

## ВЗАИМОСВЯЗЬ БИОЛОГИЧЕСКОЙ АКТИВНОСТИ И РАСЧЕТНЫХ ПАРАМЕТРОВ НИТРИЛСИЛАНОВ И НИТРИЛСИЛОКСАНОВ

Э.М. Мовсумзаде, Г.Ю. Колчина, С.Н. Гусейнова, Э.Х. Каримов,  
А.Ю. Бахтина, М.Е. Логинова, А.В. Колчин

Эльдар Мирсамедович Мовсумзаде (ORCID 0000-0002-7267-1351)

Кафедра общей, аналитической и прикладной химии, Уфимский государственный нефтяной технический университет, ул. Космонавтов, 1, Уфа, Республика Башкортостан, Российская Федерация, 450044  
Российский государственный университет им. А.Н. Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство), ул. Малая Калужская, 1, Москва, Российская Федерация, 117997  
E-mail: eldarimm@yahoo.com

Галина Юрьевна Колчина (ORCID 0000-0003-2808-4827)\*

Кафедра химии и химической технологии, Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, пр. Ленина, 49, Стерлитамак, Республика Башкортостан, Российская Федерация, 453100  
E-mail: kolchina.GYu@mail.ru\*

Саадет Назим кызы Гусейнова (ORCID 0009-0000-7990-5491), Анастасия Юрьевна Бахтина (ORCID 0009-0007-0736-3823), Марианна Евгеньевна Логинова (ORCID 0000-0001-7077-8705)

Уфимский государственный нефтяной технический университет, ул. Космонавтов, 1, Уфа, Республика Башкортостан, Российская Федерация, 450044  
E-mail: guseynovas@yandex.ru, anastasyaglance@yandex.ru, ufamel@yandex.ru

Эдуард Хасанович Каримов (ORCID 0000-0002-4224-4586)

Кафедра общей химической технологии, Институт химической технологии и инжиниринга, Уфимский государственный нефтяной технический университет, пр. Октября, 2, Стерлитамак, Республика Башкортостан, 453118  
E-mail: khasanich@mail.ru

Андрей Владимирович Колчин (ORCID 0009-0007-1583-017X)

ООО «Газпром нефтехим Салават», ул. Молодогвардейская, 30, Салават, Республика Башкортостан, Российская Федерация, 453256  
E-mail: kolchin.av@mail.ru

*В процессах добычи, транспортировки, и переработки нефть и нефтепродукты часто подвергаются микробиологической коррозии, являющейся следствием жизнедеятельности микроорганизмов и грибов. В работе изучены геометрические, электронные и энергетические параметры ранее синтезированных кремнийорганических нитрилов и проявление их антимикробной активности, а также приведено установление некоторых закономерностей их физико-химических свойств. Выявлено, что гетероатомные соединения, содержащие в своем составе атомы кремния, обладают высокой и эффективной фунгицидной активностью, подавляя рост грибов и растений, а также минимальной токсичностью. Установлено, что действие исследуемых соединений может сохраняться до нескольких недель в отличие от ныне используемых препаратов биологического действия при хранении и транспортировке нефтяных масел. Приведены значения физико-химических параметров ряда нитрилсиланов и нитрилсилоксанов, рассчитанные методом функционала плотности DFT с функционалом B3LYP/6-31G(d,p). Изученные соединения обладают высокой реакционной способностью, и в данной работе экспериментально установлены биологические активности ряда кремнийорганических нитрилов. На основании полученных расчетных и экспериментальных данных установлена взаимосвязь энергий граничных молекулярных орбиталей (в зависимости от электронного строения) и проявляемых антимикробных свойств представленных нитрилсиланов и нитрилсилоксанов. Показано, что ряд изученных кремнийорганических соединений, особенно нитрилси-*

*локсаны, превосходят по проявляемым бактерицидным активностям биоцид пентахлорфенолят натрия. При составлении 3D-графика функции среднее отклонение результатов математических расчетов от результатов биологического эксперимента составило максимум 23%. Установлено, что наиболее эффективные из приведенных соединений ряда кремнийорганических нитрилсиланов и нитрилсилоксанов могут иметь широкое применение в областях промышленности и быть рекомендованы в качестве биоцидных присадок к смазочным маслам и другим смазочным и смазочно-охлаждающим жидкостям и материалам.*

**Ключевые слова:** кремнийорганические нитрилы, нитрилсиланы, нитрилсилоксаны, антимикробные свойства, биологическая активность, DFT-расчеты

## INTERRELATION OF BIOLOGICAL ACTIVITY AND CALCULATED PARAMETERS OF NITRILSILANES AND NITRILSILOXANES

E.M. Movsumzade, G.Yu. Kolchina, S.N. Guseynova, E.Kh. Karimov, A.Yu. Bakhtina, M.E. Loginova, A.V. Kolchin

Eldar M. Movsumzade (ORCID 0000-0002-7267-1351)

Department of General, Analytical and Applied Chemistry, Ufa State Petroleum Technical University, Kosmonavtov st. 1, Republic of Bashkortostan, 450044, Russia  
Kosygin Russian State University (Technology. Design. Art), Malaya Kaluzhskaya st., 1, Moscow, 117997, Russia  
E-mail: eldarmm@yahoo.ru

Galina Yu. Kolchina (ORCID 0000-0003-2808-4827)\*

Department of Chemistry and Chemical Technology, Sterlitamak Branch of the Bashkir State University, Lenin ave., 49, Republic of Bashkortostan, 453100, Russia  
E-mail: kolchina.GYu@mail.ru\*

Saadet N. Guseynova (ORCID 0009-0000-7990-5491), Anastasia Yu. Bakhtina (ORCID 0009-0007-0736-3823), Marianna E. Loginova (ORCID 0000-0001-7077-8705)

Ufa State Petroleum Technological University, Kosmonavtov st., 1, Ufa, Republic of Bashkortostan, 450044, Russia  
E-mail: guseynovas@yandex.ru, anastasyaglance@yandex.ru, ufamel@yandex.ru

Eduard Kh. Karimov (ORCID 0000-0002-4224-4586)

Department of General Chemical Technology, Ufa State Petroleum Technological University, October ave., 2, Sterlitamak, Republic of Bashkortostan, 453118, Russia  
E-mail: khasanich@mail.ru

Andrey V. Kolchin (ORCID 0009-0007-1583-017X)

LLC "Gazprom neftekhim Salavat", Molodogvardeiskaya st., 30, Salavat, Republic of Bashkortostan, 453256, Russia  
E-mail: kolchin.av@mail.ru

*The processes of oil production, transport, refining are time-bound, which is fraught with sludge and storage, which is the cause of microbiological corrosion. The geometric, electronic and energy parameters of previously synthesized organosilicon nitriles and the manifestation of their antimicrobial activity are studied, and some regularities of their physicochemical properties are established. It was found that heteroatomic compounds containing silicon atoms in their composition have a high and effective fungicidal activity, inhibiting the growth of fungi and plants, as well as minimal toxicity. It has been established that the effect of the studied compounds can last up to several weeks, in contrast to the currently used drugs of biological action during the storage and transportation of petroleum oils. The results of the physicochemical parameters of a number of nitrilsilanes and nitrilsiloxanes calculated by the DFT method with the B3LYP/6-31G(d,p) functional are presented. The studied compounds are highly reactive, and in this work the biological activities of a number of organosilicon nitriles have been experimentally established. Based on the*

*calculated and experimental data obtained, the relationship between the energies of the boundary molecular orbitals (depending on the electronic structure) and the antimicrobial properties of the presented nitrile silanes and nitrile siloxanes were established. It has been shown that a number of studied organosilicon compounds, especially nitrile siloxanes, are superior in bactericidal activity to the biocide sodium pentachlorophenolate. When compiling a 3D function graph, the average deviation of the results of mathematical calculations from the results of a biological experiment was a maximum of 23%. It has been established that the most effective of the given compounds of a number of organosilicon nitrile silanes and nitrile siloxanes can be widely used in industry and can be recommended as biocidal additives for lubricating oils and other lubricating and cutting fluids and materials.*

**Key words:** organosilicon nitriles, nitrilesilanes, nitrilesiloxanes, antimicrobial properties, biological activity, DFT-calculations

**Для цитирования:**

Мовсумзаде Э.М., Колчина Г.Ю., Гусейнова С.Н., Каримов Э.Х., Бахтина А.Ю., Логинова М.Е., Колчин А.В. Взаимосвязь биологической активности и расчетных параметров нитрилсиланов и нитрилсилоксанов. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2023. Т. 66. Вып. 5. С. 120–127. DOI: 10.6060/ivkkt.20236605.6749.

**For citation:**

Movsumzade E.M., Kolchina G.Yu., Guseynova S.N., Karimov E.Kh., Bakhtina A.Yu., Loginova M.E., Kolchin A.V. Interrelation of biological activity and calculated parameters of nitrilsilanes and nitrilsiloxanes. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2023. V. 66. N 5. P. 120–127. DOI: 10.6060/ivkkt.20236605.6749.

## ВВЕДЕНИЕ

Развитие микроорганизмов в водно-топливных системах приводит к ухудшению физико-химических и эксплуатационных свойств топлив вследствие изменения их углеводородного состава, накопления микробных слизей и осадков, образующих стойкие эмульсии [1-3]. Микроорганизмы, непосредственно потребляя компоненты нефтепродуктов в качестве единственного источника энергии, или воздействуя на них продуктами метаболизма, изменяют их состав, что приводит к ухудшению эксплуатационных и санитарно-гигиенических свойств этих продуктов. Для предотвращения этого процесса используются антимикробные присадки (биоциды) – соединения различных классов, введение которых в состав нефтепродуктов, масел, смазочно-охлаждающих жидкостей может улучшить их функциональные свойства и предохранить от повреждающего влияния микроорганизмов [4-6].

Одной из важных проблем органической химии является поиск соединений, обладающих высокой фунгицидной активностью и минимальной токсичностью. Известно, что введение определенных фармакофорных функциональных групп, в частности нитрильных, в молекулы органических соединений усиливает их биологическую активность. Одним из важнейших параметров, определяющих химическую и биологическую активность органических нитрилов, является число нитрильных групп и их взаимное пространственное распо-

ложение и влияние [7]. Применение компьютерных программ для расчетов основных геометрических, электронных и энергетических параметров молекул позволяет предсказать биологическую активность исследуемых соединений [8]. Поэтому целью данной работы является исследование строения и изучение свойств ряда ранее синтезированных кремнийорганических нитрилов с использованием методов вычислительной химии, а также проведение экспериментальных испытаний фунгицидной и бактерицидной активностей исследуемых нитрилсиланов и нитрилсилоксанов.

## МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

В работе описаны результаты исследований по изучению ряда элементоорганических нитрилов, природа функциональных групп которых позволила потенциально предположить наличие бактерицидных и фунгицидных свойств.

Исследуемые соединения ряда нитрилсиланов и нитрилсилоксанов (**I-VII**) синтезированы по методикам, описанным в работах ранее [9-11]:  $\text{ClSi}(\text{CH}_2\text{CN})_3$  (**I**),  $\text{ClSi}(\text{C}(\text{CN})=\text{CH}_2)_3$  (**II**),  $\text{Cl}_2\text{Si}(\text{CH}_2\text{CN})_2$  (**III**),  $\text{Cl}_2\text{Si}(\text{C}(\text{CN})=\text{CH}_2)_2$  (**IV**),  $\text{HO-Si}(\text{CH}_2\text{CN})_3$  (**V**),  $(\text{NCCH}_2)_3\text{SiOSi}(\text{CH}_2\text{CN})_3$  (**VI**),  $(\text{C}(\text{CN})=\text{CH}_2)_3\text{SiOSi}(\text{C}(\text{CN})=\text{CH}_2)_3$  (**VII**) (рис. 1).

Состав и строение ранее синтезированных нитрилсиланов и нитрилсилоксанов были доказаны методом ИК-спектроскопии. ИК спектры характеризовались следующими полосами поглощения ( $\text{cm}^{-1}$ ): 3005-2995 ( $=\text{CH}_2$ ), 2260-2205 (C), 1630-1590 (C=C), 1250-1240 (Si-C), 1100-1070 (Si-O).

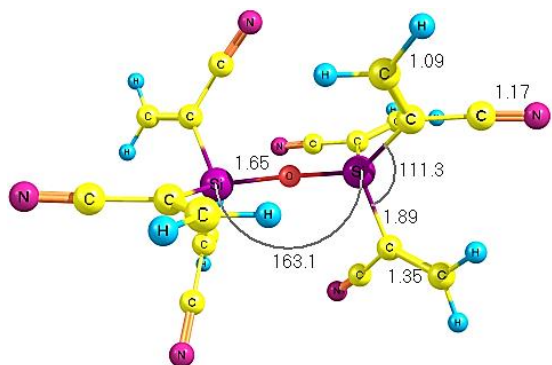


Рис. 1. Оптимизированная структура нитрилсилоксана  $(C(CN)=CH_2)_3SiOSi(C(CN)=CH_2)_3$  (VII)

Fig. 1. Optimized nitrilsiloxane structure  $(C(CN)=CH_2)_3SiOSi(C(CN)=CH_2)_3$  (VII)

Антимикробные свойства вышепредставленных кремнийорганических соединений исследовали методом лунки на агаровой среде. Для испытаний использовали широко распространенные в нефтепродуктах и являющиеся их агрессивными разрушителями чистые культуры следующих видов плесневых грибов и бактерий:

1) Грибы: *Aspergillus niger*, *Cladosporium resinae*, *Penicillium chrysogenum*, *Chaebomium globosum*, *Trichodermaviride*.

2) Бактерии: *Mycobacterium lacticolium*, *Pseudomonas aeruginosa*.

3) Дрожжевые: *Candida tropicalis*.

Приведенные микроорганизмы выращивали при температуре 28 °С в специально установленном термостате с 90-100% влажностью (грибы в течение 7 сут, бактерии-2-3 сут). В качестве питательной среды для бактерий использовали мясопептонный агар (МПА), для грибов – сусло-агар (СА) [12].

Расчет электронной структуры, геометрических и энергетических параметров исследуемых молекул проводили с применением метода функционала плотности DFT с функционалом B3LYP в комбинации с базисным набором 6-31G(d,p) в программе PC GAMESS (FireFly) [13]. Выбранный метод обеспечивает достаточную точность расчета основных параметров исследуемых кремнийорганических соединений.

#### РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

При исследовании антимикробных свойств синтезированных соединений применяли лунки на агаровой среде с использованием суспензии разных культур микроорганизмов. Считается, что образцы, не пораженные микроорганизмами, практически не подвергаются микробиологической коррозии. Эффективность антимикробного действия исследуемых соединений в масле М-10 оценивалась по величине диаметра зоны угнетения роста

грибов и бактерий вокруг лунки с присадкой и без нее: чем она больше, тем эффективнее антимикробное действие [14]. Само масло не обладает биостойкостью.

При проведении теоретических исследований рассчитаны энергии граничных молекулярных орбиталей оптимизированных кремнийорганических соединений. Результаты испытаний антимикробного действия и расчетов приведены в табл. 1, где представлены аналогичные показатели и для биоцида пентахлорфенолята натрия, используемого в настоящее время для хранения нефтяных масел.

Из данных табл. 1 видно, что почти все исследуемые нитрилсиланы и нитрилсилоксаны по бактерицидной и фунгицидной активностям превосходят применяемый в данное время биоцид пентахлорфенолят натрия, что, возможно, связано с наличием нескольких нитрильных групп в составе данных соединений. Таким образом, исходя из полученных данных, самые эффективные из них могут быть рекомендованы в качестве биоцидных присадок к смазочным маслам и другим смазочным и смазочно-охлаждающим жидкостям и материалам.

В результате проведенных квантово-химических исследований определены некоторые физико-химические параметры кремнийорганических молекул (табл. 2).

Анализ структурных и энергетических параметров позволяет предположительно оценить систему энергетических состояний, связанных с ядерной составляющей полной энергии молекулы, обсуждаемых кремнийорганических нитрилсиланов и нитрилсилоксанов и сравнить их возможности и проявляемые свойства [15-20].

Длина связи Si-C в молекуле силана равна 1,91 Å, а в нитрилах имеет диапазон значений 1,88-1,91 Å. Порядки связей Si-C уменьшаются, причем уменьшение зависит от природы нитрила. Значение межъядерного расстояния Si-Cl в кремнийорганическом нитриле IV самое высокое и составляет 2,07 Å. Таким образом, с увеличением количества атомов хлора у атома кремния связь Si-Cl незначительно сокращается и слабеет. А подтверждением этих фактов являются значения дипольных моментов, характеризующие асимметрию распределения положительных и отрицательных зарядов в электронейтральной системе. Расчеты показывают, что наибольшим дипольным моментом среди исследованных соединений обладают нитрилы I ( $2,24 \cdot 10^{-29}$  Кл·м) и II ( $1,81 \cdot 10^{-29}$  Кл·м) – эти молекулы содержат полярные электроноакцепторные цианогруппы, направленные в одну сторону.

Таблица 1

Сравнительные свойства антимикробной активности и энергетические параметры нитрилсиланов и нитрилсилоксанов в масле М-10

Table 1. Comparative properties of antimicrobial activity and energy parameters of nitrilesilanes and nitrilesiloxanes in M-10 oil

	Образцы	Энергия граничных молекулярных орбиталей		Концентрация, %	Зона подавления роста микроорганизмов, см		
		$E_{n+1}$ , эВ	$E_n$ , эВ		Смесь бактерий на среде МПА	Смесь грибов на среде СА	<i>Candida tropicalis</i> (дрожжевые) СА
1	I	-0,41	-8,69	1 0,5 0,25	2,0-2,0 1,6-1,8 0,8-1,2	2,0-2,2 1,8-2,0 1,0-1,2	1,6-1,8 1,4-1,6 1,0-1,2
2	II	-2,55	-8,41	1 0,5 0,25	2,4-2,6 2,0-2,2 1,6-1,8	2,8-2,8 2,4-2,6 1,6-1,8	2,0-2,2 1,4-1,6 1,4-1,4
3	III	-0,80	-8,81	1 0,5 0,25	2,2-2,4 1,6-1,8 1,0-1,2	2,0-2,2 1,8-2,0 1,2-1,4	2,2-2,4 1,8-2,0 1,6-1,8
4	IV	-2,56	-8,37	1 0,5 0,25	2,6-2,8 2,2-2,4 1,8-1,6	2,0-2,2 1,6-1,8 1,4-1,6	2,2-2,4 1,8-2,2 1,6-2,0
5	V	-0,22	-8,62	1 0,5 0,25	1,6-1,8 1,6-1,6 0,8-1,0	1,2-1,4 1,0-1,2 0,8-1,0	1,4-1,8 1,6-1,6 1,2-1,4
6	VI	-0,72	-8,64	1 0,5 0,25	2,8-3,2 2,0-2,2 1,6-1,8	2,4-2,6 2,2-2,4 1,8-2,2	2,2-2,4 1,8-2,0 1,6-1,8
7	VII	-2,53+	-8,07	1 0,5 0,25	3,2-3,6 2,2-2,4 1,8-2,0	2,6-2,8 2,2-2,4 1,8-2,0	2,4-2,6 2,2-2,4 2,0-2,2
8	Пентахлорфенолят натрия	-2,35	-5,18	1 0,5	1,3-1,5 0,7-1,0	1,4-1,6 0,8-1,2	1,4-1,4 0,7-0,9
9	Масло М-10(без биоцида)			—	+ +	+ +	+ +

Примечание: + – обильный рост микроорганизмов вокруг лунки в чашке Петри  
 Note: + - abundant growth of microorganisms around the well in the Petri dish

Таблица 2

Геометрические и электронные параметры нитрилсиланов и нитрилсилоксанов  
 Table 2. Geometric and electronic parameters of nitrilesilanes and nitrilesiloxanes

	Si—C		C—C		Si—Cl		Si—O		D, Кл·м
	$l$ , Å	$n$	$l$ , Å	$n$	$l$ , Å	$n$	$l$ , Å	$n$	
I	1,901	0,699	1,464	1,079	2,062	0,914			$2,24 \cdot 10^{-29}$
II	1,903	0,696	1,463	1,107	2,061	0,890			$1,81 \cdot 10^{-29}$
III	1,892	0,692	1,433	1,082	2,061	0,898			$9,49 \cdot 10^{-30}$
IV	1,884	0,689	1,432	1,105	2,073	0,885			$7,46 \cdot 10^{-30}$
V	1,912	0,673	1,464	1,090			1,651	0,685	$1,03 \cdot 10^{-29}$
VI	1,901	0,673	1,454	1,092			1,653	0,590	$1,75 \cdot 10^{-29}$
VII	1,893	0,668	1,433	1,115			1,652	0,583	$1,29 \cdot 10^{-29}$

Примечание: где  $l$  – значения межъядерных расстояний, Å;  $n$  – значения порядков связей, рассчитанные по Малликену; D – дипольный момент, Кл·м  
 Note: where  $l$  are the values of internuclear distances, Å;  $n$  are the values of bond orders calculated according to Mulliken; D – dipole moment, C·m

Исследуемая зависимость бактерицидной и фунгицидной активности  $z$  нитрилсиланов и нитрилсилоксанов представлена как нелинейная функция от рассчитанных значений граничных орбиталей по следующей формуле (1):

$$z = a \cdot x + b \cdot y + c \cdot x \cdot y \quad (1)$$

где  $z$  – биологическая активность (БА),  $x$  – энергия ВЗМО (табл. 1),  $y$  – энергия НСМО.

Значения  $z$ ,  $x$  и  $y$  для нитрилсиланов и нитрилсилоксанов представлены в табл. 3. Используя экспериментально и теоретически полученные данные, методом нелинейной регрессии определили коэффициенты в уравнении (1)  $a$ ,  $b$  и  $c$ . Уравнение приняло следующий вид (2):

$$z = -0,229600 x + 0,307300 y + 0,083500 x y \quad (2)$$

Учитывая, что приведенная функция имеет аналитический вид, ее можно использовать не только беря данные из таблицы, но и непрерывно по областям изменения  $x$  и  $y$  [21].

Таблица 3

Рассчитанные значения и экспериментальные результаты биологической активности нитрилсиланов и нитрилсилоксанов

Table 3. Calculated values and experimental results of the biological activity of nitrilesilanes and nitrilesiloxanes

Образцы	Экспер. Результаты (смесь бактерий)	Результаты расчетов	$\Delta$	$\Delta \cdot 100/\text{эксп}$
<b>I</b>	2,00	2,17	-0,17	-8,30
<b>II</b>	2,50	2,94	-0,44	-17,52
<b>III</b>	2,30	2,37	-0,07	-2,87
<b>IV</b>	2,70	2,92	-0,22	-8,30
<b>V</b>	1,70	2,07	-0,37	-21,71
<b>VI</b>	3,00	2,28	0,72	23,93
<b>VII</b>	3,40	2,78	0,62	18,21
Пентахлорфенолят натрия	1,40	1,48	-0,08	-5,93

Как видно из табл. 3, среднее отклонение теоретических расчетов от экспериментальных результатов составляет максимум 23%. Исходя из этого, построен 3D-график функции, изображенный на рис. 2.

## ЛИТЕРАТУРА

1. Крейн С.Э., Бессмертный К.И., Нетте И.Т., Гречушкина Н.Н. Влияние гриба *Cladosporium resinae* на некоторые свойства нефтяных топлив. *Приклад. биохимия и микробиол.* 1983. С. 143-145.

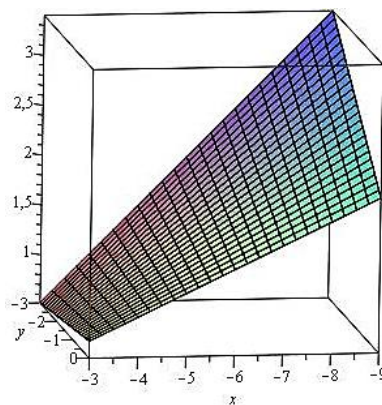


Рис. 2. Зависимость бактерицидной и фунгицидной активности  $z$  нитрилсиланов и нитрилсилоксанов от значений энергии граничных орбиталей, представленной 3D-графиком функции  $Z = a \cdot x + b \cdot y + c \cdot x \cdot y$

Fig. 2. Dependence of the bactericidal and fungicidal activity  $z$  of nitrile silanes and nitrile siloxanes on the energy values of frontier orbitals, represented by a 3D plot of the function  $Z = a \cdot x + b \cdot y + c \cdot x \cdot y$

## ВЫВОДЫ

Выявлено, что нитрилсиланы и силоксаны проявляют эффективную бактерицидную и фунгицидную активности, что в дальнейшем позволяет их использовать в качестве биоцидов при хранении и транспортировке нефти, газа и нефтегазопродуктов. Установлено, что с увеличением числа нитрильных групп биологическая активность ряда нитрилсиланов и нитрилсилоксанов в основном усиливается. Применение методов вычислительной химии и расчет основных параметров кремнийорганических систем позволяет выявить зависимость антимикробной активности ряда нитрилов, содержащих в своем составе атом кремния, от энергии граничных орбиталей. Среднее отклонение теоретических расчетов от результатов биологического эксперимента составляет максимум 23%. Таким образом, проведенные исследования показывают, что квантово-химические методы позволяют получить ценную информацию, необходимую для анализа химических свойств ряда соединений, содержащих атом кремния.

*Авторы заявляют об отсутствии конфликта интересов, требующего раскрытия в данной статье.*

*The authors declare the absence a conflict of interest warranting disclosure in this article.*

## REFERENCES

1. Krein S.E., Bessmertny K.I., Nette I.T., Grechushkina N.N. Influence of the fungus *Cladosporium resinae* on some properties of petroleum fuels. *Prikl. Biokhim. Mikrobiol.* 1983. P. 143-145 (in Russian).

- Хасанов И.И., Колчина Г.Ю., Логинова Е.А., Поletaeva О.Ю. Контроль и регистрация технологических параметров при добыче, транспорте и переработке углеводородов. М.: ОБРАКАДЕМНАУКА. 2019. 92 с.
- Поletaeva О.Ю., Kolchina G.Yu., Leontev A.Yu., Babayev E.R., Movsumzade E.M., Khasanov I.I. Geometric and electronic structure of heavy highly viscous oil components. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2019. Т. 62. Вып. 9. С. 40-45. DOI: 10.6060/ivkkt.20196209.6022
- Фарзалиев В.М., Стрик М., Мовсумзаде Э.М., Бабаев Э.Р., Мамедова П.С., Эйвазова И.М. Разработка новой композиции с эффективными биоцидными и маслоотесняющими свойствами. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2017. Т. 60. Вып. 1. С. 68-74. DOI: 10.6060/tcct.2017601.5470.
- Тухватуллин Р.Ф., Колчина Г.Ю., Мовсумзаде Э.М., Мамедова П.Ш., Бабаев Э.Р. Синтез и исследование геометрии и электронной плотности пространственно-затрудненных фенолов, используемых в качестве антиокислительных присадок к смазочным маслам. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2018. Т. 61. Вып. 4-5. С. 84-92. DOI: 10.6060/tcct.20186104-05.5659
- Колчина Г.Ю., Поletaeva О.Ю., Мовсумзаде Э.М., Бабаев Э.Р., Бахтина А.Ю., Мамедова П.Ш. Исследование влияния строения молекул многофункциональных присадок на эффективность их действия в нефтях и нефтепродуктах. *Башкир. хим. журн.* 2020. Т. 27. № 1. С. 27-31. DOI: 10.17122/bcj-2020-1-27-31.
- Коновалов А.И., Антипин И.С., Бурилов В.А., Маджидов Т.И., Курбангалиева А.Р., Немтарев А.В., Соловьева С.Е., Стойков И.И., Мамедов В.А., Захарова Л.Ю., Синяшин О.Г., Гаврилова Е.Л., Балова И.А., Васильев А.В., Зенкевич И.Г., Красавин М.Ю., Кузнецов М.А., Молчанов А.П., Новиков М.С., Николаев В.А. Современные направления органической химии в российских университетах. *Журн. орг. химии*. 2018. Т. 54. № 2. С. 157-371. DOI: 10.1134/S107042801802001X.
- Баскин И.И., Жохова Н.И., Палюлин В.А., Зефиоров А.Н., Зефиоров Н.С. Многоуровневый подход к прогнозированию свойств органических соединений в рамках методологии исследования количественных соотношений структура свойство/ структура активность. *Докл. Акад. наук*. 2009. Т. 427. № 3. С. 335–339. DOI: 10.1134/S0012500809070076.
- Мовсумзаде Э.М., Шихиев И.А., Мамедов М.Г. Синтез нитрилхлорсиланов. *Журн. орг. химии*. 1975. Т. 45. № 12. С. 2746.
- Мовсумзаде Э.М. Синтез и реакции хлорпроизводных нитрилов. *Усп. химии*. 1979. Т. 48. № 3. С. 520–532. DOI: 10.1070/RC1979v048n03ABEH002322.
- Мовсумзаде Э.М., Мамедов М.Г., Шихиев И.А. Синтез и превращения силосинитрилов. *Журн. орг. химии*. 1977. Т. 48. Вып. 3. С. 610-612.
- Мамедова П.Ш., Гусейнова С.Н., Дубинина А.Е., Бабаев Э.Р., Мовсумзаде Н.Ч., Кулиева Д.М., Мовсумзаде Э.М. Элементоорганические нитрилы в качестве антимикробных присадок для защиты нефти, газов и продуктов их переработки от биоповреждений в процессах хранения и транспортировки. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2015. Т. 58. Вып. 9. С. 52-55.
- Granovsky A.A. GAMESS. <http://classic.chem.msu.ru/gran/gamess/index.html>.
- ГОСТ 9.048-75-9.051-75 Единая система защиты от коррозии и старения масла и смазки. Москва. С. 45.
- Мальцев А.А. Молекулярная спектроскопия. М.: Изд-во Моск. уни-та. 1980. 272 с.
- Khasanov I.I., Kolchina G.Yu., Loginova E.A., Poletaeva O.Yu. Control and registration of technological parameters in the production, transport and processing of hydrocarbons. M.: OBRAKADEMNAUKA. 2019. 92 p. (in Russian).
- Poletaeva O.Yu., Kolchina G.Yu., Leontev A.Yu., Babayev E.R., Movsumzade E.M., Khasanov I.I. Geometric and electronic structure of heavy highly viscous oil components. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2019. V. 62. N 9. P. 40-45. DOI: 10.6060/ivkkt.20196209.6022.
- Farzaliyev V.M., Streek M., Movsumzade E.M., Babayev E.R., Mammadova P.S., Eyvazova I.M. Development of new composition with effective biocidal and oil-displacing properties. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2017. V. 60. N 1. P. 68-74. DOI: 10.6060/tcct.2017601.5470.
- Tukhvatullin R.F., Kolchina G.Yu., Movsumzade E.M., Mamedova P.Sh., Babayev E.R. Synthesis and study of the geometry and electron density of sterically hindered phenols used as antioxidant additives for lubricating oils. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2018. V. 61. N 4-5. P. 84-92 (in Russian). DOI: 10.6060/tcct.20186104-05.5659.
- Kolchina G.Yu., Poletaeva O.Yu., Movsumzade E.M., Babayev E.R., Bakhtina A.Yu., Mamedova P.Sh. Study of the influence of the molecular structure of multifunctional additives on the effectiveness of their action in oils and oil products. *Bashkir. Khim. Zhurn.* 2020. V. 27. N 1. P. 27-31 (in Russian). DOI: 10.17122/bcj-2020-1-27-31.
- Konovalev A.I., Antipin I.S., Burilov V.A., Madzhidov T.I., Kurbanalieva A.R., Nemtarev A.V., Solovieva S.E., Stoikov I.I., Mamedov V.A., Zakharova L.Y., Sinyashin O.G., Gavriloval E.L., Balova I.A., Vasilyev A.V., Zenkevich I.G., Krasavin M.Y., Kuznetsov M.A., Molchanov A.P., Novikov M.S., Nikolaev V.A. Modern trends of organic chemistry in russian universities. *Zhurn. Org. Khim.* 2018. V. 54. N 2. P. 157-371 (in Russian). DOI: 10.1134/S107042801802001X.
- Baskin I.I., Zhokhova N.I., Palyulin V.A., Zefirov A.N., Zefirov N.S. A multilevel approach to predicting the properties of organic compounds within the framework of the methodology for studying the quantitative relationships structure property / structure activity. *Dokl. Akad. Nauk*. 2009. V. 427. N 3. P. 335–339 (in Russian). DOI: 10.1134/S0012500809070076.
- Movsumzade E.M., Shikhiyev I.A., Mamedov M.G. Synthesis of nitrilechlorosilanes. *Zhurn. Org. Khim.* 1975. V. 45. N 12. P. 2746 (in Russian)
- Movsumzade E.M. Synthesis and reactions of chlorine derivatives of nitriles. *Usp. Khim.* 1979. V. 48. N 3. P. 520–532 (in Russian). DOI: 10.1070/RC1979v048n03ABEH002322.
- Movsumzade E.M., Mamedov M.G., Shikhiyev I.A. Synthesis and transformations of siloxynitriles. *Zhurn. Org. Khim.* 1977. V. 48. N 3. P. 610-612 (in Russian).
- Mamedova P. Sh., Huseynova S. N., Dubinina A. E., Babayev E. R., Movsumzade N. Ch., Kulieva D.M., Movsumzade E.M. Organoelement nitriles as antimicrobial additives for protecting oil, gases and their products from biodamage during storage and transportation. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2015. V. 58. N 9. P. 52-55 (in Russian).
- Granovsky A.A. GAMESS. <http://classic.chem.msu.ru/gran/gamess/index.html>.
- GOST 9.048-75-9.051-75 Unified system for protection against corrosion and aging of oil and lubricants. Moscow. 45 p. (in Russian).

16. Гусейнова С.Н., Мовсумзаде Э.М., Мовсум-заде Н.Ч., Сырлыбаева Р.Р. Расчет параметров реакций получения оксипроизводных кремнийорганических нитрилов. *Нефтеперераб. и нефтехимия*. 2014. № 11. С. 31-33.
17. Сырлыбаева Р.Р., Гусейнова С.Н., Мовсум-заде Н.Ч., Мовсумзаде Э.М. Сравнительные характеристики физико-химических и термодинамических параметров неорганических производных нитрилов. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2015. Т. 58. Вып. 4. С. 30-33.
18. Гусейнова С.Н., Бабаев Э.Р., Мовсум-заде Н.Ч., Сырлыбаева Р.Р., Сафиуллина И.И., Мовсумзаде Э.М. Комплексообразование солей переходных металлов с некоторыми кремнийорганическими нитрилами: термодинамика, механизм реакции и практические свойства. *SOCAR-Proceed*. 2015. № 3. С. 66-76. DOI: 10.5510/OGP20150300254.
19. Гусейнова С.Н., Гюльмалиев А.М., Мовсумзаде Э.М. Расчет термодинамических параметров реакций синтеза циклоди-, циклотри- и циклотетрадиметилсилоксанов. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2016. Т. 59. Вып. 11. С. 27-32. DOI: 10.6060/tcct.20165911.5354.
20. Мовсумзаде Э.М., Пахомов С.И., Поletaева О.Ю., Егоров М.П., Колчина Г.Ю. Анализ математических и компьютерно-цифровых методов как основы современной подготовки инженерных кадров. *Нефтегазохимия*. 2020. № 2. С. 55-60. DOI: 10.24411/2310-8266-2020-10211.
21. Джонсон К. Численные методы в химии. М.: Мир. 1983. 503 с.
15. Maltsev A.A. Molecular spectroscopy. M.: Izd-vo Mosk. Univ. 1980. 272 p. (in Russian).
16. Guseynova S.N., Movsumzade E.M., Movsum-zade N.Ch., Syrlybaeva R.R. Calculation of reaction parameters for obtaining oxy derivatives of organosilicon nitriles. *Neftepererab. Neftekhim*. 2014. N 11. P. 31-33 (in Russian).
17. Syrlybaeva R.R., Huseynova S.N., Movsumzade N.Ch., Movsumzade E.M. Comparative characteristics of physico-chemical and thermodynamic parameters of inorganic derivatives of nitriles. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2015. V. 58. N 4. P. 30-33 (in Russian).
18. Guseynova S.N., Babaev E.R., Movsum-zade N.Ch., Syrlybaeva R.R., Safiullina I.I., Movsumzade E.M. Complexation of transition metal salts with some organosilicon nitriles: thermodynamics, reaction mechanism and practical properties. *SOCAR-Proceed*. 2015. N 3. P. 66-76 (in Russian). DOI: 10.5510/OGP20150300254.
19. Guseynova S.N., Gylmaliev A.M., Movsumzade E.M. Calculation of thermodynamic parameters of reactions of synthesis of cyclodi-, cyclotri- and cyclotetradimethylsiloxanes. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2016. V. 59. N 11. P. 27-32 (in Russian). DOI: 10.6060/tcct.20165911.5354.
20. Movsumzade E.M., Pakhomov S.I., Poletaeva O.Yu., Egorov M.P., Kolchina G.Yu. Analysis of mathematical and computer-digital methods as the basis of modern training of engineering personnel. *Neftegazokhimiya*. 2020. N 2. P. 55-60 (in Russian). DOI: 10.24411/2310-8266-2020-10211.
21. Johnson K. Numerical methods in chemistry. M.: Mir. 1983. 503 p. (in Russian).

*Поступила в редакцию 18.10.2022*

*Принята к опубликованию 10.01.2023*

*Received 18.10.2022*

*Accepted 10.01.2023*