

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МАТЕМАТИЧЕСКОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ ДЛЯ ОЦЕНКИ АНТИОКИСЛИТЕЛЬНОЙ АКТИВНОСТИ S-, Se-СОДЕРЖАЩИХ ПРОСТРАНСТВЕННО-ЗАТРУДНЕННЫХ ФЕНОЛОВ

М.Е. Логинова, Г.Ю. Колчина, Э.Р. Бабаев, О.Х. Каримов, Э.М. Мовсумзаде

Марианна Евгеньевна Логинова (ORCID 0000-0001-7077-8705)*

Кафедра бурения нефтяных и газовых скважин, Уфимский государственный нефтяной технический университет, ул. Космонавтов 1, Уфа, Российская Федерация, 450064

E-mail: ufamel@yandex.ru*

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

Стерлитамакский филиал Уфимского университета науки и технологий, просп. Ленина, 49, Стерлитамак, Российская Федерация, 453103

E-mail: kolchina.gyu@mail.ru

Эльбей Расимович Бабаев (ORCID 0000-0001-7614-4797)

Институт химии присадок им. А.М. Кулиева НАН Азербайджана, ул. Диляры Алиевой, 227, Баку, Азербайджан, Az 1029

E-mail: elbeibabaev@yahoo.com

Олег Хасанович Каримов (ORCID 0000-0002-0383-4268)

МИРЭА – Российский технологический университет, просп. Вернадского, 78, стр. 4, Москва, Российская Федерация, 119454

E-mail: Karimov.oleg@gmail.com

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

Российский государственный университет им. А.Н. Косыгина (Технологии. Дизайн. Искусство), ул. Малая Калужская, 1, Москва, Российская Федерация, 117997

E-mail: eldarimm@yahoo.com

В работе применен регрессионный анализ для оценки антиокислительной активности синтезированных S- и Se-содержащих α -метилбензилбисфенолов в сравнении с промышленной антиокислительной присадкой 2,6-дитретбутил-4-метилфенол в аналогичных условиях. Экспериментальную антиокислительную эффективность рассчитывали по соотношению пиков хемолюминисцентного свечения в вазелиновом масле в концентрациях 0,025–1% при 200 °С. По результатам расчетов и экспериментальным данным построены численные зависимости влияния концентраций – x_1 (% масс.конц.), электрофильности x_2 на антиокислительную способность (Y) исследуемых присадок к смазочным маслам и смазочно-охлаждающим жидкостям в виде нелинейных уравнений. Проанализировано и смоделировано поведение исследуемых соединений с учетом влияния геометрических параметров молекул на исследуемое свойство в зависимости от массовой концентрации. По результатам исследований подтверждено, что введение метильной группы в п-положение бензольного кольца пространственно-затрудненного фенола приводит к увеличению антиокислительной эффективности. Результаты расчетов показывают более высокую эффективность применения данных присадок по сравнению с широко применяемой присадкой «Агидол-1». Полученные значения структурных параметров соединений, рассчитанные методом UB3LYP/6-311++G(d,p), согласуются с экспериментальными данными (с точностью 81%–98,7%). Эффективность пространственно-затрудненных фенолов обусловлена наличием объемных заместителей в о-положениях, оптимально экранирующих водород ОН-группы и, соответственно, малой активностью феноксильного радикала, образующегося в реакции с пероксидными радикалами из ингибитора. Представленные зависимости наглядно показывают, что Se-содержащие производные α -ме-

тилбензилфенола проявляют большую антиокислительную активность и являются эффективными ингибиторами смазочных масел и смазочно-охлаждающих жидкостей. Данные соединения имеют большее число активных центров и, следовательно, могут прерывать большее число цепей окисления, чем вещества, содержащие дисульфидный мостик.

Ключевые слова: пространственно-затрудненные фенолы, присадки, антиокислительная эффективность, моделирование, уравнения регрессии

USING MATHEMATICAL MODELING TO EVALUATE THE ANTIOXIDANT ACTIVITY OF S-, Se-CONTAINING SPATIALLY HINDERED PHENOLS

M.E. Loginova, G.Yu. Kolchina, E.R. Babaev, O.Kh. Karimov, E.M. Movsumzade

Marianna E. Loginova (ORCID 0000-0001-7077-8705)*

Department of Oil and Gas Well Drilling, Ufa State Petroleum Technical University, Kosmonavtov st., 1, Ufa, 450064, Russia

E-mail: ufamel@yandex.ru*

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

Sterlitamak Branch of Ufa University of Science and Technology, Lenina ave., 49, Sterlitamak, 453103, Russia

E-mail: kolchina.gyu@mail.ru

Elbey R. Babaev (ORCID 0000-0001-7614-4797)

A.M. Kuliyeu Institute of Additive Chemistry of the NAS of Azerbaijan, Dilyary Alievoy st., 227, Baku, Az 1029, Republic of Azerbaijan

E-mail: elbeibabaev@yahoo.com

Oleg Kh. Karimov (ORCID 0000-0002-0383-4268)

MIREA – Russian Technological University, Vernadskogo ave., 78, bld. 4, Moscow, 119454, Russia

E-mail: Karimov.oleg@gmail.com

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

Kosygin Russian State University (Technologies. Design. Art), Malaya Kaluzhskaya st., 1, Moscow, 117997, Russia

E-mail: eldarmm@yahoo.com

In this work, regression analysis was used to evaluate the antioxidant activity of the synthesized S- and Se-containing α -methylbenzylbisphenols in comparison with the industrial antioxidant additive 2,6-ditretbutyl-4-methylphenol under similar conditions. The experimental antioxidant efficiency was calculated from the ratio of the peaks of chemiluminescent glow in vaseline oil at concentrations of 0.025–1% at 200 °C. Based on the results of calculations and experimental data, numerical dependences of the influence of concentrations – x_1 (% wt.conc.), electrophilicity x_2 on the antioxidant capacity (Y) of the studied additives to lubricating oils and cutting fluids were constructed in the form of nonlinear equations. The behavior of the studied compounds is analyzed and modeled, taking into account the geometric parameters of the molecules for the property under study, depending on the mass concentration. According to the research results, it was confirmed that the introduction of a methyl group into the p-position of the benzene ring of hindered phenol leads to an increase in antioxidant efficiency. The numerical method shows the effectiveness of the use of these additives in comparison with the widely used additive "Agidol-1". The obtained values of the structural parameters of the compounds calculated by the UB3LYP/6-311++G(d,p) method agree with the experimental data (with an accuracy of 81%-98.7%). The effectiveness of sterically hindered phenols is due to the presence of bulky substituents in the o-positions, which optimally shield the hydrogen of the OH group and, accordingly, the low activity of the phenoxy radical

formed in the reaction with peroxide radicals from the inhibitor. The clearly presented dependences show that Se-containing derivatives of α -methylbenzylphenol exhibit greater antioxidant efficiency and are effective inhibitors of lubricating oils and cutting fluids due to the presence of a larger number of active sites in these molecules and, therefore, interrupting a greater number of oxidation chains than molecules with a disulfide bridge.

Key words: spatially hindered phenols, additives, antioxidant efficiency, modeling, regression equations

Для цитирования:

Логина М.Е., Колчина Г.Ю., Бабаев Э.Р., Каримов О.Х., Мовсумзаде Э.М. Использование математического моделирования для оценки антиокислительной активности S-, Se-содержащих пространственно-затрудненных фенолов. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2024. Т. 67. Вып. 1. С. 89–96. DOI: 10.6060/ivkkt.20246701.6821.

For citation:

Loginova M.E., Kolchina G.Yu., Babaev E.R., Karimov O.Kh., Movsumzade E.M. Using mathematical modeling to evaluate the antioxidant activity of S-, Se-containing spatially hindered phenols. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Tekhnol.]*. 2024. V. 67. N 1. P. 89–96. DOI: 10.6060/ivkkt.20246701.6821.

ВВЕДЕНИЕ

При работе в двигателях и механизмах смазочные масла находятся в контакте с воздухом при воздействии высоких температур в присутствии металлов. При таких условиях происходит окисление масла, что вызывает коррозию металлических деталей и образование углеродистых отложений, которые, в свою очередь, нарушают нормальную работу механизмов и ограничивают рабочий ресурс смазочных масел [1-6].

Процесс окисления смазочных масел предотвращают путем введения в их состав антиокислительных присадок - ингибиторов. Они действуют в двух направлениях: одни разрушают свободные радикалы, тем самым разрывая окислительную цепь, другие взаимодействуют с пероксидами, образующимися в процессе окисления [7-17]. Типичными антиокислителями, работающими по первому механизму, являются пространственно затрудненные фенолы [18-20]. Эффективность фенольных антиокислителей зависит от их строения: она возрастает, если алкильные группы замещаются две в *o*- и одна в *n*- положениях, и еще более усиливается, если *o*-заместителем являются третичные алкильные группы [21-22].

МЕТОДИКА ЭКСПЕРИМЕНТА

Для сравнения антиокислительной активности синтезированных S- и Se-содержащих α -метилбензилбисфенолов **2-8** (табл. 1) исследована промышленная антиокислительная присадка 2,6-дитретбутил-4-метил фенол **1** в аналогичных условиях. Антиокислительную эффективность синтезированных ранее соединений [21] рассчитывали по соотношению пиков хемотропного свечения в вазелиновом масле в концентрациях 0,025-

1% при 200 °C [21, 23]. На основании полученных данных определена относительная антиокислительная эффективность по формуле (1)

$$\Xi = \left(1 - \frac{J}{J_0}\right) \cdot 100\% \quad (1)$$

где J/J_0 – соотношение площадей пиков суммарной интенсивности хемотропного свечения за время опыта при ингибированном и неингибированном окислении масла. Результаты экспериментов представлены в табл. 1 [21, 24].

Представляет интерес рассмотрение длины связи ROH в гидроксильной группе соединений **1-8**, поскольку длина связи имеет корреляцию с прочностью связи DOH [22]. Ввиду наличия корреляции между прочностью связи пространственно-затрудненных фенолов и их антиокислительной активностью, согласно структурным данным, можно ожидать большей антиокислительной активности в реакции взаимодействия с пероксидными радикалами ROO• для соединений с большей ROH (табл. 2) [22, 25], где ROH – длина связи, qH, qO, qS – заряды на атомах, ω (эВ) – электрофильность молекулы.

Для дисульфидов R_{OH} увеличивается в ряду соединений **2-4** и снова уменьшается для соединения **5** в сульфидах. Следовательно, для сульфидов можно ожидать последовательное увеличение реакционной способности при взаимодействии с пероксидными радикалами ROO• в ряду соединений **2-4** и уменьшение – для соединения **5**. При рассмотрении селенидов видна аналогичная зависимость: R_{OH} примерно равны для соединений **6, 7** и уменьшаются при переходе к соединению **8**. Следовательно, для соединений **6** и **7** можно ожидать сопоставимую реакционную способность с пероксидными радикалами, а для соединения **8** она будет меньше [22, 25].

Таблица 1

Экспериментальные значения относительной антиокислительной эффективности S, Se-содержащих производных α -метилбензилфенола в вазелиновом масле по отношению пиков хемилюминисцентного свечения

Table 1. Experimental values of the relative antioxidant efficiency of S, Se-containing derivatives of α -methylbenzylphenol in vaseline oil relative to the peaks of chemiluminescent glow

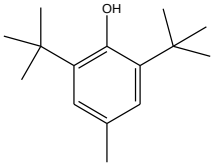
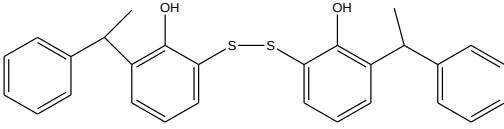
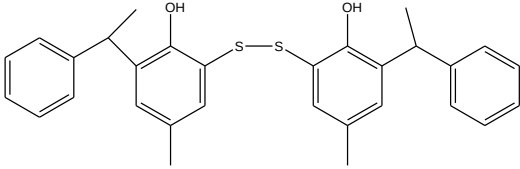
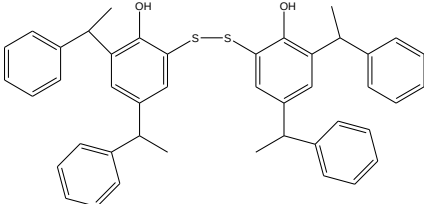
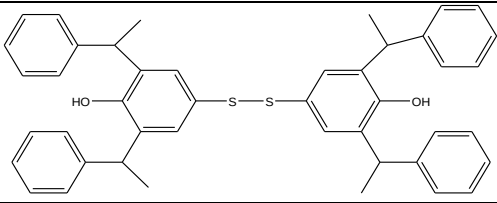
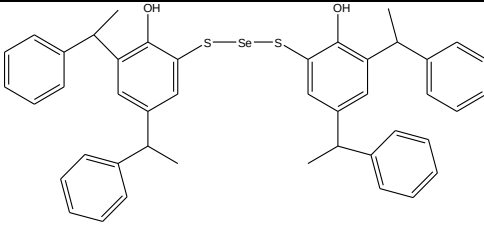
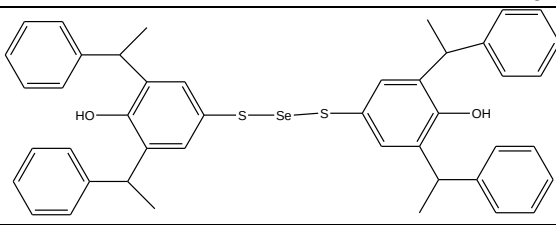
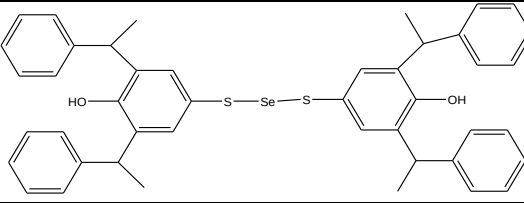
Образцы	Концентрация, %	Э, %
 1	0,025	42
	0,05	45
	0,1	47
	0,3	52
	0,5	60
	1,0	66
 2	0,025	41
	0,05	51
	0,1	67
	0,3	71
	0,5	75
	1,0	77
 3	0,025	46
	0,05	53
	0,1	63
	0,3	67
	0,5	73
	1,0	85
 4	0,025	66
	0,05	67
	0,1	72
	0,3	75
	0,5	78
	1,0	80
 5	0,025	46
	0,05	52
	0,1	61
	0,3	67
	0,5	70
	1,0	82
 6	0,025	64
	0,05	68
	0,1	74
	0,3	78
	0,5	87
	1,0	90
 7	0,025	68
	0,05	70
	0,1	76
	0,3	80
	0,5	82
	1,0	86
 8	0,025	57
	0,05	62
	0,1	67
	0,3	73
	0,5	82
	1,0	88

Таблица 2

Значения структурных параметров соединений 2-8, рассчитанные методами B3LYP/6-31+G(d,p) и UB3LYP/6-311++G(d,p)
Table 2. Values of structural parameters of compounds 2-8 calculated by methods B3LYP/6-31+G(d,p) and UB3LYP/6-311++G(d,p)

Соединение	R _{OH}	q _H		q _O		q _S		ω, эВ
2	0,967	-0,566	-0,554	1,738	0,303	-0,008	0,049	1,738
3	0,974	-0,553	-0,534	1,718	0,284	-0,023	0,063	1,718
4	0,975	-0,559	-0,537	1,763	0,277	-0,023	0,069	1,763
5	0,969	-0,569	-0,563	1,449	0,305	0,014	0,015	1,449
6	0,972	-0,555	-0,565	2,016	0,263	0,043	0,179	2,016
7	0,975	-0,567	-0,557	1,895	0,310	0,083	0,180	1,895
8	0,969	-0,572	-0,570	1,735	0,307	0,056	0,105	1,735

В то же время, антиокислительная активность дисульфидов и селенидов связана с действием серы на разрушение гидропероксидов ROOH. Учитывая тот факт, что атом серы при этом подвергается окислению, можно предположить, что эта реакция будет идти эффективнее при большей доступности электронов атома серы, а следовательно, при локализации на нем более отрицательного заряда [25]. Следовательно, от этих соединений можно ожидать наибольшую реакционную способность в реакциях разрушения гидропероксидов ROOH. Примечателен тот факт, что обе эти структуры имеют схожие особенности строения с α-метилбензильными заместителями в *o*- и *n*-положении и сульфидной группой в *o*-положении фенола.

При соотнесении данных результатов, можно предположить, что соединения **4** и **5** будут иметь наибольшую антиокислительную эффективность, имея наибольшие реакционные способности и по гидроксильной, и по сульфидной группам, что хорошо соотносится с экспериментальными данными [21].

По результатам расчетов и экспериментальным данным были построены численные адекватные уравнения влияния концентраций – x_1 (% масс.конц), электрофильности x_2 на антиокислительную способность (Y) данных присадок к маслам в виде

$$Y = A + Bx_1^2 + Cx_2 + Dx_1 \cdot x_2 \quad (2)$$

В табл. 3 представлены численные коэффициенты полученных зависимостей исследуемых образцов, где R^2 – коэффициент детерминации.

Таблица 3

Коэффициенты уравнения (2) для исследуемых веществ
Table 3. Coefficients of equation (2) for the studied substances

Соединение	A	B	C	D	R^2
2	-	-67	27,55	55,5	81
3	-	-30	29,37	37,5	91,5
4	-48,94	-22,11	65,31	20,28	94,78
5	-	-27,71	34,28	41,75	92
6	-	-34,5	32,38	29,4	96,6
7	-	-25,74	36,26	23,11	94,4
8	-	-33,96	33,64	36,11	96,6
1	-	-20,86	24,225	25,92	98,7

РЕЗУЛЬТАТЫ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

По результатам исследований видно (рисунки), что введение метильной группы в *n*-положение бензольного кольца пространственно затрудненного фенола приводит к увеличению антиокислительной эффективности [21, 22]. Так, эффективность соединения **3** больше эффективности соединения **2** в указанных условиях при очень низких до 0,03% и высоких концентрациях (с 0,75%-

1%). Еще большее усиление антиокислительной эффективности наблюдается при введении в *n*-положение α-метилбензильной группы. Из графика видно, что эффективность соединения **4** больше, чем у вещества **3**, но при достижении 0,65% концентрации эффективность соединения **4** падает, а у соединения **3** возрастает. Однако для соединения **5**, имеющего дисульфидную группу в *n*-положении и две α-метилбензильные группы в *o*-положении,

можно заметить меньшее проявление антиоксидантной эффективности, чем для соединения **4** и сопоставимое с эффективностью соединения **3**. Но после достижения концентрации 0,82%, окислительная способность **5** лучше, чем у **4**. Это связано с двумя объемными α -метилбензильными заместителями в *o*-положении относительно гидроксильной группы, которые сильно экранируют ее, затрудняя тем самым реакцию с пероксидными радикалами [25].

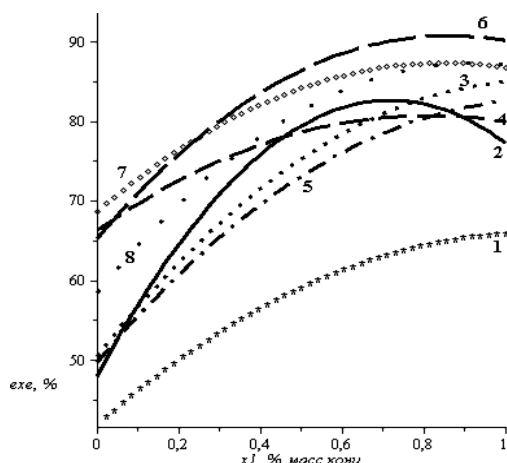


Рис. Зависимости антиоксидантной активности исследуемых присадок от их концентраций x_1 : **1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8** – вещества, согласно табл. 1

Fig. Dependences of the antioxidant activity of the additives studied on their concentrations x_1 : **1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8** – substances, according to Table 1

Для пространственно-затрудненных фенолов, содержащих Se в своем составе, наблюдается аналогичная тенденция. Так, замена метильной группы соединения **7** на α -метилбензильную в соединении **6** приводит к увеличению антиоксидантной эффективности (до концентрации 0,3%), а для соединения **8**, имеющего -S-Se-S-мостик в *p*-положении, эффективность меньше, чем для соединений **6** и **7**, что также объясняется возмож-

ными стерическими затруднениями для гидроксильной группы.

Проведенные исследования показывают, что Se-содержащие производные α -метилбензилфенола проявляют большую антиоксидантную активность и являются эффективными ингибиторами смазочных масел и смазочно-охлаждающих жидкостей. Данные соединения имеют большее число активных центров и, следовательно, могут прерывать большее число цепей окисления, чем вещества, содержащие дисульфидный мостик.

Эффективность пространственно-затрудненных фенолов обусловлена наличием объемных заместителей в *o*-положениях, оптимально экранирующих водород ОН-группы и, соответственно, малой активностью феноксильного радикала, образующегося в реакции с пероксидными радикалами из ингибитора.

ВЫВОДЫ

Таким образом, в работе математическим моделированием наглядно представлено влияние концентраций присадок на их антиоксидантную способность (рис. 1). Получены эмпирические зависимости антиоксидантной активности исследуемых присадок S- и Se-содержащих α -метилбензилбисфенолов (точность 81%-98,7%). Показано, что антиоксидантная эффективность рассмотренных присадок выше, чем у широко применяемой присадки «Агидол-1» (соединение **1**). Полученные значения структурных параметров соединений **1-8**, рассчитанные методом UB3LYP/6-311++G(d,p) [26], согласуются с экспериментальными данными [21].

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.

ЛИТЕРАТУРА

1. Денисов Е.Т., Ковалев Г.И. Окисление и стабилизация реактивных топлив. М.: Химия. 1983. 269 с.
2. Кулиев А.М. Химия и технология присадок к маслам и топливам. М.: Химия. 1972. 358 с.
3. Данилов А.М. Применение присадок в топливах. СПб.: Химиздат. 2010. 368 с.
4. Ризванова Г.И., Гафиятуллин Л.Г., Гарифуллин М.Ш. Особенности старения трансформаторного масла в реальных условиях. *Изв. вузов. Проблемы энергетики*. 2015. № 9-10. С. 91-94. DOI: 10.30724/1998-9903-2015-0-9-10-91-94.
5. Григорьев М.А. Качество моторного масла и надёжность двигателей. М.: Изд-во стандартов. 2009. 232 с.

REFERENCES

1. Denisov E.T., Kovalev G.I. Oxidation and stabilization of jet fuels. M.: Khimiya. 1983. 269 p. (in Russian).
2. Kuliev A.M. Chemistry and technology of additives to oils and fuels. M.: Khimiya. 1972. 358 p. (in Russian).
3. Danilov A.M. Application of additives in fuels. SPb.: Khimizdat. 2010. 368 p. (in Russian).
4. Rizvanova G.I., Gafiyatullin L.G., Garifullin M.Sh. Features of transformer oil aging in real conditions. *Izv. Vuzov. Problemy Energetiki*. 2015. N 9-10. P. 91-94 (in Russian). DOI: 10.30724/1998-9903-2015-0-9-10-91-94.
5. Grigoriev M.A. Motor oil quality and engine reliability. M.: Izd-vo standartov. 2009. 232 p. (in Russian).

6. Антоновский В.Л., Хурсан С.Л. Физическая органических пероксидов. М.: ИКЦ «Академкнига». 2003. 391 с.
7. Рудник Л.Р. Присадки к смазочным материалам. Свойства и применение. СПб.: Профессия. 2013. 928 с.
8. Дорогощинская В.А., Данилов А.М., Тонконогов Б.П. Присадки к топливам и смазочным маслам. М.: ИЦ РГУ нефти и газа. 2017. 290 с.
9. Нгуен З.Х., Новиков В.Ф. Проблема определения антиокислительной присадки в трансформаторном масле хроматографическими методами. *Проблемы энергетики*. 2020. Т. 22. № 5. С. 107-115. DOI: 10.30724/1998-9903-2020-22-5-107-115.
10. Золотов А.В., Кузьмина Г.Н., Золотов В.А., Бартко Р.В., Сипатров А.Г., Паренаго О.П. Композиция гетероорганических соединений как антиокислительная и противоизносная присадка к минеральным смазочным маслам. *Нефтехимия*. 2013. № 53(4). С. 297-301. DOI: 10.7868/S002824211304014X.
11. Зинина Н.Д., Тимашова А.Л., Павловская М.В., Гришин Д.Ф. Противоизносная присадка к дизельному топливу с ультранизким содержанием серы. *Нефтехимия*. 2014. № 54 (5). С. 399-404. DOI: 10.7868/S0028242114050116.
12. Алексанян К.Г., Яруллин Н.Р., Салманов С.Ю., Налетова А.В. Синтез новых антиокислительных присадок для топлива и смазочных масел на основе флороглуцина. *Нефтегазохимия*. 2017. № 1. С. 47-49.
13. Kolchina G.Yu., Poletaeva O.Yu., Babaev E.R., Movsumzade E.M. Reactivity of S- and Se-containing hindered phenols as multifunctional additives. *AIP Conf. Proc.* 2022. V. 2390. P. 020034.
14. Алексанян К.Г., Кошелев В.Н., Чебан Э.Г., Стоколос О.А., Киякова А.Ю., Сорокина А.С., Шамсутдинова Л.П., Газизов М.Б., Писцова А.Л., Алексанян Д.Р., Агаджанян С.А. Зависимость антиоксидантных свойств некоторых пространственно-замещенных фенолов от расчетных параметров строения молекул антиоксидантов. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2021. Т. 64. Вып. 11. С. 35-43. DOI: 10.6060/ivkkt.20216411.6476.
15. Акчурина Т.Х., Нагиева Э.А., Эфендиева С.С., Гамидова Ш.Я. Термоаналитические исследования высокощелочных модифицированных присадок алкилфенолятного типа. *Азербайджан. хим. журн.* 2014. № 1. С. 88-92.
16. Алексанян К.Г., Стоколос О.А., Яруллин Н.Р., Салманов С.Ю., Налетова А.В., Михайлов Э.Р., Агаджанян С.А. Синтез и изучение свойств производных метилфлороглуцина и флороглуцина в качестве антиокислительных присадок к маслам. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2019. Т. 62. Вып. 8. С. 132-138. DOI: 10.6060/ivkkt.20196208.5993.
17. Горюнова А.К., Лихтерова Н.М., Шаталов К.В., Клеттер Е.А. Исследование состава противоизносных присадок к топливам для реактивных двигателей. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2021. Т. 64. Вып. 1. С. 79-84. DOI: 10.6060/ivkkt.20216401.6290.
18. Мамедова А.Х., Кязим-заде А.К., Нагиева Э.А. Новые алкилфенолятные присадки к смазочным маслам. *Нефтеперераб. и нефтехимия*. 2010. № 9. С. 28-29.
19. Movsumzade E.M., Poletaeva O.Yu., Kolchina G.Yu. Mechanism of action of antioxidant additives for hydrocarbons. DGMK Tagungsbericht. 2014. P. 189-195.
20. Абу Аммар В.М., Греско С.В., Келарев В.И., Кошелев В.Н. Производные 2-имидазолина в молекулярном дизайне конденсированных гетероциклов с фрагментами
6. Antonovsky V.L., Khursan S.L. Physical chemistry of organic peroxides. M.: IKTs "Akademkniga". 2003. 391 p. (in Russian).
7. Rudnik L.R. Lubricant additives. Properties and application. SPb.: Professiya. 2013. 928 p. (in Russian).
8. Dorogochinskaya V.A., Danilov A.M., Tonkonogov B.P. Additives to fuels and lubricating oils. M.: ITs RGU nefti i gaza. 2017. 290 p. (in Russian).
9. Nguyen Z.Kh., Novikov V.F. The problem of determining the antioxidant additive in transformer oil by chromatographic methods. *Problemy Energetiki*. 2020. V. 22. N 5. P. 107-115 (in Russian). DOI: 10.30724/1998-9903-2020-22-5-107-115.
10. Zolotov A.V., Kuzmina G.N., Zolotov V.A., Bartko R.V., Sipatrov A.G., Parenago O.P. Composition of heteroorganic compounds as an antioxidant and antiwear additive for mineral lubricating oils. *Neftekhimiya*. 2013. N 53(4). P. 297-301 (in Russian). DOI: 10.7868/S002824211304014X.
11. Zinina N.D., Timashova A.L., Pavlovskaya M.V., Grishin D.F. Anti-wear additive for diesel fuel with ultra-low sulfur content. *Neftekhimiya*. 2014. N 54 (5). P. 399-404 (in Russian). DOI: 10.7868/S0028242114050116.
12. Aleksanyan K.G., Yarullin N.R., Salmanov S.Yu., Naletova A.V. Synthesis of new antioxidant additives for fuel and lubricating oils based on phloroglucin. *Neftekhimiya*. 2017. N 1. P. 47-49 (in Russian).
13. Kolchina G.Yu., Poletaeva O.Yu., Babaev E.R., Movsumzade E.M. Reactivity of S- and Se-containing hindered phenols as multifunctional additives. *AIP Conf. Proc.* 2022. V. 2390. P. 020034.
14. Aleksanyan K.G., Koshelev V.N., Cheban E.G., Stokolos O.A., Kilyakova A.Yu., Sorokina A.S., Shamsutdinova L.P., Gazizov M.B., Pistsova A.L., Aleksanyan D.R., Agadzhanian S.A. Dependence of the antioxidant properties of some spatially substituted phenols on the calculated parameters of the structure of antioxidant molecules. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2021. V. 64. N 11. P. 35-43. DOI: 10.6060/ivkkt.20216411.6476.
15. Akchurina T.Kh., Nagieva E.A., Efendieva S.S., Gamidova Sh.Ya. Thermoanalytical studies of high-alkaline modified additives of alkyl phenolate type. *Azerbaij. Chem. Zhurn.* 2014. N 1. P. 88-92 (in Russian).
16. Aleksanyan K.G., Stokolos O.A., Yarullin N.R., Salmanov S.Yu., Naletova A.V., Mikhailov E.R., Agadzhanian S.A. Synthesis and study of properties of derivatives of phloroglucinolmethylviologen as antioxidant additives to oils. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2019. V. 62. N 8. P. 132-138. DOI: 10.6060/ivkkt.20196208.5993.
17. Goryunova A.K., Likhterova N.M., Shatalov K.V., Kletter E.A. Study of the composition of antiwear additives for jet fuels. *ChemChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2021. V. 64. N 1. P. 79-84 (in Russian). DOI: 10.6060/ivkkt.20216401.6290.
18. Mamedova A.Kh., Kazim-zade A.K., Nagieva E.A. New alkyl phenolate additives for lubricating oils. *Nefttepererab. Neftekhimiya*. 2010. N 9. P. 28-29 (in Russian).
19. Movsumzade E.M., Poletaeva O.Yu., Kolchina G.Yu. Mechanism of action of antioxidant additives for hydrocarbons. DGMK Tagungsbericht. 2014. P. 189-195.
20. Abu Ammar V.M., Gresko S.V., Kelarev V.I., Koshelev V.N. 2-imidazoline derivatives in the molecular design of

- экранированного фенола. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2007. Т. 50. Вып. 9. С. 105-109.
21. Мамедова П.Ш., Бабаев Э.Р., Беляева А.С., Сафиуллина И.И., Азизова С.М., Колчина Г.Ю., Эйвазова И.М., Тухватуллин Р.Ф., Рольник Л.З. Исследование антиокислительных и антимикробных свойств серосодержащих производных пространственно-затрудненных фенолов. *Нефтеперераб. и нефтехимия*. 2017. № 8. С. 41-45.
22. Колчина Г.Ю., Тухватуллин Р.Ф., Бабаев Э.Р., Movsumzade Э.М. Пространственно-затрудненные фенолы как антиокислительные, антикоррозионные и антимикробные присадки к минеральным смазочным маслам. *Нефтегазохимия*. 2017. № 1. С. 10-13.
23. Kolchina G.Yu., Movsumzade E.M., Bakhtina A.Yu., Babaev E.R. Quantum-chemical modeling of S- and Se-containing derivatives of sterically-hindered phenols and their interaction with peroxides. *DGMK Tagungsbericht*. 2018. P. 169-175.
24. Тухватуллин Р.Ф., Колчина Г.Ю., Movsumzade 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.
25. Kolchina G.Yu., Babaev E.R., Poletaeva O.Yu., Bakhtina A.Yu., Movsumzade E.M. Study of the Interaction of S- and Se-containing Derivatives of Spatial-obstructed Phenols in Reactions with Peroxides. *DGMK Tagungsbericht*. 2019. P. 185-193.
26. Бабаев Э.Р. Оценка взаимосвязи структуры некоторых азотсодержащих алкиларилзамещенных фенолов с их реакционной способностью и функциональными свойствами. *Изв. вузов. Химия и хим. технология*. 2017. Т. 60. Вып. 5. С. 51-56. DOI: 10.6060/tcct.2017605.5569.
21. Mamedova P.Sh., Babaev E.R., Belyaeva A.S., Safiullina I.I., Azizova S.M., Kolchina G.Yu., Eyvazova I.M., Tukhvatullin R.F., Rolnik L.Z. Investigation of antioxidant and antimicrobial properties of sulfur-containing derivatives of sterically hindered phenols. *Neftepererab. Neftekhimiya*. 2017. N 8. P. 41-45 (in Russian).
22. Kolchina G.Yu., Tukhvatullin R.F., Babaev E.R., Movsumzade E.M. Hindered phenols as antioxidant, anticorrosive and antimicrobial additives to mineral lubricating oils. *Neftegazokhimiya*. 2017. N 1. P. 10-13. (in Russian).
23. Kolchina G.Yu., Movsumzade E.M., Bakhtina A.Yu., Babaev E.R. Quantum-chemical modeling of S- and Se-containing derivatives of sterically-hindered phenols and their interaction with peroxides. *DGMK Tagungsbericht*. 2018. P. 169-175.
24. Tukhvatullin R.F., Kolchina G.Y., Movsumzade E.M., Mamedova P.S., Babaev E.R. Synthesis and study of the geometry and electron density of sterically hindered phenols used as antioxidant additives for lubricating oils. *Chem-ChemTech [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.
25. Kolchina G.Yu., Babaev E.R., Poletaeva O.Yu., Bakhtina A.Yu., Movsumzade E.M. Study of the Interaction of S- and Se-containing Derivatives of Spatial-obstructed Phenols in Reactions with Peroxides. *DGMK Tagungsbericht*. 2019. P. 185-193.
26. Babaev E.R. Assessment of the relationship between the structure of some nitrogen-containing alkylaryl-substituted phenols and their reactivity and functional properties. *Chem-ChemTech [Izv. Vyssh. Uchebn. Zaved. Khim. Khim. Tekhnol.]*. 2017. V. 60. N 5. P. 51-56 (in Russian). DOI: 10.6060/tcct.2017605.5569.

Поступила в редакцию 21.02.2023
Принята к опубликованию 29.03.2023

Received 21.02.2023
Accepted 29.03.2023