

## NEWS

OF THE NATIONAL ACADEMY OF SCIENCES OF THE REPUBLIC OF KAZAKHSTAN  
SERIES CHEMISTRY AND TECHNOLOGY

ISSN 2224-5286

Volume 5, Number 419 (2016), 206 – 210

**S.B. Kasenova<sup>1</sup>, G.K. Mukusheva<sup>2</sup>, G.M. Baysarov<sup>2</sup>, B.K. Kasenov<sup>1</sup>,  
J.I. Sagintaeva<sup>1</sup>, S.M. Adekenov<sup>2</sup>, R.Zh. Hasenova<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> - J. Abishev Chemical-Metallurgical Institute, Karaganda, Kazakhstan, [kasenov1946@mail.ru](mailto:kasenov1946@mail.ru)

<sup>2</sup> - JSC "International Research and Production Holding" Phytochemistry "

### THERMODYNAMIC PROPERTIES DERIVATIVES OF FLAVONOIDS CIRSI LINEOL, ARTEMISETINE

**Abstract.** The study of thermodynamic characteristics of biologically active substances (BAS) has a certain value for the physical and chemical processes simulation with their participation, to establish the fundamental dependence "structure-property" and others. In this paper we present the results of the calculation of basic thermodynamic characteristics derivatives of flavonoids oxime cirsilineol  $C_{18}H_{17}NO_7$  (I) and bromo artemisetine  $C_{20}H_{19}BrO_8$  (II).

Karash and Frost, because: two methods chosen for calculating the enthalpy of combustion flavoniodov us they complement each other.

The averaged values of the enthalpy of combustion of these flavonoids are, respectively, (I)= - 9325±10 and (II)= - 10243±10 kJ / mol.

Given the enthalpy of combustion from the combustion reaction flavonoids Hess calculated formation enthalpy (I) and (II) in the liquid state, equal respectively – 188,1±10,0 and -343,1±10,0 kJ / mol.

According to the well-known empirical equation calculated melting enthalpy (I) and (II), which are, respectively, 14,7±0,7 and 12,4±0,6 kJ / mol.

Further, in view of the enthalpy of formation in the liquid state and the calculated melting enthalpy of formation of (I) and (II) in the solid state are equal respectively – 202,7±10,0 and –355,5±10,0 kJ / mol.

**Keywords:** flavonoid, enthalpy, combustion, melting, education.

УДК 541.11+547.972

**Ш.Б. Касенова<sup>1</sup>, Г.К. Мукушева<sup>2</sup>, Г.М. Байсаров<sup>2</sup>, Б.К. Касенов<sup>1</sup>,  
Ж.И. Сагинтаева<sup>1</sup>, С.М. Адекенов<sup>2</sup>, Р.Ж. Хасенова<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> – Химико-металлургический институт им. Ж. Абишева;

<sup>2</sup> – АО «Международный научно-производственный холдинг «Фитохимия»

### ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ПРОИЗВОДНЫХ ФЛАВОНОИДОВ ЦИРСИЛИНЕОЛА, АРТЕМИЗЕТИНА

**Аннотация.** Исследование термодинамических характеристик биологически активных соединений (БАС) имеет определенное значение для физико-химического моделирования процессов с их участием, для установления фундаментальной зависимости «состав-свойство» и др. В данной работе приводятся результаты расчета фундаментальных термодинамических характеристик производных флавоноидов оксима цирсинеола  $C_{18}H_{17}NO_7$  (I) и бром артемизетина  $C_{20}H_{19}BrO_8$  (II).

Для расчета энтальпии сгорания производных флавоноидов нами выбраны два метода: Караша и Фроста, т.к. они взаимно дополняют друг друга.

Усредненные значения энтальпии сгорания указанных флавоноидов равны соответственно (I)= - 9325±10 и (II)= - 10243±10 кДж/моль.

С учетом энтальпии сгорания из реакций горения флавоноидов по Гессу вычислили энтальпии образования (I) и (II) в жидком состоянии, равные соответственно  $-188,1 \pm 10,0$  и  $-343,1 \pm 10,0$  кДж/моль.

По известному эмпирическому уравнению вычислены энтальпии плавления (I) и (II), которые равны соответственно  $14,7 \pm 0,7$  и  $12,4 \pm 0,6$  кДж/моль.

Далее с учетом энтальпии образования в жидком состоянии и плавления вычислены энтальпии образования (I) и (II) в твердом состоянии, равные соответственно  $-202,7 \pm 10,0$  и  $-355,5 \pm 10,0$  кДж/моль.

**Ключевые слова:** флавоноид, энтальпия, сгорания, плавления, образования.

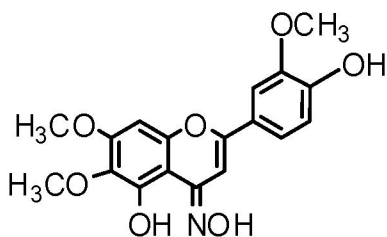
### Введение

Препараты на основе флавоноидов растительного происхождения широко применяются в медицине для профилактики и лечения гипо- и авитаминозов, поражений капилляров, для ускорения регенерации тканей при глубоких ранениях, трофических язвах и др. [1-4]. Термодинамические характеристики флавоноидов также вызывает особый интерес для сертификации и стандартизации лекарственных препаратов на их основе [5].

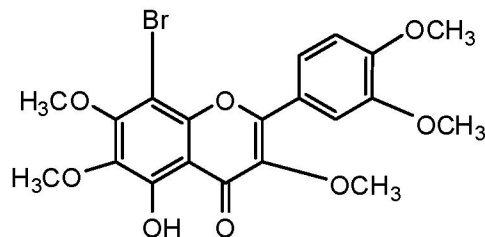
Следует отметить, что ряд авторов данной работы проводили систематические и целенаправленные исследования по изучению термохимических и термодинамических свойств флавоноидов [6-18].

### Методы исследования

Исследуемые флавоноиды имеют следующие структурные формулы:



Оксим цирсинеола  
 $C_{18}H_{17}NO_7$   
(Мол. масса=359,33 у.е.)



Бромпроизводное артемизетина  
 $C_{20}H_{19}BrO_8$   
(Мол. масса=467,26 у.е.)

Они получены на уровне фармакопейной чистоты в АО «Международной научно-производственный холдинг «Фитохимия» (г.Караганда) ( $C_{18}H_{17}NO_7$ , 96, 53 %;  $C_{20}H_{19}BrO_8$ , ~ 95,0%).

Энтальпию сгорания  $C_{18}H_{17}NO_7$  и  $C_{20}H_{19}BrO_8$  рассчитывали по уравнениям Караша и Фроста [19].

Уравнение Караша, используемое для расчета  $\Delta H^0_{\text{сгор}}$ , имеет следующий вид:

$$\Delta H^0_{\text{сгор}}(298,15), \text{ ккал / моль} = -26,050(4n_C + n_H - p) + \sum k_i \Delta_i, \quad (1)$$

где 26,050 ккал/моль – теплота разрыва связей C–C, C–H и последующего образования  $CO_2$  и  $H_2O$ ;  $n_C$  – число атомов углерода в соединении;  $n_H$  – число атомов водорода в соединении;  $p$  – число частично смещенных электронов в молекуле соединения;  $k_i$  – число одинаковых заместителей;  $\Delta_i$  – соответствующая данному заместителю тепловая поправка. Значения  $\Delta_i$  в виде таблицы представлены в [19].

Фрост усовершенствовал метод Караша. Расчет  $\Delta H^0_{\text{сгор}}(298,15)$  по Фросту вычисляется по формуле:

$$\Delta H^0_{\text{сгор}}(298,15), \text{ ккал/моль} = -(104,2n_C + 26,05n_H + 13,0n_{=} + 46,1n_{\equiv} + 6,5n_{=C} - 3,5n_{Ar-Alk} - 6,5n_{Ar-Ar}), \quad (2)$$

где  $n_C$  – число атомов углерода в молекуле;  $n_H$  – число атомов водорода;  $n_{=}$  – число двойных связей в молекуле алкенов или в боковых цепях циклических соединений;  $n_{\equiv}$  – число тройных связей в молекулах алкинов;  $n_{=C}$  – число двойных связей в кольце цикленов;  $n_{Ar-Alk}$  – число связей между арильными и алкильными группами;  $n_{Ar-Ar}$  – число связей между арильными группами [19].

Следует подчеркнуть, что методы Караша и Фроста относятся к приближенным способам расчета энтальпии сгорания.

Энтальпию плавления соединений вычисляли по эмпирическому уравнению [20]:

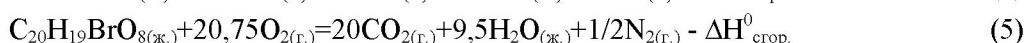
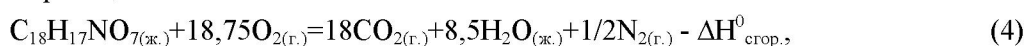
$$\Delta H_{\text{пл}}^0 = 44,4 \cdot T_{\text{пл}} - 4400. \quad (3)$$

Данное уравнение применяется для расчета  $\Delta H_{\text{пл}}^0$  слабополярных и полярных соединений. В нашем случае применение данного уравнения обусловлено наличием в составе молекул исследуемых соединений азота и брома.

#### Результаты исследования

Усредненные значения  $\Delta H_{\text{сгорания}}^0$   $\text{C}_{18}\text{H}_{17}\text{NO}_7$  и  $\text{C}_{20}\text{H}_{19}\text{BrO}_8$ , вычисленные по уравнениям (1) и (2), равны соответственно - 9325±10 и -10243±10 кДж/моль.

Далее исходя из реакций



вычислили стандартные энтальпии образования  $\text{C}_{18}\text{H}_{17}\text{NO}_7$  и  $\text{C}_{20}\text{H}_{19}\text{BrO}_8$  в жидком состоянии, равные соответственно - 188,1±10,0 и - 343,1±10,0 кДж/моль.

Следует отметить, что необходимые для расчета энтальпии образования флавоноидов по реакциям (4) и (5)  $\Delta_f H^0(\text{CO}_{2(\text{г.})}, 298,15 \text{ K}) = - 393,51 \pm 0,05$  кДж/моль и  $\Delta_f H^0(\text{H}_2\text{O}_{(\text{ж.})}, 298,15 \text{ K}) = - 285,83 \pm 0,04$  кДж/моль заимствованы из [21, 22].

Вычисленные значения  $\Delta H_{\text{пл}}^0$  по уравнению (3)  $\text{C}_{18}\text{H}_{17}\text{NO}_7$  и  $\text{C}_{20}\text{H}_{19}\text{BrO}_8$  равны соответственно 14,7±0,7 и 12,4±0,6 кДж/моль.

По уравнениям

$$\Delta_f H^0(298,15) \text{C}_{18}\text{H}_{17}\text{NO}_{7(\text{тв.})} = \Delta_f H^0(298,15) \text{C}_{18}\text{H}_{17}\text{NO}_{7(\text{ж.})} - \Delta H_{\text{пл}}^0 \text{C}_{18}\text{H}_{17}\text{NO}_7, \quad (6)$$

$$\Delta_f H^0(298,15) \text{C}_{20}\text{H}_{19}\text{BrO}_{8(\text{тв.})} = \Delta_f H^0(298,15) \text{C}_{20}\text{H}_{19}\text{BrO}_{8(\text{ж.})} - \Delta H_{\text{пл}}^0 \text{C}_{20}\text{H}_{19}\text{BrO}_8 \quad (7)$$

вычислили стандартные энтальпии образования  $\text{C}_{18}\text{H}_{17}\text{NO}_7$  и  $\text{C}_{20}\text{H}_{19}\text{BrO}_8$  в твердых состояниях, равные соответственно - 202,7±10,0 и - 355,5±10,0 кДж/моль.

#### Выводы

1. Впервые методами Караша и Фроста вычислены стандартные энтальпии сгорания флавоноидов оксима цирсилинеола ( $\text{C}_{18}\text{H}_{17}\text{NO}_7$ ), бромпроизводного артемизетина ( $\text{C}_{20}\text{H}_{19}\text{BrO}_8$ ).
2. Рассчитаны энтальпии плавления вышеуказанных соединений.
3. На основе вычисленных значений энтальпий сгорания и плавления рассчитаны значения стандартных теплот образования вышеперечисленных биологически активных веществ в жидком и твердом состояниях.
4. Полученные результаты, вносят определенный вклад в физическую химию биологически активных соединений флавоноидов и их производных, являются исходными информационными материалами для загрузки в фундаментальные банки данных и включения в справочники, представляют интерес для стандартизации и сертификации БАС, являющихся действующими веществами лекарственных препаратов.

#### ЛИТЕРАТУРА

- [1] Тараховский Ю.А., Селезнева И.И., Васильева Н.А. и др. Ускорение фибриллообразования и температурная стабилизация коллагена в присутствии таксифолина (дигидрокверцетина) // Бюллетень экспериментальной биологии и медицины. – 2007. – Т. 44, № 12. – С. 640-643.
- [2] Закроматов М.Н. Основы биохимии фенольных соединений. – М.: Высшая школа, 1974. – С. 25.
- [3] Прибыткова Л.Н., Адекенов С.М. Флавоноиды растений рода *Artemisia*. – Алматы: Гылым, 1999. – 180 с.
- [4] Абросимов В.К., Агафонов А.В., Чумакова Р.В. и др. Биологически активные вещества в растворах. Структура, термодинамика, реакционная способность. – М.: Наука, 2001. – 404 с.
- [5] Арзамасцев А.П., Сенов П.Л. Стандартные образцы лекарственных веществ. – М.: Медицина, 1978. – 248 с.
- [6] Касенова Ш.Б., Касенов Б.К., Тухметова Ж.К., Адекенов С.М. Химическая термодинамика биологически активных соединений – ряда терпеноидов, алкалоидов, флавоноидов и их синтетических аналогов. – Караганда: Типография «Гласир», 2008. – 208с.
- [7] Абилядаева А.Ж., Касенова Ш.Б., Касенов Б.К. и др. Термохимия флавоноида мирисетина // Журнал физ. химии. – 2014. – Т. 88, № 7-8. – С. 1093-1096.

- [8] Касенова Ш.Б., Мукушева Г.К., Касенов Б.К. и др. Энтальпия растворения флавоноидов в 95 %-ном этаноле при 25 °C // Журнал физ. химии. – 2015. – Т.89, №9. – С. 1604-1607.
- [9] Kassenova Sh.B., Kassenov B.K., Adekenov S.M. Thermochemistry of the series of biological active compounds. Scientific edition. – LapLambert Academic Publishing. Saarbrucken. Deutschland. Germany, 2015. – 252 p.
- [10] Касенова Ш.Б., Мукушева Г.К., Касенов Б.К., Дуйсенбаев Н.К., Адеkenов С.М. Оценка термодинамических свойств ряда производных флавоноида пиностробина // Материалы Всероссийской научной конференции «Химия и фармакология растительных веществ». – Сыктывкар: УРО РАН Институт химии, 4-6 июня 2014г. – С.88-89.
- [11] Абилдаева А.Ж., Касенова Ш.Б., Касенов Б.К., Рахимова Б.Б., Сагинтаева Ж.И., Давренбеков С.Ж., Адеkenов С.М. Термодинамические свойства ряда флавоноидов перспективных биологически активных соединений // Известия НАН РК. Серия химии и технологии. – 2013. – №1. – С. 91-94.
- [12] Касенова Ш.Б., Абилдаева А.Ж., Касенов Б.К., Рахимова Б.Б., Сагинтаева Ж.И., Давренбеков С.Ж., Адеkenов С.М. Оценка термодинамических свойств ряда полифенольных соединений – флавоноидов // Материалы докладов VIII-Международного симпозиума «Фенольные соединения»: фундаментальные и прикладные аспекты. – Москва: Институт физиологии растений им. К.А. Тимирязева РАН, 25 октября 2012г. – С.78-80.
- [13] Касенова Ш.Б., Абилдаева А.Ж., Касенов Б.К., Сагинтаева Ж.И., Давренбеков С.Ж., Куанышбеков Е.Е., Рахимова Б.Б., Поляков В.В., Адеkenов С.М. Термохимия биологически активного вещества – миррицетина // Тезисы докладов школы-конференции молодых ученых «Теоретическая и экспериментальная химия жидкофазных систем» (Крестовские чтения). – Россия, г. Иваново: ИХР РАН им. Г.А. Крестова, 13-16 ноября 2012. – С. 72.
- [14] Касенов Б.К., Тухметова Ж.К., Касенова Ш.Б., Смагулова Ф.М., Адеkenов С.М. Термохимия флавоноида эупатилина и его производного 7-метилового эфира эупатилина // Тез. докладов IV-Всероссийской научной конференции «Химия и технология растительных веществ». – Россия, г. Сыктывкар, 25-30 июня 2006г. – С. 199.
- [15] Касенов Б.К., Абилдаева А.Ж., Лежнева М.Ю., Касенова Ш.Б., Адеkenов С.М., Поляков В.В. Теплоемкость флавоноида кверцетина в интервале 173-523 К // Труды международной конференции «Химия и применение природных и синтетических биологически активных соединений». – г. Алматы: ИХН им. А.Бектурова, октябрь 2004г. – С.179-181.
- [16] Касенов Б.К., Абилдаева А.Ж., Донбаева Э.К., Касенова Ш.Б., Тулеуов Б.И., Адеkenов С.М. Термохимия флавоноида рутина // Материалы Международного научно-технического юбилейного симпозиума «Образование через науку». – Бишкек: КТУ им. Раззакова, 7-9 октября 2004г. – С.311-314.
- [17] Касенов Б.К., Тухметова Ж.К., Касенова Ш.Б., Абилдаева А.Ж., Адеkenов С.М. Термохимические характеристики ряда терпеноидов, алкалоидов и флавоноидов // Журнал прикладной химии. 2004. Т. 77, №3. С.514-516.
- [18] Касенов Б.К., Адеkenов С.М., Касенова Ш.Б., Тухметова Ж.К., Абилдаева А.Ж. Расчет термодинамических свойств флавоноидов // Материалы Международной научной конференции «Химия, технология и медицинские аспекты природных соединений». – Алматы: 2013. – С. 49.
- [19] Казанская А.С., Скобло В.А. Расчеты химических равновесий. – М.: Высшая школа, 1974. – 288 с.
- [20] Морачевский А.С., Сладков И.Б. Термодинамические расчеты в металлургии. М.: Металлургия, 1985. – 137 с.
- [21] Термические константы веществ / Справочник под ред. Глушко В.П. – М.: Наука, 1965. – Вып. 1. – 145 с.
- [22] Термические константы веществ / Справочник под ред. Глушко В.П. – М.: Наука, 1970. – Вып. 4. – 510 с.

## REFERENCES

- [1] Tarahovskij Ju.A., Selezneva I.I., Vasil'eva N.A. i dr. *Bulleten' jeksperimental'noj biologii i mediciny*. – **2007**, 44, 12, 640-643 (in Russ.).
- [2] Zakrometov M.N. Undamentals of Biochemistry of phenolic compounds. *M.: Vysshaja shkola*, 1974. 25 p. (in Russ.).
- [3] Pribytkova L.N., Adekenov S.M. Flavonoids Artemisia genus of plants. *Almaty: Fylym*, 1999. 180 p. (in Russ.).
- [4] Abrosimov V.K., Agafonov A.V., Chumakova R.V. i dr. Biologically active substances in solutions. The structure, thermodynamics, reactivity. *M.: Nauka*, 2001. 404 p.(in Russ.).
- [5] Arzamashev A.P., Senov P.L. Standard samples of drugs. *Medicina*, 1978. 248 p. (in Russ.).
- [6] Kasenova Sh.B., Kasenov B.K., Tuhmetova Zh.K., Adekenov S.M. Chemical Thermodynamics of biologically active compounds - a number of terpenoids, alkaloids, flavonoids and their synthetic analogues. *Karaganda: Tipografija «Glasir»*, 2008. 208 p. (in Russ.).
- [7] Abil'daeva A.Zh., Kasenova Sh.B., Kasenov B.K. i dr. *Zhurnal fiz. himii*. **2014**, 88, 7-8, 1093-1096 (in Russ.).
- [8] Kasenova Sh.B., Mukusheva G.K., Kasenov B.K. i dr. *Zhurnal fizicheskoy himii*. **2015**, 89, 9, 1604-1607 (in Russ.).
- [9] Kassenova Sh.B., Kassenov B.K., Adekenov S.M. Thermochemistry of the series of biological active compounds. *Scientific edition. LapLambert Academic Publishing. Saarbrucken. Deutschland. Germany*, 2015. 252 p. (in Eng.).
- [10] Kasenova Sh.B., Mukusheva G.K., Kasenov B.K., Dujsenbaev N.K., Adekenov S.M. *Materialy Vserossijskoj nauchnoj konferencii «Himija i farmokologija rastitel'nyh veshhestv»*. Syktyvkar, URO RAN. Institut himii, **2014**, 88-89 (in Russ.).
- [11] Abil'daeva A.Zh., Kasenova Sh.B., Kasenov B.K., Rahimova B.B., Sagintaeva Zh.I., Davrenbekov S.Zh., Adekenov S.M. *Izvestija NAN RK. Serija himii i tehnologii*. **2013**, 1, 91-94 (in Russ.).
- [12] Kasenova Sh.B., Abil'daeva A.Zh., Kasenov B.K., Rahimova B.B., Sagintaeva Zh.I., Davrenbekov S.Zh., Adekenov S.M. *Materialy dokladov VIII-Mezhdunarodnogo simpoziuma «Fenol'nye soedinenija»: fundamental'nye i prikladnye aspekty*. Moskva: Institut fiziologii rastenij im. K.A. Timirjazeva RAN, **2012**, 78-80 (in Russ.).
- [13] Kasenova Sh.B., Abil'daeva A.Zh., Kasenov B.K., Sagintaeva Zh.I., Davrenbekov S.Zh., Kuanyshbekov E.E., Rahimova B.B., Poljakov V.V., Adekenov S.M. *Tezisy dokladov shkoly-konferencii molodyh uchenyh «Teoreticheskaja i jeksperimental'naja himija zhidkofaznyh sistem» (Krestovskie chtenija)*. Rossiya, g. Ivanovo: IHR RAN im. G.A. Krestova, **2012**, 72 (in Russ.).

- [14] Kasenov B.K., Tuhmetova Zh.K., Kasenova Sh.B., Smagulova F.M., Adekenov S.M. *Tez. Doklady IV-Vserossiyskoj nauchnoj konferencii «Himija i tehnologija rastitel'nyh veshhestv. Rossiya, Syktyvkar, 2006*, 199. (in Russ.).
- [15] Kasenov B.K., Abil'daeva A.Zh., Lezhneva M.Ju., Kasenova Sh.B., Adekenov S.M., Poljakov V.V. *Trudy mezhdunarodnoj konferencii «Himija i primenenie prirodnih i sinteticheskikh biologicheskikh aktivnyh soedinenij»*. Almaty: IHN im. A. Bekturova, **2004**, 179-181 (in Russ.).
- [16] Kasenov B.K., Abil'daeva A.Zh., Donbaeva Je.K., Kasenova Sh.B., Tuleuov B.I., Adekenov S.M. *Materialy Mezhdunarodnogo nauchno-tehnicheskogo jubilejnogo simpoziuma «Obrazovanie cherez nauku»*. Bishkek: KTU im. Razzakova, **2004**, 311-314 (in Russ.).
- [17] Kasenov B.K., Tuhmetova Zh.K., Kasenova Sh.B., Abil'daeva A.Zh., Adekenov S.M. *Zhurnal prikladnoj himii*. **2004**, 77, 3, 514-516 (in Russ.).
- [18] Kasenov B.K., Adekenov S.M., Kasenova Sh.B., Tuhmetova Zh.K., Abil'daeva A.Zh. *Materialy mezhdunarodnoj nauchnoj konferencii «Himija, tehnologija i medicinskie aspekty prirodnih soedinenij»*. Almaty: 2013. 49 (in Russ.).
- [19] Kazanskaja A.S., Skoblo V.A. The calculations of chemical equilibria. M.: *Vysshaja shkola*, 1974. 288 p. (in Russ.).
- [20] Morachevskij A.S., Sladkov I.B. Thermodynamic calculations in metallurgy *Metallurgija*, 1985. 137 p. (in Russ.).
- [21] Termicheskie konstanty veshhestv. *Spravochnik pod red. Glushko V.P.* – M.: *Nauka*, **1965**, 145 (in Russ.).
- [22] Termicheskie konstanty veshhestv. *Spravochnik pod red. Glushko V.P.* – M.: *Nauka*, **1970**, 510 (in Russ.).

**Ш.Б. Касенова<sup>1</sup>, Г.К. Мұқышева<sup>2</sup>, Ғ.М. Байсаров<sup>2</sup>, Б.Қ. Касенов<sup>1</sup>,  
Ж.И. Сағынтаева<sup>1</sup>, С.М. Әдекенов<sup>2</sup>, Р.Ж. Хасенова<sup>2</sup>**

<sup>1</sup> - Ж. Әбішев атындағы Химия-металлургия институты, Қарағанды қ.

<sup>2</sup> – «Фитохимия» Халықаралық ғылыми өндірістік холдингі» АҚ, Қарағанды қ.

### **ФЛАВОНОИД ТУЫНДЫЛАРЫ ЦИРСИЛИНЕОЛ, АРТЕМИЗЕТИННІҢ ТЕРМОДИНАМИКАЛЫҚ ҚАСИЕТТЕРІ**

**Аннотация.** Биологиялық белсенді қосылыстардың термодинамикалық қасиеттерін зерттеу олардың қатысуымен болатын үрдістерді физика-химиялық модельдеу және «құрам-қасиет» және басқа да іргелі тәуелділіктерді анықтау үшін маңызы зор.

Берілген жұмыста флавоноид туындылары цирсилинеол оксиді  $C_{18}H_{17}NO_7$  (I) және бромартемизетиннің  $C_{20}H_{19}BrO_8$  (II) іргелі термодинамикалық қасиеттерін есептеудің нәтижелері келтірілген.

Флавоноидтардың жану энтальпиясын есептеу үшін бір-бірін толықтыратын екі: Караш және Фрост әдістері таңдалып алынды. Берілген флавоноидтардың жану энтальпияларының орташаланған мәні сәйкесінше (I) =  $-9325 \pm 10$  және (II) =  $-10243 \pm 10$  кДж/мольге тең.

Флавоноидтардың жану реакцияларынан Гесс бойынша жану энтальпиясын есепке ала отырып, (I) және (II) сұйық күйдегі түзілу энтальпиялары есептелініп алынды, олар сәйкесінше  $-188,1 \pm 10,0$  және  $-343,1 \pm 10,0$  кДж/мольге тең.

Белгілі эмпирикалық теңдеу бойынша (I) және (II) балқу энтальпиялары есептелінді, олар сәйкесінше  $14,7 \pm 0,7$  және  $12,4 \pm 0,6$  кДж/мольге тең.

Өрі қарай сұйық күйдегі түзілу мен балқу энтальпияларын есепке ала отырып, (I) және (II) қатты күйдегі түзілу энтальпиялары есептелініп алынды, олар сәйкесінше  $-202,7 \pm 10,0$  және  $-355,5 \pm 10,0$  кДж/мольге тең.

**Түйін сөздер:** флавоноид, энтальпия, жану, балқу, түзілу.

*Работа выполнена в рамках Научно-технической программы «Новые биологически активные соединения из растений и их синтетические аналоги на 2014-2016 годы» (Ф.0655) согласно договору № 114 от 26 апреля 2016 года между ГУ «Комитет науки Министерства образования и науки Республики Казахстан и АО «Международный научно-производственный холдинг «Фитохимия».*