100075
15. Шарутин В.В., Шарутина О.К. // Журн. неорганической химии. 2017. Т. 62, № 7. С. 925. DOI: 10.7868/S0044457X17070224
16. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Сенчуринов В.С., Сомов Н.В. // Журн. неорганической химии. 2016. Т. 61, № 8. С. 1017. DOI: 10.7868/S0044457X16080146
17. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Ефремов А.Н. // Журн. структ. химии. 2020. Т. 61, № 9. С. 1490. DOI: 10.26902/JSC\_id60682
18. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Ефремов А.Н. // Журн. неорганической химии. 2020. Т. 65, № 1. С. 49. DOI: 10.31857/S0044457X20010158
19. Шарутин В.В., Шарутина О.К., Ефремов А.Н., Артемьева Е.В. // Журн. неорганической химии. 2020. Т. 65, № 4. С. 482. DOI: 10.31857/S0044457X20040170
20. Artem'eva E.V., Duffin R.N., Munuganti S. et al. // J. Inorg. Biochem. 2022. V. 234. P. 111864. DOI: 10.1016/j.jinorgbio.2022.111864
21. Artem'eva E.V., Efremov A.N., Sharutina O.K. et al. // Polyhedron. 2022. V. 213. P. 115627. DOI: 10.1016/j.poly.2021.115627
22. Cambridge Crystallographic Database. Release 2023. Cambridge.
23. Губанова Ю.О., Шарутин В.В., Шарутина О.К. и др. // Журн. общ. химии. 2020. Т. 90, № 9. С. 1407. DOI: 10.31857/S0044460X20090127
24. Губанова Ю.О., Шарутина О.К., Ким Д.Г. и др. // Вестник ЮУрГУ. Серия «Химия». 2019. Т. 11, № 4. С. 49. DOI: 10.14529/chem190406
25. Чернышова А.В., Николаев А.А., Колоколов Ф.А., Доценко В.В., Аксенов Н.А., Аксенова И.В. // Журн. общ. химии. 2021. Т. 91, № 6. С. 950. DOI: 10.31857/S0044460X21060123
26. Chourasia S., Chauhan H.P.S. // Ind. J. Chem. 1996. V. 35A. P. 903. Avail. URL: <https://nopr.niscares.in/bitstream/123456789/41458/1/IJCA%2035A%2810%29%20903-905.pdf>
27. Perry C.J., Parveen Z. // J. Chem. Soc. Perkin Trans. 2. 2001. P. 512. DOI: 10.1039/B008399M
28. Bruker. SMART and SAINT-Plus. Versions 5.0. Data Collection and processing software for the SMART system. Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, USA, 1998.
29. Bruker. SHELXTL/PC. Versions 5.10. An integrated system for solving, refining and displaying crystal structures from diffraction data. Bruker AXS Inc., Madison, Wisconsin, USA, 1998.
30. Dolomanov O.V., Bourhis L.J., Gildea R.J. et al. // J. Appl. Cryst. 2009. V. 42. P. 339. DOI: 10.1107/S0021889808042726
31. Тарасевич Б.Н. ИК-спектры основных классов органических соединений. М.: МГУ, 2012. 54 с.

32. Mantina M., Chamberlin A.C., Valero R. et al. // J. Phys. Chem. A. 2009. V. 113, No. 19. P. 5806. DOI: 10.1021/jp8111556
33. Frezard F., Demicheli C., Kato K.C., Reis P.G., Lizarazo-Jaimes E.H. // Rev. Inorg. Chem. 2013. V. 33, No. 1. P. 1. DOI: 10.1515/revic-2012-0006
34. Lipinski C.A., Lombardo F., Dominy B.W., Feeney P.J. // Adv. Drug. Delivery Rev. 1997. V. 23, No. 1–3. P. 4. DOI: 10.1016/S0169-409X(96)00423-1
35. Lipinski C.A. // Drug Discov. Today: Technologies. 2004. V. 1, No. 4. P. 337. DOI: 10.1016/j.ddtec.2004.11.007
36. Lipinski C.A., Lombardo F., Dominy B.W., Feeney P.J. // Adv. Drug. Delivery Rev. 2012. V. 64, Suppl. P. 4. DOI: 10.1016/j.addr.2012.09.019
37. Sander T. OSIRIS Property Explorer. Available URL: <http://www.organic-chemistry.org/prog/peo/>. Idorsia Pharmaceuticals Ltd, Switzerland.

**Шарутин Владимир Викторович** – доктор химических наук, профессор, главный научный сотрудник, Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия. E-mail: sharutin50@mail.ru

**Шарутина Ольга Константиновна** – доктор химических наук, профессор, заведующий кафедрой теоретической и прикладной химии, Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия. E-mail: sharutinaok@mail.ru

**Зубарева Валерия Витальевна** – студент кафедры теоретической и прикладной химии, Южно-Уральский государственный университет, Челябинск, Россия. E-mail: valerochka.zubareva@bk.ru

**Чернышова Анна Валерьевна** – аспирант кафедры общей, неорганической химии и информационно-вычислительных технологий в химии, Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия. E-mail: chernyshova\_anna\_chem@mail.ru

**Доценко Виктор Викторович** – доктор химических наук, доцент, заведующий кафедрой органической химии и технологий, Кубанский государственный университет, Краснодар, Россия. E-mail: victor\_dotsenko\_@mail.ru

*Статья поступила в редакцию 20 марта 2024 г.*  
*The article was submitted 20 March 2024.*